



ВЕСТНИК

**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО № 34 (293)
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА 2012**

ISSN 2075-809X

СЕРИЯ

**«МАТЕМАТИКА.
МЕХАНИКА.
ФИЗИКА»**

Выпуск 7

Решением ВАК России включен в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий

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

Редакционная коллегия серии:

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

(отв. редактор),

к.ф.-м.н., доцент **Голубев Е.В.**

(отв. секретарь),

д.т.н., профессор **Гуревич С.Ю.**,

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

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

д.т.н., профессор **Садаков О.С.**,

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

д.т.н., профессор **Чернявский А.О.**

Серия основана в 2009 году.

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

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

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».

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России».

Периодичность выхода – 2 номера в год.

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

АНТОНОВ В.А., АМИНЕВА Н.Н. Конечные разрешимые группы с относительно малыми нормализаторами непримарных подгрупп	6
ДИЛЬМАН В.Л., НОСАЧЕВА А.И. Анализ напряженно-деформированного состояния неоднородной пластической полосы	11
КАРАЧИК В.В. Треугольник Паскаля и p -латинские матрицы	17
МЕДВЕДЕВ С.В. Признаки h -однородности пространства	31
ПАСИКОВ В.Л. Экстремальные стратегии в игровых задачах для линейных интегродифференциальных систем Вольтерра, I	33
РАСУЛОВ К.М. О решении трехэлементной краевой задачи со сдвигом Карлемана для аналитических функций в невырожденном случае	43
СОЛОДУША С.В. Численное моделирование нелинейных динамических систем с векторным входом квадратичными полиномами Вольтерра	53
ЯПАРОВА Н.М. О различных подходах к решению обратных граничных задач тепловой диагностики	60

Механика

АБДРАХИМОВ Р.Р., САПОЖНИКОВ С.Б., СИНИЦИН В.В. Исследование реологии суспензий для эффективного диспергирования многостенных углеродных нанотрубок в эпоксидной смоле	68
БРЫЛКИН А.В., БУКСБАУМ В.Б., КОЛЕСНИКОВ К.И., ПОРОШИН В.Б., УСОВА М.В. К оценке долговечности длинномерных гибких труб	75

Физика

ВОРОНЦОВ А.Г. К вопросу о движении атомов в неупорядоченных средах	81
ЖИВУЛИН Д.Е., БРЫЗГАЛОВ А.Н., ВОЛКОВ П.В., АКИМОВА В.М., РЫБИНА Э.Н. Способы упрочнения монокристаллов $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2\text{:Nd}^{3+}$	87
КОРЕНЧЕНКО А.Е., ИЛИМБАЕВА А.Ж., БЕСКАЧКО В.П. Численное исследование поведения лежащей капли на нагретой плоскости	92
МИРАСОВ В.Ш., КЛЕЩЕВА Р.Р., ГЕРМАН В.А., КЛЕЩЕВ Д.Г., РЯБКОВ Ю.И. О механизме фазовых превращений γ - и δ -FeOОН при термообработке в растворах MeOH (Me – Na, K): модель кристаллообразующих комплексов	98
РЕДНИКОВ С.Н. Проблемы исследования вязкости углеводов при высоких давлениях	107
СОЗЫКИН С.А., БЕСКАЧКО В.П. Электрические свойства комплексов углеродной нанотрубки (7,7) с одиночными атомами Li, Na, S и Se	113
СТАРУХИН В.А., МИРЗОЕВ А.А. Влияние гибридизации эффективного парного потенциала на расчетные свойства жидкого железа	120
ТРОИЦКИЙ А.А., БЕРЕЗИН В.М., ЛУКАШЕВ В.С. Структура и свойства углеродных пленок, получаемых электронно-лучевым распылением в вакууме	130

Краткие сообщения

БОЛЬШАКОВ М.В., КОМАРОВА М.А., КУНДИКОВА Н.Д. Определение модового состава излучения, распространяющегося в маломодовом оптическом волокне	138
ГЕРАСИМОВ А.М., КУНДИКОВА Н.Д., МИКЛЯЕВ Ю.В. Использование наночастиц диоксида титана для управления показателем преломления фоторезиста SU-8 для синтеза трехмерных фотонных кристаллов	142

ГУРЕВИЧ С.Ю., ПЕТРОВ Ю.В., ГОЛУБЕВ Е.В., ШУЛЬГИНОВ А.А. Экспериментальная установка для регистрации импульсных электромагнитных полей, возбуждаемых волнами Лэмба в магнитополяризованной металлической пластине	146
ГУЩИН Д.В. Об одной дифференциальной игре с фиксированным моментом окончания и с интегральной платой.....	150
ДЕРКУНОВА Е.А. Об одной сингулярно возмущенной системе трех уравнений в частных производных первого порядка.....	153
ИВАНОВ С.А. Область устойчивости в пространстве параметров рекурсивных нейронных сетей с топологией многомерного куба.....	157
КУНДИКОВА Н.Д., НОВИКОВ И.В. Взаимодействие солитонной пары в фоторефрактивной среде при синхронной модуляции интенсивности излучения	161
МАТВЕЕВА Л.В. Поведение полиномов Гронуолла на границе области суммируемости	165
МИРАСОВ В.Ш., КРИВЦОВ И.В., ЖЕРЕБЦОВ Д.А., КЛЕЩЕВ Д.Г., РЯБКОВ Ю.И. Фазообразование в системе $\text{FeSO}_4 - \text{KOH} - \text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}_2$	169
ПРОКУДИНА Л.А., САЛАМАТОВ Е.А. Влияние касательного напряжения на волновые характеристики жидкой пленки.....	173
САПОЖНИКОВ С.Б., КУДРЯВЦЕВ О.А. Особенности разрушения пластины из хрупкого материала при взаимодействии с ударником.....	177
СОЗЫКИН С.А., БЕСКАЧКО В.П. Механические свойства комплексов углеродной нанотрубки (7,7) с одиночными атомами Li, Na, S и Se	182
ТАЛАЛА К.А., ЛЕЙВИ А.Я., ЯЛОВЕЦ А.П. Анализ механизмов жидкофазного массопереноса вещества при плазменной обработке твердого тела	186
ТЕЛЬНОЙ К.А., СОЗЫКИН С.А., БЕСКАЧКО В.П. Структура и механические свойства фторированных углеродных нанотрубок	191
ХОХЛОВА Т.Н. Устойчивость полносвязной и звёздной структур нейронных сетей	195

CONTENTS

Mathematics

ANTONOV V.A., AMINEVA N.N. Finite solvable groups with relatively small nonprimary subgroups normalizers.....	6
DIL'MAN V.L., NOSACHEVA A.I. The analysis of the stress strain state of a heterogeneous plastic stripe.....	11
KARACHIK V.V. Pascal's triangle and p -latin matrices.....	17
MEDVEDEV S.V. Characteristics of h -homogeneity of a space.....	31
PASIKOV V.L. Extreme strategies in game-theory problems for linear integral differential Volterra systems, I.....	33
RASULOV K.M. To the solution of a three-element boundary value problem with a Carleman shift for analytical functions in the nondegenerate case.....	43
SOLODUSHA S.V. Numerical simulation of nonlinear dynamic systems with vector input by quadratic Volterra polynomials.....	53
YAPAROVA N.M. Different approaches to solve inverse boundary value problems of thermal diagnostics.....	60

Mechanics

ABDRAKHIMOV R.R., SAPOZHNIKOV S.B., SINITSIN V.V. Analysis of suspension rheology for effective dispersion of MWCNT in epoxy resin.....	68
BRYLKIN A.V., BUKSBAUM V.B., KOLESNIKOV K.I., POROSHIN V.B., USOVA M.V. Estimation of long coiled tubing durability.....	75

Physics

VORONTSOV A.G. On the atomic movement in disordered matter.....	81
ZHIVULIN D.E., BRYZGALOV A.N., VOLKOV P.V., AKIMOVA V.M., RYBINA E.N. Methods of monocrystals $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$: Nd^{3+} reinforcement.....	87
KORENCHENKO A.E., ILIMBAEVA A.J., BESKACHKO V.P. Numerical study of a sessile drop on a heated substrate.....	92
MIRASOV V.Sh., KLESCHEVA R.R., GERMAN V.A., KLESCHEV D.G., RYABKOV Yu.I. Mechanism of phase transformations γ - and δ -FeOOH during heat treatment in solutions MeOH (Me – Na, K): model of crystal-forming complexes.....	98
REDNIKOV S.N. Difficulties in research of viscosity of hydrocarbons at high pressure.....	107
SOZYKIN S.A., BESKACHKO V.P. Electrical properties of carbon nanotube (7,7) complexes with single atoms Li, Na, S and Se.....	113
STARUKHIN V.A., MIRZOEV A.A. The influence of effective pair potential hybridization on the liquid iron properties.....	120
TROITSKIY A.A., BEREZIN V.M., LUKASHEV V.S. Structure and properties of carbon films produced by electron-beam evaporation in vacuum.....	130

Short communications

BOLSHAKOV M.V., KOMAROVA M.A., KUNDIKOVA N.D. Determination of the mode composition propagating in a few-mode optical fiber.....	138
GERASIMOV A.M., KUNDIKOVA N.D., MIKLYAEV Yu.V. The use of titanium dioxide nanoparticles to control the refractive index of the photoresist SU-8 for the synthesis of three-dimensional photonic crystals.....	142
GUREVICH S.Yu., PETROV Yu.V., GOLUBEV E.V., SHULGINOV A.A. Experimental setup for registration pulsed electromagnetic fields, excited by Lamb waves in magnetically polarized metal plate.....	146

GUSHCHIN D.V. About one differential game with fixed time of the termination and with the integrated price	150
DERKUNOVA E.A. On some singular perturbed system of three equations in partial derivatives of the first order	153
IVANOV S.A. The stability domain in the parameters space of recursive neural networks with hypercube topology.....	157
KUNDIKOVA N.D., NOVIKOV I.V. Soliton pair interaction in a photorefractive medium at synchronous modulation of light intensity	161
MATVEEVA L.V. Behavior of Gronwall polynomials on the boundary of summability domain.....	165
MIRASOV V.S., KRIVTSOV I.V., ZHEREBTSOV D.A., KLESCHEV D.G., RYABKOV Yu.I. Phase formation in the system $\text{FeSO}_4 - \text{KOH} - \text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}_2$	169
PROKUDINA L.A., SALAMATOV E.A. Shear stress influence on wave characteristics of liquid film.....	173
SAPOZHNIKOV S.B., KUDRYAVTSEV O.A. Aspects of brittle plate fracture due to interaction with indenter	177
SOZYKIN S.A., BESKACHKO V.P. Mechanical properties of the complexes of carbon nanotube (7,7) with single Li, Na, S and Se atoms.....	182
TALALA X.A., LEYVI A.Ya., YALOVETS A.P. Mechanism analysis of a liquid-phase mass-transfer substance at plasma processing of a solid body.....	186
TELNOY K.A., SOZYKIN S.A., BESKACHKO V.P. Structure and mechanical properties of fluorinated carbon nanotubes	191
KHOKHLOVA T.N. Stability of complete-connected and stellar structure of neural networks	195

КОНЕЧНЫЕ РАЗРЕШИМЫЕ ГРУППЫ С ОТНОСИТЕЛЬНО МАЛЫМИ НОРМАЛИЗАТОРАМИ НЕПРИМАРНЫХ ПОДГРУПП

В.А. Антонов¹, Н.Н. Аминева²

Получено полное описание конечных разрешимых групп, в которых для любой непримарной подгруппы A индекс $|N(A):A \cdot C(A)|$ делит некоторое простое число.

Ключевые слова: группа, подгруппа, автоморфизм, нормализатор, централизатор.

В этой работе через $N(A)$ и $C(A)$ обозначаются нормализатор и централизатор подгруппы A во всей группе G . Если A – произвольная подгруппа группы G , то $N(A) \geq A \cdot C(A)$, а индекс $|N(A):A \cdot C(A)|$ равен порядку группы внешних автоморфизмов подгруппы A , индуцированных элементами группы G . В данной работе изучается строение конечных групп G , в которых для любой непримарной подгруппы A почти все ее автоморфизмы, индуцированные элементами из G , являются внутренними. А именно, для любой такой подгруппы A индекс $|N(A):A \cdot C(A)|$ делит некоторое простое число. Такие группы будем называть NS_{np} -группами.

В дальнейшем p , q и r – простые числа, причем $p \neq q$.

Отметим, что свойство быть NS_{np} -группой переносится на подгруппы и факторгруппы.

Нсабелеву конечную p -группу G условимся называть (p, n) -группой, если G обладает абелевой максимальной подгруппой и факторгруппа $G/Z(G)$ является группой максимального класса n . В частности, $(p, 1)$ -группы это p -группы с условием $|G/Z(G)| = p^2$. Отметим еще, что если G является (p, n) -группой и $n > 1$, то $|G/(G' \cdot Z(G))| = p^2$ и абелева максимальная подгруппа из G является характеристической подгруппой группы G .

Лемма ([1], теорема 1). В нсабелевой конечной p -группе G в том и только том случае индекс $|N(A):A \cdot C(A)|$ делит p для любой подгруппы A , когда G является (p, n) -группой для некоторого числа n .

Теорема 1. Непримарная нсабелева нильпотентная группа G в том и только том случае является NS_{np} -группой, когда $G = P \times H$, подгруппа H абелева, а силовская p -подгруппа P является (p, n) -группой для некоторого числа n .

Доказательство. Если P и Q – нсабелевы силовские p - и q -подгруппы из G , $G = P \times Q \times R$, а A и B – максимальные абелевы подгруппы из P и Q соответственно, то для подгруппы $H = A \times B \times R$ индекс $|N(H):H \cdot C(H)| = |G:H|$ делится на pq , что невозможно. Поэтому только одна силовская подгруппа группы G нсабелева. Пусть P – эта подгруппа и $G = P \times R$. Если A – произвольная несединичная подгруппа из P и $H = A \times R$, то из того, что индекс $|N(H):H \cdot C(H)|$ делит p следует, что и $|N_P(A):A \cdot C_P(A)|$ тоже делит p . В силу леммы P является (p, n) -группой для некоторого числа n .

Достаточность следует из леммы.

Теорема доказана.

¹ Антонов Владимир Алексеевич – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей математики, Южно-Уральский государственный университет.

² Аминева Нагия Нажитовна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей математики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: nariya_amineva@mail.ru

Теорема 2. Конечная ненильпотентная разрешимая группа G в том и только том случае является NS_{np} -группой, когда выполняется один из следующих случаев:

1) $G = H \lambda P$, где H – абелева холлова p' -подгруппа из G , $|P : C_p(H)| = p$, а группа P либо абелева, либо является (p, n) -группой, и если $C_p(H)$ неабелев, то $n = 1$ и для некоторого $z \in Z(P)$ $P = C_p(H) \cdot \langle z \rangle$;

2) $G = H \lambda P$, $H = Q \times K$, силовская q -подгруппа Q группы G является $(q, 1)$ -группой и P действует на $Q/Z(Q)$ неприводимо, подгруппа K абелева, а силовская p -подгруппа P группы G либо абелева, либо является (p, n) -группой, $C_p(H)$ абелев и $|P : C_p(H)| = p$;

3) $G = P \lambda \langle x \rangle$, P – силовская p -подгруппа, $|x| = q$ и для любой x -допустимой подгруппы A из P индекс $|(N_P(A) \cap C(x)) : (A \cap C(x)) \cdot (C_p(A) \cap C(x))|$ делит p ;

4) $G = P \lambda \langle x \rangle$, P – силовская p -подгруппа, $|x| = q^2$, $P \lambda \langle x^q \rangle$ является группой типа 3), для любой x -допустимой подгруппы A из P индекс $|(N_P(A) \cap C(x)) : (A \cap C(x)) \cdot (C_p(A) \cap C(x))|$ делит p , и если при этом $[x, A] \neq 1$, то $C_p(x^q) = (A \cap C_p(x^q)) \cdot (C_p(A) \cap C(x^q))$;

5) $G = P \lambda (\langle x \rangle \times \langle y \rangle)$, $x^q = y^r = 1$, $r \neq p$, подгруппа $P \lambda \langle t \rangle$ является группой типа 3) для любого элемента t простого порядка из $\langle x \rangle \times \langle y \rangle$, и если $A = \langle x, y \rangle$ -допустимая подгруппа из P , то индекс $|(N_P(A) \cap C(\langle x, y \rangle)) : (A \cap C(\langle x, y \rangle)) \cdot (C_p(A) \cap C(\langle x, y \rangle))|$ делит p , и если, например, $x \notin C(A)$, то $C_p(y) = (A \cap C(y)) \cdot (C_p(A) \cap C(y))$;

6) $G = P \lambda (\langle x \rangle \lambda \langle y \rangle)$, $x^q = y^r = 1$, $r \neq p$, $xy \neq yx$, подгруппа $P \lambda \langle t \rangle$ является группой типа 3) для любого неединичного элемента $t \in \langle x \rangle \lambda \langle y \rangle$, и если $A = \langle x, y \rangle$ -допустимая подгруппа из P , то индекс $|(N_P(A) \cap C(\langle x, y \rangle)) : (A \cap C(\langle x, y \rangle)) \cdot (C_p(A) \cap C(\langle x, y \rangle))|$ делит p , а $C_p(x) = (A \cap C(x)) \cdot (C_p(A) \cap C(x))$;

7) $G = (F \lambda \langle x \rangle) \cdot \langle y \rangle$, $F \cdot \langle y \rangle$ – силовская p -подгруппа G , $|x| = q$, $y^p \in F$, $[x, y] \notin F$, подгруппа $F \lambda \langle x \rangle$ – группа типа 3), а $(C_p(x) \times \langle x \rangle) \cdot \langle y \rangle$ – группа типа 1), и если $A = \langle x, y \rangle$ -допустимая подгруппа из P и $H = A \cdot \langle x, y \rangle$, то $|C_{N(H)}(H) : C(H)|$ делит p , а

$$C_F(x) = (A \cap C(x)) \cdot (C_F(A) \cap C(x));$$

8) $G = (F \lambda (\langle x \rangle \times \langle y \rangle)) \cdot \langle t \rangle$, F является p -группой, $x^q = y^q = 1$, $t' \in F$, элемент t действует на $\langle x \rangle \times \langle y \rangle$ неприводимо, подгруппа $F \lambda (\langle x \rangle \times \langle y \rangle)$ является группой типа 5), при этом, если $r \neq p$, то $F \lambda \langle t \rangle$ – группа типа 3), и если $A = \langle x, y, t \rangle$ -допустимая подгруппа из F , то $C_F(\langle x \rangle \times \langle y \rangle) = (A \cap C(\langle x \rangle \times \langle y \rangle)) \cdot (C_F(A) \cap C(\langle x \rangle \times \langle y \rangle))$.

Доказательство. Обозначим через F подгруппу Фиттинга группы G . Тогда, как известно, $C(F) \leq F$.

Предположим сначала, что подгруппа F не является примарной группой. Тогда F либо абелева, либо является группой из теоремы 1, а $|G : F| = p$ для некоторого простого числа p . Это означает, в частности, что $G = H \lambda P$, где H – нильпотентная холлова p' -подгруппа из G , а P – силовская p -подгруппа группы G .

Если A произвольная неединичная подгруппа из P и $B = H \lambda A$, то из того, что $H \cdot N_p(H) \leq N(B)$, $C(B) \leq C(A)$ и определения NS_{np} -группы следует, что индекс $|N_p(A) : A \cdot C_p(A)|$ делит p , т.е. подгруппа P либо абелева, либо является (p, n) -группой.

Предположим сначала, что подгруппы P и H абелевы. Если $|P| > p$, а – элемент простого порядка из P и $B = H \lambda \langle a \rangle$, то $|P : C_p(H)| = |G : B \cdot C(B)| = p$, т.е. G – группа типа 1) из условия теоремы.

Пусть теперь H абелева, а P является (p, n) -группой. Если подгруппа H непримарна, то $|P : C_p(H)| = p$. Если же H является q -группой для некоторого простого числа q , то из неприводимости

марности F следует, что $F \cap P \neq 1$. Но тогда и $A = F \cap Z(P) \neq 1$, т.е. и в этом случае $|P : C_P(H)| = |G : H \cdot A \cdot C(H \cdot A)| = p$. Предположим, что подгруппа $C_P(H)$ неабелева. Если $n = 1$, то $P = C_P(H) \cdot Z(P)$, т.е. $P = C_P(H) \cdot \langle z \rangle$, где $z \in Z(P)$ и G – группа типа 1). Пусть $n > 1$ и $P = T \cdot \langle x \rangle$, где T – абелева максимальная подгруппа из P . Так как $C_P(H)$ неабелева, то можно считать, что $x \in C(H)$, т.е. $C_P(H) = C_T(H) \cdot \langle x \rangle$. Пусть $P_0 = C_T(H)$ и $A = H \times P_0$. Из $H \triangleleft G$ следует, что $P_0 \triangleleft P$. Так как P_0 максимальна в T , то $|P : P_0| = p^2$. Из $n > 1$ следует, что $C_P(P_0) = T$ и, следовательно, $C(A) = C(H) \cap C(P_0) = ((H \times P_0) \cdot \langle x \rangle) \cap (H \lambda T) = H \times P_0 = A$. Но тогда $|G : A \cdot C(A)| = |P : P_0| = p^2$, что невозможно. Таким образом, при $n > 1$ подгруппа $C_P(H)$ абелева и G – группа типа 1).

Предположим теперь, что подгруппа H неабелева. Тогда $H = Q \times K$, где K – абелева холова q' -подгруппа из H , а Q является (q, n) -группой для некоторого $n \geq 1$. Если $n > 1$, то абелева максимальная подгруппа T является характеристической подгруппой Q . Если при этом $K \neq 1$, то подгруппа $A = T \times K$ непримарна и инвариантна в G . Но тогда из $C_Q(A) = T$ и определения NS_{np} -групп следует, что индекс $|N(A) : A \cdot C(A)| = q$, т.е. $P \leq C(A)$, и, следовательно, группа P действует приводимо на факторгруппе $Q/Q' = \langle aQ' \rangle \times \langle xQ' \rangle$, где $a \in T$ и $Q = T \cdot \langle x \rangle$. В силу теоремы Машке ([2], теорема 20.2.2) можно считать, что подгруппа $T_1 = Q' \cdot \langle x \rangle$ тоже P -допустима. Как и выше, получим $P \leq C(T_1 \times K)$. Отсюда следует, что $P \leq C(T_1 \cdot T) = C(Q)$ и $G = Q \times (K \lambda P)$. Пусть A – произвольная подгруппа из $R = K \lambda P$ и $B = T \times A$. Так как $|N(B) : B \cdot C(B)|$ делит простое число и $x \in N(B) \setminus (B \cdot C(B))$, то этот индекс равен q и, следовательно, $N_R(A) = A \cdot C_R(A)$. Из произвольности A и леммы 2 из [3] следует, что группа R абелева и G нильпотентна, что невозможно.

Таким образом, в случае $n > 1$ подгруппа K тривиальна. Но тогда из непримарности F следует, что $P \cap F \neq 1$. Заменяя в предыдущих рассуждениях подгруппу K подгруппой $P \cap F$, снова получим противоречие. Следовательно, Q является $(q, 1)$ -группой и P действует на $Q/Z(Q)$ неприводимо. Если A – произвольная неединичная подгруппа из P и $B = H \lambda A$, то из того, что $|N(B) : B \cdot C(B)|$ делит p , следует, что и $|N_P(A) : A \cdot C_P(A)|$ тоже делит p , т.е. P либо абелева, либо является (p, n) -группой. Если $C_P(H)$ неабелева, то F является нильпотентной NS_{np} -группой, содержащей две неабелевы силовские подгруппы Q и $C_P(H)$, что невозможно. Таким образом, в этом случае G является группой типа 2).

В дальнейшем считаем, что F является p -группой для некоторого простого числа p . Пусть A/F – минимальная нормальная подгруппа группы G/F . Тогда A/F является элементарной абелевой q -группой, $q \neq p$. Если a – элемент порядка q из A и $B = F \lambda \langle a \rangle$, то из $C(B) \leq C(F) \leq F \leq B$ и определения NS_{np} -группы следует, что индекс $|A : B|$ делит q , т.е. $|A/F| \leq q^2$. Так как $|G : A \cdot C(A)| = |G : A|$ делит простое число, то возможен только один из следующих случаев: а) $|G/F| = q$; б) $|G/F| = qr$; в) $|G/F| = q^2 r$. Рассмотрим каждый из этих случаев:

а) $G = F \lambda \langle x \rangle$, $x^q = 1$. Пусть A – x -допустимая подгруппа из F и $H = A \lambda \langle x \rangle$. В силу леммы Фраттини ([2], лемма 17.1.8)

$$N(H) = A \cdot N_{N(H)}(\langle x \rangle) = A \cdot C_{N(H)}(x) = (A \cdot C_{N_F(A)}(x)) \lambda \langle x \rangle,$$

а $H \cdot C(H) = A(C_F(A) \cap C(x)) \lambda \langle x \rangle$. Поэтому

$$N(H)/H \cdot C(H) = A \cdot (N_F(A) \cap C(x)) / A \cdot (C_F(A) \cap C(x)) \cong (N_F(A) \cap C(x)) / (C_F(A) \cap C(x)) \cdot (A \cap C(x)),$$

т.е. индекс $|(N_F(A) \cap C(x)) : (C_F(A) \cap C(x)) \cdot (A \cap C(x))|$ делит p и G – группа типа 3);

б) Предположим, сначала, что $G = F \lambda \langle x \rangle$, $|x| = q^2$. Тогда $F \lambda \langle x^q \rangle$ – группа типа 3). Пусть A – неединичная x -допустимая подгруппа из F и $H = A \lambda \langle x \rangle$. Как и в пункте а) получим, что $|(N_F(A) \cap C(x)) / (C_F(A) \cap C(x)) \cdot (A \cap C(x))|$ делит p . Рассмотрим подгруппу $K = A \lambda \langle x^q \rangle$. Если $x \notin C(A)$, то из $x \in N(K)$ следует, что $|N(K) : K \cdot C(K)| = q$. Но тогда $N_F(A) \cap C(x^q) = (C_F(A) \cap C(x^q)) \cdot (A \cap C(x^q))$.

Заменив в предыдущих рассуждениях подгруппу A на x -допустимую подгруппу $N_F(A)$, будем иметь

$$N_F(N_F(A)) \cap C(x^q) = (C_F(N_F(A)) \cap C(x^q)) \cdot (N_F(A) \cap C(x^q)) = (C_F(A) \cap C(x^q)) \cdot (A \cap C(x^q)).$$

Продолжая этот процесс и учитывая, что F удовлетворяет нормализаторному условию, через конечное число шагов получим $C_F(x^q) = C_A(x^q) \cdot C_{C_F(A)}(x^q)$, т.е. G – группа типа 4).

Случай $G = F \lambda (\langle x \rangle \times \langle y \rangle)$, где $x^q = y^r = 1$, $r \neq p$, рассматривается аналогично. При этом получим группу типа 5).

Пусть теперь $G = F \lambda (\langle x \rangle \lambda \langle y \rangle)$, $x^q = y^r = 1$, $r \neq p$ и $xy \neq yx$. Тогда для любого неединичного элемента $t \in \langle x, y \rangle$ подгруппа $F \lambda \langle t \rangle$ является группой типа 3). Пусть A – $\langle x, y \rangle$ -допустимая подгруппа из F и $H = A \lambda \langle x, y \rangle$. Как и выше, несложно получить, что индекс $|(N_F(A) \cap C(\langle x, y \rangle)) / (C_F(A) \cap C(\langle x, y \rangle)) \cdot (A \cap C(\langle x, y \rangle))|$ делит p . Если же $H = A \lambda \langle x \rangle$, то из $y \in N(H) \setminus C(H)$ следует, что $|N(H) : H \cdot C(H)| = r$. Как и выше, это приводит к равенству $C_F(x) = C_A(x) \cdot C_{C_F(A)}(x)$, т.е. G – группа типа 6).

Предположим, наконец, что $|G/F| = pq$, т.е. $G = (F \lambda \langle x \rangle) \cdot \langle y \rangle$, $x^q = 1$, $y^p \in F$. Так как $\langle F, y \rangle$ не инвариантна в G , то $[x, y] \notin F$. Тогда $F \lambda \langle x \rangle$ – группа типа 3), а

$$(C_F(x) \times \langle x \rangle) \lambda \langle y \rangle = \langle x \rangle \lambda (C_F(x) \cdot \langle y \rangle)$$

является группой типа 1). Если A – $\langle x, y \rangle$ -допустимая подгруппа из F , то из $y \in N(\langle A, x \rangle) \setminus C(\langle A, x \rangle)$ и определения NS_{np} -группы снова получим, что $C_F(x) = C_A(x) \cdot C_{C_F(A)}(x)$.

Если же $H = (A \lambda \langle x \rangle) \cdot \langle y \rangle$, то в силу леммы Фраттини $N(H) = H \cdot C_{N(H)}(x)$. Учитывая, что $C_{N(H)}(x) = C_A(x) \cdot C_{C_{N(H)}(A)}(x)$, имеем $N(H) = H \cdot C_{C_{N(H)}(A)}(x)$. В то же время $H \cdot C(H) = H \cdot (C_{C_F(A)}(x) \cap C(y))$. Поэтому индекс $|N(H) : H \cdot C(H)| = |C_{N(H)}(A \lambda \langle x \rangle) : C(H)|$ делит p и G – группа типа 7);

в) Пусть $G = (F \lambda (\langle x \rangle \times \langle y \rangle)) \cdot \langle t \rangle$, $x^q = y^q = 1$, $t^r \in F$. В силу леммы Фраттини можно считать, что $t \in N(\langle x, y \rangle)$. Но тогда из минимальности $\langle x, y \rangle$ следует, что t действует на $\langle x \rangle \times \langle y \rangle$ неприводимо. По уже доказанному $F \lambda (\langle x \rangle \times \langle y \rangle)$ является группой типа 5) и если $r \neq p$, то $F \lambda \langle t \rangle$ – группа типа 3). Если A является $\langle x, y, t \rangle$ -допустимой подгруппой из F , то полагая $B = A \lambda (\langle x \rangle \times \langle y \rangle)$ из того, что $t \in N(B) \setminus (B \cdot C(B))$ как и выше, получим, что $C_F(\langle x \rangle \times \langle y \rangle) = C_A(\langle x \rangle \times \langle y \rangle) \cdot C_{C_F(A)}(\langle x \rangle \times \langle y \rangle)$, т.е. G – группа типа 8).

Достаточность следует из приведенных выше рассуждений. Теорема доказана.

Отметим еще, что из условия $C_F(x) = (A \cap C(x)) \cdot (C_F(A) \cap C(x))$ для любой $\langle x, y \rangle$ -допустимой подгруппы (пункты 4)–8) теоремы) следует в частности, что $F = [F, x] \cdot C_F([F, x])$. Кроме того, это условие выполняется автоматически, если подгруппа F абелева.

Примеры. Приведем простейшие примеры, показывающие, что все случаи из теоремы 2 реализуются.

Группы $G_1 = S_3 \times \langle a \rangle$, $|a| = 5$, $G_2 = (\langle a \rangle \times \langle b \rangle) \lambda \langle c \rangle$, $a^3 = b^4 = c^2 = 1$, $a^c = a^{-1}$, $b^c = b^{-1}$ и $G_3 = (\langle a \rangle \times Q_8) \lambda \langle c \rangle$, $a^3 = c^2 = 1$, $a^c = a^{-1}$, $[Q_8, c] = 1$ являются группами из пункта 1) теоремы.

Пусть $G = (Q_8 \times \langle a \rangle) \lambda \langle b \rangle$, $a^9 = b^3 = 1$, $a^b = a^4$ и b действует на Q_8 как естественный автоморфизм порядка 3. Тогда G – группа типа 2) с неабелевой подгруппой P , а ее подгруппа $Q_8 \lambda \langle b \rangle$ – группа типа 2) с абелевой подгруппой P .

Группа $G = (\langle a \rangle \lambda \langle b \rangle) \lambda \langle c \rangle$, $a^9 = b^3 = c^2 = 1$, $a^b = a^4$, $a^c = a^{-1}$, $b^c = b$ является группой типа 3). В ней для подгрупп $H_1 = \langle a \rangle \lambda \langle c \rangle$ и $H_2 = \langle b \rangle \lambda \langle c \rangle$ выполняются равенства $|N(H_1):H_1 \cdot C(H_1)|=3$, а $N(H_2)=H_2 \cdot C(H_2)$.

Группа Фробениуса порядка 20 – простейший пример группы типа 4). Более интересным примером группы типа 4) является группа $G = ((\langle a \rangle \lambda \langle b \rangle) \times \langle c \rangle \times \langle d \rangle) \lambda \langle x \rangle$, $a^9 = b^3 = c^3 = d^3 = x^4 = 1$, $a^b = a^4$, $a^c = a^{-1}$, $b^c = b$, $c^d = cd$, $d^c = cd^2$. В этой группе для подгрупп $H_1 = \langle a \rangle \lambda \langle x \rangle$ и $H_2 = \langle a \rangle \lambda \langle x^2 \rangle$ выполняются равенства $|N(H_1):H_1 \cdot C(H_1)|=3$, а $N(H_2)=H_2 \cdot C(H_2)$.

Группа Фробениуса порядка $7 \cdot 6$ – группа типа 5) для $r \neq q$, а $S_3 \times S_3$ для $r = q$.

Группа $GL(3,2) \cong PSL(2,7)$ содержит неабелевы подгруппы H_1 и H_2 порядков 21 и 6 соответственно. Если A – элементарная абелева группа порядка 8, то $G_1 = A \lambda H_1$ и $G_2 = A \lambda H_2$, где H_1 и H_2 действуют на A как подгруппы $GL(3,2)$, являются группами типа 6) и 7) соответственно.

Пусть $p \neq 2$. Тогда группа $G = (\langle a \rangle \times \langle b \rangle \times \langle c \rangle) \lambda ((\langle x \rangle \times \langle y \rangle) \lambda \langle t \rangle)$, где $a^p = b^p = c^p = 1$, $x^2 = y^2 = t^3 = 1$, $a^x = a$, $b^x = b^{-1}$, $c^x = c^{-1}$, $a^y = a^{-1}$, $b^y = b$, $c^y = c^{-1}$, $x^t = y$, $y^t = xy$, $a^t = c$, $b^t = a$, $c^t = b$, является группой типа 8).

Литература

1. Антонов, В.А. О группах с относительно малыми нормализаторами всех (всех абелевых) подгрупп / В.А. Антонов // Теория групп и ее приложения: сб. науч. тр. 8-й междунар. школы-конф., посвящ. 75-летию В.А. Белоногова. – Нальчик: Изд-во КБГУ, 2010. – С. 8–17.
2. Каргаполов, М.И. Основы теории групп / М.И. Каргаполов, Ю.И. Мерзляков. – М.: Наука, 1996. – 288 с.
3. Антонов, В.А. Локальные конечные группы с малыми нормализаторами / В.А. Антонов // Мат. заметки. – 1987. – Т. 41, № 3. – С. 296–302.

Поступила в редакцию 13 марта 2012 г.

FINITE SOLVABLE GROUPS WITH RELATIVELY SMALL NONPRIMARY SUBGROUPS NORMALIZERS

V.A. Antonov¹, N.N. Amineva²

Complete description of finite solvable groups, in which for every nonprimary subgroup A index $|N(A):A \cdot C(A)|$ divides some prime number, is obtained.

Keywords: group, subgroup, automorphism, normalizer, centralizer.

References

1. Antonov V.A. O gruppakh s otnositel'no malymi normalizatorami vseh (vseh abelevykh) podgrupp (Groups with relatively small normalizers of all subgroups (all abelian) subgroups). *Teoriia grupp i ee prilozheniia: sb. nauch. tr. 8-oi mezhdun. shkoly-konf., posviashch. 75-letiiu V.A. Belonogova* (Group theory and its applications: Proceedings of 8th International School-Conference dedicated to the 75 anniversary of V.A. Belonogov). Nal'chik, KBGU, 2010. pp. 8–17. (in Russ.).
2. Kargapolov M.I., Merzliakov Iu.I. *Osnovy teorii grupp* (Fundamentals of Group Theory). Moscow: Nauka, 1996. 288 p. (in Russ.).
3. Antonov V.A. Lokal'nye konechnye gruppy s malymi normalizatorami (Local finite groups with small normalizer). *Mat. Zametki*. 1987. Vol. 41, no. 3. pp. 296–302. (in Russ.).

¹ Antonov Vladimir Alexeevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General Mathematics Department, South Ural State University.
² Amineva Nazhiya Nazhitovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General Mathematics Department, South Ural State University.

E-mail: najiya_amineva@mail.ru

АНАЛИЗ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ НЕОДНОРОДНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ПОЛОСЫ

В.Л. Дильман¹, А.И. Носачева²

Изучается напряженно-деформированное состояние поперечного пластического слоя в растягиваемой полосе при плоской деформации на основе использования различных гипотез сечений. Получены явные аналитические выражения для вычисления напряжений в пластическом слое. Проведен сравнительный анализ влияния различных гипотез на результаты.

Ключевые слова – пластический слой, плоская деформация, неоднородное состояние, напряженное состояние, гипотезы сечений

Введение. Существование участков конструкций из менее прочного (МП) материала является неизбежным следствием многих существующих технологий производства сварных соединений. Исследование возникающего в МП слоях и прослойках контактного упрочнения позволяет точнее оценить несущую способность неоднородных соединений, содержащих такие слои. В работе рассматривается дискретно-неоднородная полоса, состоящая из однородного изотропного идеально пластического материала, содержащая прямоугольную вставку из менее прочного материала, т.е. имеющего меньший предел текучести. Напряженное состояние полосы – плоская деформация, внешняя нагрузка – растяжение в направлении полосы. Результаты могут быть перенесены на упрочняемые материалы с заменой предела текучести на пластическую постоянную, характеризующую момент потери общей пластической устойчивости, так как в критическом состоянии поведение упрочняемого материала является близким к идеально пластическому.

При математическом моделировании напряженно-деформированного состояния (НДС) МП слоя возникают недоопределенные краевые задачи для систем уравнений в частных производных гиперболического типа. Один из подходов к решению таких задач предложен и применялся в работах [1–3]. Он состоит из двух пунктов.

1. Находится решение в окрестности свободной поверхности, где оно однозначно определяется граничными условиями, для чего вычисляются вдоль характеристик, точно или приближенно, инварианты Римана, с помощью которых решается задача сопряжения для напряжений на контактной поверхности. Найденные напряжения используются для вычисления критической нагрузки и для доопределения задачи из следующего пункта.

2. Находится решение в окрестности поперечной оси симметрии слоя с использованием граничных условий на контактной поверхности, полученных в предыдущем пункте, и ограничений на классы решений на основе частичного предугадывания внутреннего состояния материала.

Естественным ограничением такого вида является гипотеза плоских поперечных сечений (ГППС) $v_x = W(y)$, где v_x – скорость перемещения точек слоя в поперечном направлении. В работах [1–4] на основе ГППС проведено исследование НДС поперечного МП слоя полосы при растягивающей нагрузке в случае плоской деформации. Уточнением ГППС являются гипотезы, учитывающие прогиб плоских сечений при поперечном растяжении слоя $v_x = W(y) \cdot (1 + \varphi(x, \delta))$, где φ – некоторая «малая» величина, характеризующаяся малым параметром δ . Например, в гипотезе параболических сечений, использованной при математическом моделировании напряженно-деформированного состояния прослоек в стержнях [5], $\varphi(x, \delta) = \pm \delta x^2$ (минус – при растяжении). При плоской деформации аппроксимация $\varphi(x, \delta) = -\delta x^2$ не вполне удобна [6]. В работе применяется гипотеза

$$\varphi(x, \delta) = -2 \sin^2 \frac{\delta x}{2}, \text{ то есть предполагается, что}$$

$$v_x = W(y) \cos(\delta x). \quad (1)$$

¹ Дильман Валерий Лензерович – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра прикладной математики, Южно-Уральский государственный университет

E-mail: dilm49@mail.ru

² Носачева Алия Исмаиловна – ассистент, кафедра математического анализа, Южно-Уральский государственный университет

E-mail: alika74.ru

Цель работы – исследование напряжённого состояния МП слоя при гипотезе (1) и сравнение результатов с результатами, основанными на ГППС.

Нахождение приближенных зависимостей для напряжений на основе гипотезы (1). Как известно, НДС пластической среды при плоской деформации в безразмерных переменных определяется системой уравнений:

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0; \quad (2)$$

$$\frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} = 0; \quad (3)$$

$$(\sigma_x - \sigma_y)^2 + 4\tau_{xy}^2 = 4; \quad (4)$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0; \quad (5)$$

$$\frac{\sigma_x - \sigma_y}{2\tau_{xy}} = \frac{\frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{\partial v_y}{\partial y}}{\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x}}. \quad (6)$$

Функции, входящие в уравнения (2)–(6), определены на прямоугольнике $[-1; 1] \times [-\kappa; \kappa]$, где $\kappa \in (0; 1]$ – относительная толщина МП слоя. Введём обозначение:

$$Y(y) = \frac{W''(y)}{W'(y)} + \delta^2 \frac{W(y)}{W'(y)}.$$

Получим из условия (6) и гипотезы (1):

$$\tau_{xy} = \frac{1}{4\delta} (\sigma_x - \sigma_y) Y(y) \operatorname{tg}(\delta x).$$

Подставив полученное для τ_{xy} выражение в (4), найдём:

$$\sigma_x - \sigma_y = \pm \frac{4}{\sqrt{4 + Y^2(y) \operatorname{tg}^2(\delta x)}} = \pm 2 \left(1 - \frac{1}{8} Y^2(y) \frac{\operatorname{tg}^2(\delta x)}{\delta^2} + \frac{3}{128} Y^4(y) \frac{\operatorname{tg}^4(\delta x)}{\delta^4} - \dots \right)$$

(знак плюс соответствует растяжению соединения, знак минус – сжатию; в работе рассматривается растяжение). Отсюда

$$\tau_{xy} = \frac{Y(y) \operatorname{tg}(\delta x)}{2\delta} - \frac{Y^3(y) \operatorname{tg}^3(\delta x)}{16\delta^3} + \frac{3Y^5(y) \operatorname{tg}^5(\delta x)}{256\delta^5} - \dots \quad (7)$$

При малых значениях касательных напряжений можно считать, что

$$\tau_{xy} = \frac{Y(y) \operatorname{tg}(\delta x)}{2\delta}, \quad (8)$$

$$\sigma_x - \sigma_y = 2 \left(1 - \frac{1}{8} Y^2(y) \frac{\operatorname{tg}^2(\delta x)}{\delta^2} \right). \quad (9)$$

Относительную погрешность в формуле (8) можно оценить величиной

$$0,125 \tau_{xy}^2 (1 - 0,25 \tau_{xy}^2)^{-1,5}.$$

Например, если $\tau_{xy} = 0,3$, относительная погрешность формулы (8) меньше 0,011.

Исключив из (2) и (3) нормальные напряжения, получим нелинейное уравнение относительно неизвестной функции τ_{xy} :

$$-\frac{\partial^2 (\tau_{xy}^2)}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial y^2} = 0.$$

Подставив сюда выражения (8) и (9), получим задачу:

$$Y'' + 2YY' = 0, \quad Y(0) = 0. \quad (10)$$

Результаты будут немного точнее, если количество слагаемых увеличить на одно, воспользовавшись равенством (7). После соответствующих рассуждений и преобразований аналог дифференциального уравнения (10) будет выглядеть следующим образом:

$$Y'' + 2YY' - \delta^2 Y = 0. \quad (11)$$

Аналитическим решением данного уравнения при начальных условиях $Y(0) = 0$, $Y'(0) = A$, где A – некоторая положительная постоянная, является функция:

$$\begin{aligned} Y(y) = & \sqrt{A} \operatorname{th}(\sqrt{A}y) + \left(\frac{1}{\sqrt{A}} \operatorname{sh}(2\sqrt{A}y) \ln |\operatorname{ch}(\sqrt{A}y)| - 2y \operatorname{ch}^2(\sqrt{A}y) + \frac{1}{\sqrt{A}} \operatorname{sh}(2\sqrt{A}y) \right) \delta^2 + \\ & + \left[\frac{2 \ln 2 - 1}{A} y + \frac{y^2}{\sqrt{A}} + \left(2 + \frac{8}{3} \ln 2(A-1) + \frac{4 \ln^2 2}{3} \right) y^3 + \right. \\ & + \left(2\sqrt{A} \ln 2 - \frac{2}{\sqrt{A}} + 2A\sqrt{A} - \frac{4\sqrt{A}}{3} \right) y^4 + \left(\frac{4}{15} A \ln^2 2 - \frac{12}{5} A + \frac{8}{15} A^2 \ln 2 + \frac{16}{5} A^2 \right) y^5 + \\ & \left. + \left(\frac{y^2}{\sqrt{A}} + \frac{5}{2A\sqrt{A}} \right) \operatorname{sh}(2\sqrt{A}y) - \frac{3y}{2A} \operatorname{ch}(2\sqrt{A}y) - \left(\frac{1}{2A\sqrt{A}} + \frac{2y}{\sqrt{A}} \right) \operatorname{th}(\sqrt{A}y) \right] \cdot \operatorname{ch}(\sqrt{A}y) \delta^4 + \dots \quad (12) \end{aligned}$$

При малых значениях касательных напряжений можно считать, что

$$\tau_{\text{н}} = \frac{\sqrt{A} \operatorname{th}(\sqrt{A}y)}{2} \cdot \frac{\operatorname{tg}(\delta x)}{\delta}. \quad (13)$$

Численные эксперименты показали, что решение (12) и решения уравнений (10) и (11) при условиях $Y(0) = 0$ и $Y(\kappa) = b$ при различных подходящих значениях κ и b мало различаются (рис. 1). Поэтому точность основанных на уравнении (10) решений достаточна для приложений и позволяет получить не слишком громоздкие аналитические выражения в силу простоты решений задачи. Общее решение задачи (10) имеет вид

$$Y = \sqrt{A} \operatorname{th}(\sqrt{A}y).$$

Формулы (8) и (9) при $\delta \rightarrow 0$ обращаются в известные зависимости [7, 8]:

$$\begin{aligned} \tau_{\text{н}} &= \frac{1}{2} x \sqrt{A} \operatorname{th}(\sqrt{A}y); \\ \sigma_{\text{н}} - \sigma_{\text{с}} &= 2 \left(1 - \frac{1}{8} x^2 A \operatorname{th}^2(\sqrt{A}y) \right). \end{aligned}$$

Пусть наибольшее значение τ_F касательных напряжений $\tau_{\text{н}}$ достигается в некоторой точке F с абсциссой x_F на контактной поверхности, которая задается уравнением $y = \kappa$. Постоянная A находится из граничного условия $\tau(x_F, \kappa) = \tau_F$. Тогда для вычисления A следует решать трансцендентное уравнение

$$\sqrt{A} \kappa \operatorname{th}(\sqrt{A} \kappa) = \frac{2 \delta \tau_F \kappa}{\operatorname{tg}(\delta x_F)}. \quad (14)$$

Введём обозначение. Пусть $y = \operatorname{athd}(x)$ – функция, обратная к функции $x = y \operatorname{th} y$. Для малых значений аргумента эта функция хорошо аппроксимируется функцией

$$\psi(x) = \sqrt{x + \frac{\sqrt{3}}{4} x^2},$$

которая на отрезке $[0; 1]$ даёт ошибку в несколько тысячных. Тогда уравнение (14) можно записать в виде

$$\sqrt{A} = \frac{1}{\kappa} \operatorname{athd} \left(\frac{2 \delta \tau_F \kappa}{\operatorname{tg}(\delta x_F)} \right).$$

В работах [1–3] получены явные зависимости величин τ_F , σ_F и x_F от параметров κ и K , где K – коэффициент механической неоднородности, т.е. отношение пределов текучести более прочного основного материала полосы и материала менее прочного слоя. Используя их, можно находить коэффициент A . Например, при $\kappa = 0,3$ и $K = 1,3$ значение параметра $A = 5,0024$.

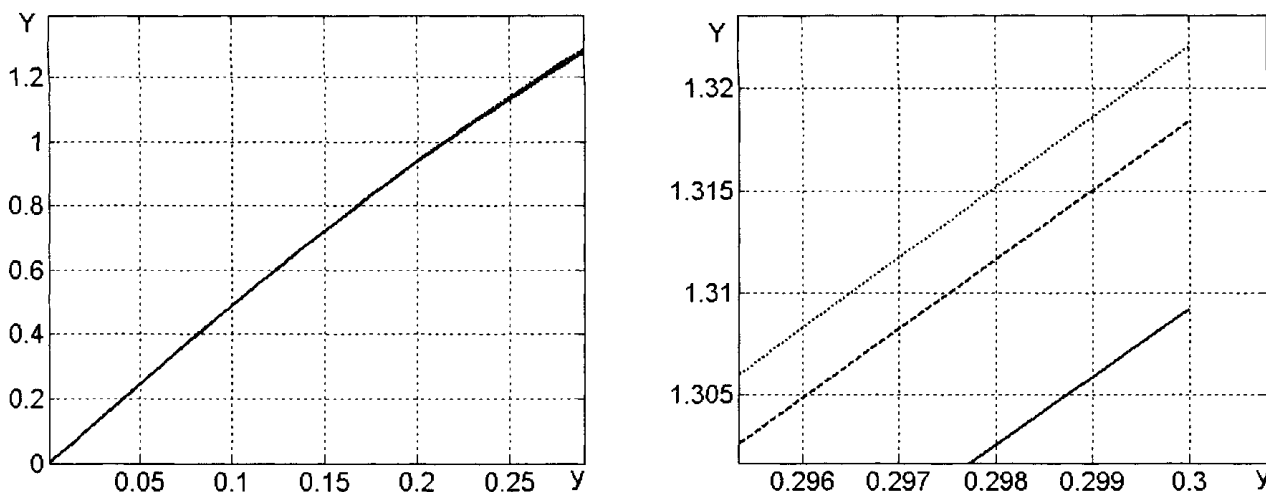


Рис. 1. Графики решения краевых задач для уравнений: (10) – сплошная, (11) – штриховая; график функции (12) – пунктирная; $\kappa = 0,3$, $K = 1,3$, $y \in [0; 0,3]$ (справа – увеличено в окрестности значения $y = 0,3$)

Из уравнений равновесия (2) и (3) и формулы (13) интегрированием получим:

$$\sigma_x = \frac{A \ln |\cos(\delta x)|}{2\delta^2 \operatorname{ch}^2(\sqrt{A}y)} - \frac{\ln |\operatorname{ch}(\sqrt{A}y)|}{2} + C, \quad (15)$$

$$\sigma_y = -\frac{\ln |\operatorname{ch}(\sqrt{A}y)|}{2\cos^2(\delta x)} + \frac{A \ln |\cos(\delta x)|}{2\delta^2} + 2 + C. \quad (16)$$

Использование условия пластичности (4) вместе с полученным в [1–3] значением σ_F позволяет найти постоянную C :

$$C = \sigma_F + \frac{\ln |\operatorname{ch} \sqrt{A}\kappa|}{2\cos^2(\delta x_F)} - \frac{A \ln |\cos(\delta x_F)|}{2\delta^2} - 2, \quad \sigma_F = 2 + \frac{(K-1)(3-K)}{2}. \quad (17)$$

На рис. 2 показаны эпюры напряжений на контактной поверхности при гипотезе сечений данной работы при $\delta = 0,5$ и ГППС. Видно, что математические модели НС на основе ГППС практически не уступают по точности вычисления напряжений моделям, более детально учитывающим особенности деформирования МП слоёв.

Выводы. Уточнение ГППС в виде гипотезы деформирования плоских поперечных сечений (1) не даст ощутимых преимуществ в точности получаемых результатов. Если при нахождении зависимости касательных напряжений от координат использовать лишь первый член разложения в степенной ряд (формула (8)), допускаемая относительная ошибка при напряжениях, реально возникающих в неоднородных соединениях, не превышает 0,01. Эти соображения позволяют находить достаточно точные приближенные аналитические выражения простого вида для вычисления напряжений как функций координат, например, формулы (15)–(17).

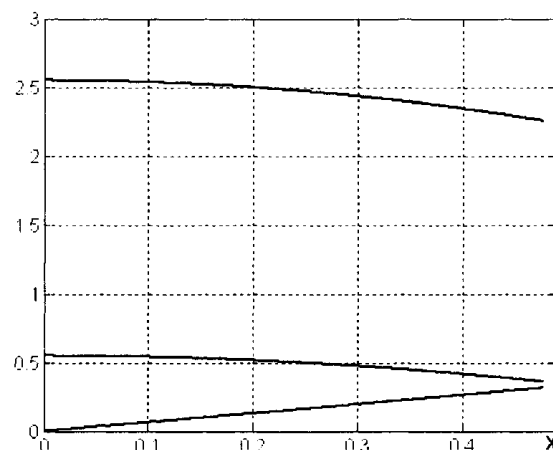


Рис. 2. Зависимость напряжений $\sigma_y, \sigma_x, \tau_{xy}$ от x (сверху вниз) на контактной поверхности для значения $\delta = 0,5$ при $\kappa = 0,3$, $K = 1,3$

Литература

1. Дильман, В.Л. Математические модели напряжённого состояния неоднородных тонкостенных цилиндрических оболочек / В.Л. Дильман. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2007. – 202 с.
2. Дильман, В.Л. Исследование аналитическими методами математических моделей напряженного состояния тонкостенных неоднородных цилиндрических оболочек / В.Л. Дильман // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2009. – Вып. 3. – № 17(150). – С. 36–58.
3. Дильман, В.Л. Математическое моделирование напряженного состояния неоднородных тонкостенных неоднородных цилиндрических оболочек: автореферат дис. ... д-ра физ.-мат. наук / В.Л. Дильман. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. – 32 с.
4. Дильман, В.Л. О напряженно-деформированном состоянии при растяжении пластического слоя с двумя осями симметрии / В.Л. Дильман, А.А. Остсмин // Изв. РАН. МТТ. – 2001. – № 6. – С. 115–124.
5. Дильман, В.Л. Об одной модели, описывающей напряженное состояние в круглом стержне / В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина // Обзорение прикладной и промышленной математики. – 2004. – Т. 11. – Вып. 2. – С. 793–794.
6. Дильман, В.Л. Математическое моделирование напряженно-деформированного состояния менее прочного поперечного слоя пластической полосы при гипотезах поперечных сечений / В.Л. Дильман, А.И. Носачева // Обзорение прикладной и промышленной математики. – 2010. – Т. 17. – Вып. 2. – С. 262–263.
7. Дильман, В.Л. Напряженное состояние и статическая прочность пластичной прослойки при плоской деформации / В.Л. Дильман, А.А. Остсмин // Проблемы машиностроения и надежности машин. – 2005. – № 4. – С. 38–48.
8. Дильман, В.Л. Об одной математической модели напряженного состояния пластического слоя при плоской деформации / В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 6. – № 6(46). – С. 19–23.

Поступила в редакцию 21 мая 2012 г.

THE ANALYSIS OF THE STRESS STRAIN STATE OF A HETEROGENEOUS PLASTIC STRIPE**V.L. Dil'man¹, A.I. Nosacheva²**

The stress strain state of a cross-section plastic layer in a stretched stripe at flat deformation is studied on the basis of the use of different section hypotheses. Obvious analytic expressions for calculation of a stress state in a plastic layer are received. The comparative analysis of influence of different hypotheses on the results is carried out.

Keywords: plastic layer, flat deformation, heterogeneous joint, stress state, hypotheses of sections

References

1. Dil'man V.L. *Matematicheskie modeli napryazhennogo sostojaniya neodnorodnih tonkostennih cilindricheskikh obolochek* (Mathematical models of the strain state of heterogeneous thin-walled cylindrical shells). Chelyabinsk: Izdatel'stvo YuUrGU, 2007. 202 p. (in Russ.)

2. Dil'man V.L. Issledovanie analiticheskimi metodami matematicheskikh modelej napryazhennogo sostojaniya tonkostennih neodnorodnih cilindricheskikh obolochek (Research of the mathematical models of the strain state of the thin-walled heterogeneous cylindrical shells based on analytical methods). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematicheskoe modelirovanie i programirovanie»* 2009. Vol. 3, no. 17 (150). pp. 36–58. (in Russ.)

3. Dil'man V.L. *Matematicheskoe modelirovanie napryazhennogo sostojaniya neodnorodnih tonkostennih cilindricheskikh obolochek: avtoreferat dissertacii doktora fiziko-matematicheskikh nauk* (Mathematical modelling of the strain state of heterogeneous thin-walled cylindrical shells: dissertation theses). Chelyabinsk: YuUrGU, 2011. 32 p. (in Russ.)

4. Dil'man V.L. O napryazhenno-deformirovannom sostojanii pri rastyazhenii plasticheskogo sloja s dvumya osyami simmetrii (About strain-deformed state at stretching of a plastic layer with two axes of symmetry). *Izvestiya Rossijskoj akademii nauk, Mehanika tverdogo tela* 2001. no. 6. pp. 115–124. (in Russ.)

5. Dil'man V.L. Ob odnoj modeli, opisivaushej napryazhennoe sostojanie v kruglom sterzhne (About one model describing the strain state in a round core). *Obozrenie prikladnoj i promishlennoj matematiki* 2004. Vol. 11, no. 2. pp. 793–794. (in Russ.)

6. Dil'man V.L. Matematicheskoe modelirovanie napryazhenno-deformirovannogo sostojaniya mence prochnogo poperechnogo sloja plasticheskoi polosi pri gipotezakh poperechnikh sechenij (Mathematical modeling strain-deformed state of less strong cross-section layer of a plastic strip at hypotheses of cross-section sections). *Obozrenie prikladnoj i promishlennoj matematiki* 2010. Vol. 17, no. 2. pp. 262–263. (in Russ.)

7. Dil'man V.L. Napryazhennoe sostojanie i staticheskaya prochnost' plastichnoj proslojki pri ploskoj deformacii (The strain state and static strength of a plastic layer at flat deformation). *Problemi mashinostroenija i nadezhnosti mashin* 2005. no. 4. pp. 38–48. (in Russ.)

8. Dil'man V.L. Ob odnoj modeli napryazhennogo sostojaniya plasticheskogo sloja pri ploskoj deformacii (About one mathematical model of the strain state of a plastic layer at flat deformation). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika, fizika, khimiya»* 2005. Vol. 6, no. 6(46). pp. 19–23. (in Russ.)

Dil'man Vileniy Lazarevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics). Professor. Applied Mathematics department. South Ural State University.

¹ mail: dilman49@mail.ru

Nosacheva Aliya Islamovna is Assistant. Mathematical Analysis Department. South Ural State University.

¹ mail: alika74.ru

ТРЕУГОЛЬНИК ПАСКАЛЯ И p -ЛАТИНСКИЕ МАТРИЦЫ

В.В. Карачик¹

Исследуются свойства специального класса матриц, возникающих при изучении распределения биномиальных коэффициентов по модулю простого числа. Получены формулы распределения элементов в строке треугольника Паскаля по модулю простого числа.

Ключевые слова: треугольник Паскаля, латинские матрицы, биномиальные коэффициенты.

1. Введение

Одним из эффективных методов вычисления строк треугольника Паскаля по модулю простого числа p является сведение этой задачи к решению определенной системы линейных рекуррентных уравнений. Этот подход был успешно применен Б.А. Бондаренко [1] при исследовании распределения биномиальных коэффициентов $\bmod p$ для некоторых значений p и только для определенных строк треугольника Паскаля. Однако некоторые характерные свойства матриц полученных систем рекуррентных уравнений были отмечены и они привели к идее введения понятия p -латинской матрицы. Б.А. Бондаренко применял p -латинские матрицы и при исследовании других арифметических треугольников, отличных от треугольника Паскаля [2]. В данной статье получены новые свойства p -латинских матриц и на их основе исследован треугольник Паскаля по модулю простого числа p . Используя представление p -латинских матриц в удобном базисе (13) получено распределение элементов треугольника Паскаля $\bmod p$ для произвольной строки (15). Подробно исследован случай $p=7$. Некоторые результаты по свойствам p -латинских матриц были получены автором в [3] и [4].

2. p -латинские матрицы

Приведем определение p -латинской матрицы, как оно дано в [1] и [5].

Определение 1. Квадратная матрица порядка n называется латинским квадратом порядка n [5], если ее элементы принимают значения $1, \dots, n$ таким образом, что каждое число встречается только один раз в каждом столбце и каждой строке.

Определение 2. Латинский квадрат порядка n называется p -латинским квадратом порядка n , если ни одна диагональ матрицы за исключением главной и побочной диагоналей ($i+j=n+1$) не имеет равных элементов.

Определение 3. p -латинский квадрат порядка n называется нормализованным p -латинским квадратом порядка n , если его первая строка имеет вид $(1, 2, \dots, n)$ и главная диагональ записана в форме $(1, 1, \dots, 1)$.

Построим такие квадраты для любого простого p . Введем матрицу вида $P = (j/i)_{i,j=1, \overline{p-1}}$ порядка $p-1$, элементы которой будем считать из поля $\mathbb{Z}_p$.

Пример 1. Для $p=7$ матрица P имеет вид

$$\begin{pmatrix} 1/1 & 2/1 & 3/1 & 4/1 & 5/1 & 6/1 \\ 1/2 & 2/2 & 3/2 & 4/2 & 5/2 & 6/2 \\ 1/3 & 2/3 & 3/3 & 4/3 & 5/3 & 6/3 \\ 1/4 & 2/4 & 3/4 & 4/4 & 5/4 & 6/4 \\ 1/5 & 2/5 & 3/5 & 4/5 & 5/5 & 6/5 \\ 1/6 & 2/6 & 3/6 & 4/6 & 5/6 & 6/6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 4 & 1 & 5 & 2 & 6 & 3 \\ 5 & 3 & 1 & 6 & 4 & 2 \\ 2 & 4 & 6 & 1 & 3 & 5 \\ 3 & 6 & 2 & 5 & 1 & 4 \\ 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

¹ Карачик Валерий Валентинович — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой дифференциальных уравнений и динамических систем, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: karachik@usu.ru

Теорема 1. Если p простое, то матрица P является нормализованным p -латинским квадратом порядка $p-1$.

Доказательство. Очевидно, что элементы матрицы P , находящиеся в одном столбце или в одной строке различны и принадлежат мультипликативной группе поля $\mathbb{Z}_p$. Значит, матрица P является латинским квадратом. Пусть j/i – элемент некоторой диагонали, параллельной главной, тогда любой другой элемент этой диагонали имеет вид $(j+s)/(i+s)$. Предположим, что один из этих элементов равен данному. Тогда $js = is$ и значит $j = i$ и рассматриваемый элемент должен находиться на главной диагонали. Аналогичная ситуация обстоит и с побочной диагональю: $j/i = (j+s)/(i-s) \Rightarrow -j = i \Rightarrow j+i = p$ и значит элемент j/i лежит на побочной диагонали. В соответствии с определением 2 матрица P является p -латинским квадратом. Поскольку первая строка P имеет вид $(1, 2, \dots, n)$, главная диагональ записана в форме $(1, 1, \dots, 1)$, то P – нормализованный p -латинский квадрат.

Определение 4. Матрицы вида

$$\mathbb{N}_p = \left\{ \left(c_{p_{i,j}} \right)_{i,j=\overline{1,p-1}} : c_1, \dots, c_{p-1} \in \mathbb{C}, (p_{i,j}) = P \right\}$$

называются p -латинскими матрицами порядка $p-1$.

Пример 2. Пусть $p = 7$. В соответствии с примером 1 следующая матрица принадлежит $\mathbb{N}_7$

$$\begin{pmatrix} c_1 & c_2 & c_3 & c_4 & c_5 & c_6 \\ c_4 & c_1 & c_5 & c_2 & c_6 & c_3 \\ c_5 & c_3 & c_1 & c_6 & c_4 & c_2 \\ c_2 & c_4 & c_6 & c_1 & c_3 & c_5 \\ c_3 & c_6 & c_2 & c_5 & c_1 & c_4 \\ c_6 & c_5 & c_4 & c_3 & c_2 & c_1 \end{pmatrix}.$$

Лемма 1. Если $C, B \in \mathbb{N}_p$, то $CB \in \mathbb{N}_p$ и $CB = BC$.

Доказательство. Действительно, если $C = (c_{i,j})$ и $B = (b_{i,j})$, то верны равенства

$$CB = \left(\sum_{k=1}^{p-1} c_{k/i} b_{j/k} \right)_{i,j=\overline{1,p-1}} = \left(\sum_{s=1}^{p-1} c_s b_{(j/i)/s} \right)_{i,j=\overline{1,p-1}},$$

где все операции над индексами производятся в $\mathbb{Z}_p$. Поэтому если обозначить $a_k = \sum_{s=1}^{p-1} c_s b_{k/s}$, тогда будем иметь $CB = (a_{j/i})_{i,j=\overline{1,p-1}}$ и, следовательно, $CB \in \mathbb{N}_p$. Более того, аналогичные рассуждения дают

$$BC = \left(\sum_{s=1}^{p-1} b_s c_{(j/i)/s} \right)_{i,j=\overline{1,p-1}} = (a_{j/i})_{i,j=\overline{1,p-1}},$$

где использовалось равенство $a_k = \sum_{s=1}^{p-1} c_{k/s} b_s$. Следовательно, $CB = BC$. Лемма доказана.

Ниже мы докажем и другие свойства матриц из $\mathbb{N}_p$.

Обозначим через $\Delta^{(1)}$ треугольник Паскаля по модулю простого p и пусть $C(n, m)$ – его произвольный элемент. Обозначим также через $\Delta_s^{(1)}$ конечный треугольник, содержащий только первые s строк треугольника $\Delta^{(1)}$. Рассмотрим другой бесконечный треугольник $\Delta^{(k)} = k\Delta^{(1)}$, элементы которого $C_k(n, m)$ определяются равенствами $C_k(n, m) = kC(n, m) \pmod{p}$, и обозначим через $\Delta_s^{(k)}$ конечный треугольник, содержащий только первые s строк треугольника $\Delta^{(k)}$. Очевидно, что $\Delta_s^{(k)} = k\Delta_s^{(1)}$.

Определение 5. Конечный треугольник с m строками, возникающий из треугольника $\Delta_n^{(k)}$ заменой его элементов $C_k(n, l)$ треугольниками $\Delta_m^{(C_k(n, l))}$ и заполнением пустых мест нулями обозначим через $\Delta_n^{(k)} * \Delta_m$.

Пример 3. Для $p=5$ треугольники $\Delta_4^{(1)}$ и $\Delta_3^{(k)}$ имеют вид

$$\Delta_4^{(1)} = \begin{array}{cccc} & & 1 & \\ & 1 & 1 & \\ 1 & 2 & 1 & \\ 1 & 3 & 3 & 1 \end{array}, \Delta_3^{(1)} = \begin{array}{ccc} & 1 & \\ 1 & 1 & \\ 1 & 2 & 1 \end{array}, \Delta_3^{(2)} = \begin{array}{ccc} & 2 & \\ 2 & 2 & \\ 2 & 4 & 2 \end{array}, \Delta_3^{(3)} = \begin{array}{ccc} & 3 & \\ 3 & 3 & \\ 3 & 1 & 3 \end{array}.$$

Поэтому мы получаем

$$\Delta_4^{(1)} * \Delta_3 = \Delta_4^{(1)} \equiv \begin{array}{cccc} & & \Delta_3^{(1)} & \\ & \Delta_3^{(1)} & \Delta_3^{(1)} & \\ \Delta_3^{(1)} & \Delta_3^{(2)} & \Delta_3^{(1)} & \\ \Delta_3^{(1)} & \Delta_3^{(3)} & \Delta_3^{(3)} & \Delta_3^{(1)} \end{array} = \begin{array}{cccccccccccc} & & & & 1 & & & & & & & \\ & & & & 1 & 1 & & & & & & \\ & & & 1 & 2 & 1 & & & & & & \\ & & 1 & 0 & 0 & 1 & & & & & & \\ & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & & & & & & \\ & 1 & 2 & 1 & 1 & 2 & 1 & & & & & \\ & 1 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & & & & \\ & 1 & 1 & 0 & 2 & 2 & 0 & 1 & 1 & & & \\ & 1 & 2 & 1 & 2 & 4 & 2 & 1 & 2 & 1 & & \\ & 1 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 1 & \\ & 1 & 1 & 0 & 3 & 3 & 0 & 3 & 3 & 0 & 1 & 1 \\ & 1 & 2 & 1 & 3 & 1 & 3 & 3 & 1 & 3 & 1 & 2 & 1 \end{array}$$

Для того, чтобы подсчитать число единиц, например, в 11-й строке треугольника $\Delta_4^{(1)} * \Delta_3$, надо найти строку треугольника $\Delta_4^{(1)}$, состоящего из треугольников $\Delta_3^{(k)}$, в которую входит 11-я строка, т.е. вычислить число $[(11-1)/3]+1=4$. В 4-ю строку треугольника $\Delta_4^{(1)}$ входят только треугольники $\Delta_3^{(1)}$ и $\Delta_3^{(3)}$ по два раза. Затем надо взять строку треугольников $\Delta_3^{(k)}$, в которую входит 11-я строка, т.е. строку с номером $11-3[(11-1)/3]=2$ и вычислить число единиц в каждом из треугольников вида $\Delta_3^{(k)}$, входящих во 2-ю строку. Сложить произведение числа единиц в $\Delta_3^{(k)}$ на количество чисел равных k в треугольнике $\Delta_4^{(1)}$, т.е. на число треугольников $\Delta_3^{(k)}$ в $\Delta_4^{(1)}$. Имеем $2 \cdot 2 + 2 \cdot 0 = 4$.

Докажем важное фрактальное свойство треугольника Паскаля.

Теорема 2. Для любых $n, m \in \mathbb{N}$ и любого $k = \overline{1, p-1}$ верно равенство $\Delta_m^{(k)} * \Delta_{p^n} = \Delta_{mp^n}^{(k)}$.

Доказательство Пусть $m > 1$, поскольку при $m=1$ теорема очевидна. Рассмотрим треугольник $\Delta_{mp^n}^{(k)}$, каждая строка которого с номером $i+1$ строится по строке с номером i по правилу $C_{i+1}^{j+1} = C_i^j + C_i^{j+1} \pmod{p}$, где j – номер элемента в строке (этот номер начинается с нуля и совпадает с номером луча, параллельного левой стороне треугольника и начинающегося с числа на правой стороне треугольника), $C_i^j = 0$ при $j > i$ или $j < 0$ и $C_0^0 = k$. У него в строке с номером $i = p^n$ отличны от нуля только элементы с номерами $j=0$ и $j=p^n$ и они равны k , так как $C_{p^n}^j = 0 \pmod{p}$ при $j \neq 0$ и $j \neq p^n$. Эти элементы будут вершинами двух треугольников $\Delta_{p^n}^{(k)}$ (они строятся по тому же правилу), у которых левая сторона левого и правая сторона правого треугольников совпадают с соответствующими сторонами треугольника $\Delta_{mp^n}^{(k)}$, а элементы внут-

решенных сторон станут соседними только в строке $i = 2p^n - 1$ и поэтому в строке $i = 2p^n$ элемент с номером $j = p^n$ будет равен $2k$. Кроме этого, элементы, стоящие на местах с номерами $j = 0$ и $j = 2p^n$ в строке $i = 2p^n$ будут равны k , остальные же элементы этой строки нулевые, как элементы последних строк треугольников $\Delta_{p^n}^{(k)}$. Далее, элементы, находящиеся в строках с номерами $p^n < i < 2p^n$ между правой стороной левого треугольника $\Delta_{p^n}^{(k)}$ и левой стороной правого треугольника – нулевые, исходя из правила построения строк в $\Delta_{mp^n}^{(k)}$. Воспользуемся методом индукции. Пусть в строке с номером $i = sp^n$, $s = 2, \dots, m$ элементы с номерами мест не кратными p^n нулевые. Рассмотрим элементы, стоящие в этой строке на местах $j = tp^n$ и $j = (t+1)p^n$. Пусть они равны r_1 и r_2 . Очевидно, что элементы правой стороны треугольника $\Delta_{p^n}^{(r_1)}$ с вершиной в элементе с координатами $i = sp^n$, $j = tp^n$ и левой стороны треугольника $\Delta_{p^n}^{(r_2)}$ с вершиной в элементе с координатами $i = sp^n$ и $j = (t+1)p^n$ будут соседними в строке $i = (s+1)p^n - 1$ и поэтому дадут в строке $i = (s+1)p^n$ элемент $r_1 + r_2 \pmod{p}$, стоящий на месте $j = (t+1)p^n$. Элементы же строки $i = (s+1)p^n$, стоящие на местах $tp^n < j < (t+1)p^n$ и $(t+1)p^n < j < (t+2)p^n$ будут нулевыми, как элементы последних строк треугольников $\Delta_{p^n}^{(r_1)}$ и $\Delta_{p^n}^{(r_2)}$. Поэтому элемент $r_1 + r_2 \pmod{p}$ «породит» треугольник $\Delta_{p^n}^{(r_1+r_2 \pmod{p})}$, т.е. из треугольников $\Delta_{p^n}^{(r_1)}$ и $\Delta_{p^n}^{(r_2)}$ возникает треугольник $\Delta_{p^n}^{(r_1+r_2 \pmod{p})}$.

$$\begin{array}{ccc} \Delta_{p^n}^{(r_1)} & \Delta_{p^n}^{(r_2)} & r_1 \quad r_2 \\ \downarrow & \sim & \downarrow \\ \Delta_{p^n}^{(r_1+r_2 \pmod{p})} & & r_1 + r_2 \pmod{p} \end{array}.$$

Кроме этого, элементы треугольника $\Delta_{mp^n}^{(k)}$, находящиеся между соседними сторонами треугольников $\Delta_{p^n}^{(r_1)}$ и $\Delta_{p^n}^{(r_2)}$ будут также нулевыми в соответствии с правилом построения строк в $\Delta_{mp^n}^{(k)}$. Аналогичные рассуждения верны для всех $t = 0, 1, \dots, s-1$. Итак, строка $i = sp^n$ порождает строку $i = (s+1)p^n$ в соответствии с правилом построения строк в треугольнике Паскаля. Если теперь в строке $i = sp^n$ отбросить элементы, стоящие на местах, номера которых не кратны p^n (они нулевые), то мы получим строку треугольника $\Delta_m^{(k)}$ с номером $i = s$. Поскольку s произвольно и при $s = 1, 2$ утверждение теоремы справедливо, то оно справедливо и при любом s . Утверждаемое доказано.

Доказанная теорема позволяет свести исследование треугольника $\Delta^{(1)}$ к исследованию треугольников $\Delta_p^{(k)}$ для $k = \overline{1, p-1}$. Детали будут даны в теореме 3.

Пусть для простоты изложения $n \in \mathbb{N}_0 = \mathbb{N} \cup \{0\}$, т.е. первую строку треугольника $\Delta^{(k)}$ будем считать нулевой строкой и то же самое для треугольников $\Delta_p^{(k)}$.

Определение 6. Матрицей B_k при $0 \leq k \leq p-1$ назовем такую квадратную матрицу порядка $p-1$, элемент $b_{i,j}$ которой является числом элементов, равных j в k -й строке треугольника $\Delta_p^{(i)}$. Очевидно, что $B_0 = \text{diag}(1, \dots, 1) \equiv E$.

Обозначим через $g_s^{(k)}(n, p)$ число элементов, равных s ($1 \leq s \leq p-1$) по модулю p в n -й строке треугольника $\Delta^{(k)}$.

Теорема 3. Если $n = (a_r, \dots, a_0)_p$ является p -арным представлением числа n , то

$$g_s^{(k)}(n, p) = (B_{a_r} \cdots B_{a_0})_{k,s}. \quad (1)$$

Доказательство. Используя теорему 2, запишем равенство

$$\Delta_{p^{r+1}}^{(1)} = \Delta_p^{(1)} * \Delta_{p^r}^{(1)},$$

которое означает, что n -я строка треугольника $\Delta_{p^{r+1}}^{(1)}$ находится в a_r -й строке треугольника $\Delta_p^{(1)}$, состоящего из треугольников $\Delta_{p^k}^{(k)}$, $k = \overline{1, p-1}$ (см. пример 3). Если ввести обозначение $n_{(k)} \equiv (a_{r-k}, \dots, a_0)_p$, то из определения матриц B_k вытекает следующее векторное равенство:

$$\begin{pmatrix} g_s^{(1)}(n, p) \\ \vdots \\ g_s^{(p-1)}(n, p) \end{pmatrix} = B_{a_r} \begin{pmatrix} g_s^{(1)}(n_{(1)}, p) \\ \vdots \\ g_s^{(p-1)}(n_{(1)}, p) \end{pmatrix}.$$

Продолжая этот процесс, получаем равенство

$$\begin{pmatrix} g_s^{(1)}(n, p) \\ \vdots \\ g_s^{(p-1)}(n, p) \end{pmatrix} = B_{a_r} B_{a_{r-1}} \cdots B_{a_1} \begin{pmatrix} g_s^{(1)}(n_{(r)}, p) \\ \vdots \\ g_s^{(p-1)}(n_{(r)}, p) \end{pmatrix}.$$

Так как $n_{(r)} = a_0$ и $g_s^{(k)}(a_0, p) = (B_{a_0})_{k,s}$, то мы получаем

$$\begin{pmatrix} g_s^{(1)}(n, p) \\ \vdots \\ g_s^{(p-1)}(n, p) \end{pmatrix} = B_{a_r} B_{a_{r-1}} \cdots B_{a_1} (B_{a_0})_s = (B_{a_r} B_{a_{r-1}} \cdots B_{a_1} B_{a_0})_s,$$

откуда сразу следует равенство (1). Здесь $(B_k)_s$ обозначает s -й столбец матрицы B_k .

Используя теорему 3 мы можем свести вычисление $g_s^{(1)}(n, p)$ для $s = \overline{1, p-1}$ к нахождению произведения матриц B_k .

Теорема 4. Для $k = \overline{0, p-1}$ верно включение $B_k \in \mathbb{N}_p$, т.е. матрицы B_k p -латинские.

Доказательство. Пусть $b_1^{(k)}, \dots, b_{p-1}^{(k)}$ элементы первой строки матрицы B_k . Докажем равенство

$$B_k = (b_{p_{i,j}}^{(k)})_{i,j=\overline{1,p-1}}, \quad (2)$$

где матрица $(p_{i,j})_{i,j=\overline{1,p-1}} = P$ определена выше. Мы можем определить операцию сложения треугольников $\Delta_p^{(k)}$ как операцию сложения между элементами этих треугольников, стоящих на одинаковых местах по модулю p , т.е.

$$\Delta_p^{(k_1)} + \Delta_p^{(k_2)} = k_1 \Delta_p^{(1)} + k_2 \Delta_p^{(1)} = (k_1 + k_2)(\text{mod } p) \Delta_p^{(1)} = \Delta_p^{(k_1+k_2)},$$

где сложение в верхнем индексе треугольника производится в $\mathbb{Z}_p$. Например, верно равенство

$$\sum_{k=1}^s \Delta_p^{(1)} = \Delta_p^{(s)}, \quad (3)$$

для $s = \overline{1, p-1}$. Если обозначить элементы матрицы B_k через $b_{i,j}^{(k)}$, то, используя (3) и определение 6 матрицы B_k , можем записать $b_{i,j}^{(k)} = b_{s,j}^{(k)}$ для каждого $s = \overline{1, p-1}$. Таким образом, $b_{i,j}^{(k)} = b_{1,j/i}^{(k)}$ и значит, вспоминая определение матрицы P , убеждаемся в верности (2).

Пусть n_i обозначает число элементов, равных i в p -арном представлении числа $n = (a_i, \dots, a_0)_p$. В силу (1) с помощью следствия 1 можем записать

$$g_{\zeta}^{(k)}(n, p) = \left(\prod_{i=1}^{p-1} B_i^{n_i} \right)_{k, \zeta}. \quad (4)$$

Матрица $B_0 = E$ здесь опущена. Теперь, чтобы вычислить значение $g_{\zeta}^{(k)}(n, p)$, нам нужно исследовать дополнительные свойства матриц из $\mathbb{N}_p$.

3. Свойства матриц из $\mathbb{N}_p$

Ясно, что $\mathbb{N}_p$ является подпространством в пространстве квадратных матриц порядка $p-1$. Кроме этого,

Лемма 2. $\dim \mathbb{N}_p = p-1$ и

$$B \in \mathbb{N}_p \Rightarrow B = \sum_{k=1}^{p-1} b_k I_k, \quad (5)$$

где $I_k \in \mathbb{N}_p$ и $I_k = (\delta_{ki, j})_{i, j = \overline{1, p-1}}$. Здесь $\delta_{i, j}$ – символ Кронеккера и все операции над индексами производятся в $\mathbb{Z}_p$.

Доказательство. Действительно, в силу определения 4 элемент b_k матрицы B , стоящий в первой строке на k -м месте, будет стоять в i -й строке на месте с номером j , определяемом из равенства $k = j/i \pmod{p} \Rightarrow j = ki \pmod{p}$. Поэтому

$$B \in \mathbb{N}_p \Rightarrow B = \sum_{k=1}^{p-1} b_k (\delta_{ki, j})_{i, j = \overline{1, p-1}} = \sum_{k=1}^{p-1} b_k I_k.$$

Нетрудно видеть, что $I_1 = E$.

Лемма 3. Матрицы I_k при $k = \overline{1, p-1}$ обладают свойством $I_k I_m = I_{km}$, где km приведено по $\text{mod } p$.

Доказательство. В самом деле,

$$I_k I_m = \left(\sum_{s=1}^{p-1} \delta_{ki, s} \delta_{ms, j} \right)_{i, j = \overline{1, p-1}}$$

и, следовательно, элемент матрицы $I_k I_m$ с индексами i и j не равен нулю, если существует такое $s \in \mathbb{Z}_p$, что $ki = s \pmod{p}$ и $ms = j \pmod{p}$. Значит $j = kmi \pmod{p}$ и поэтому

$$I_k I_m = (\delta_{kmi, j})_{i, j = \overline{1, p-1}} = I_{km}.$$

Определение 7. Пусть ν – корень уравнения $x^{p-1} = 1$ в поле $\mathbb{Z}_p$ такой, что для каждого $k = \overline{1, p-2}$ верно неравенство $\nu^k \neq 1$ (примитивный корень). Тогда обозначим $J_k = (I_{\nu})^k$. Ясно, что $J_{p-1} = (I_{\nu})^{p-1} = E$.

Пусть $B \in \mathbb{N}_p$. Если обозначить $c_k = b_{\nu^k}$, то равенство (5) переписывается в виде

$$B = \sum_{k=1}^{p-1} c_k J_k. \quad (6)$$

Лемма 4. Пусть μ – собственное число матрицы $B \in \mathbb{N}_p$. Тогда существует λ – корень уравнения $z^{p-1} = 1$ в $\mathbb{C}$ такой, что верно равенство

$$\mu = \sum_{k=1}^{p-1} c_k \lambda^k, \quad (7)$$

где коэффициенты c_k определяются из (6). Кроме того, числа вида (7) где λ – произвольный корень уравнения $z^{p-1} = 1$ являются собственными числами матрицы B .

Доказательство. Пусть a – некоторый вектор из $\mathbb{C}^{p-1}$ и

$$b = \sum_{k=1}^{p-1} \lambda^{-k} J_k a.$$

Тогда верно равенство

$$J_{\nu} b = \sum_{k=1}^{p-1} \lambda^{-k} J_{\nu} J_k a = \sum_{k=1}^{p-1} \lambda^{-k} J_{\nu+k \pmod{p-1}} a = \lambda^{\nu} b$$

для любого $\nu = \overline{1, p-1}$. Поэтому, используя (6), запишем

$$Bb = \sum_{k=1}^{p-1} c_k J_k b = \sum_{k=1}^{p-1} c_k \lambda^k b = \mu b,$$

т.е. μ – собственный вектор матрицы B . Остается доказать, что формула (7) задает все собственные значения матрицы B . Мы завершим это доказательство после леммы 9.

Следствие. Матрицы J_k , а значит и матрицы I_k являются невырожденными матрицами и $\det I_k = \det J_k = 1$ для $k = \overline{1, p-1}$.

Доказательство. В силу леммы 4 числа $\mu_i = \lambda_i^k$, где λ_i – некоторый корень уравнения $z^{p-1} = 1$ в $\mathbb{C}$, и только они являются собственными числами матрицы J_k , $k = \overline{1, p-1}$. Если λ_i , $i = \overline{1, p-1}$ все корни уравнения $z^{p-1} = 1$, то

$$\det J_k = \prod_{i=1}^{p-1} \lambda_i^k = \mu^k,$$

где $\mu = \lambda_1 \cdots \lambda_{p-1}$. Используя равенство $\sum_{k=1}^{p-1} k = 0 \pmod{p}$ мы получаем $\mu = 1$ и значит $\det J_k = 1$ для $k = \overline{1, p-1}$. Это означает, что и $\det I_k = 1$.

Лемма 5. Матрицы I_k , а значит и матрицы J_k ортогональны и J_k обладают свойством $J_k J_m = J_{k+m}$, где сумма $k+m$ приведена по $\text{mod}(p-1)$.

Доказательство. Докажем, что $I_k I_k^* = E$, где $(a_{i,j})^* = (\overline{a_{j,i}})$, и черта означает комплексное сопряжение. Это немедленно следует из равенства

$$I_k^* = (\delta_{k,j,i})_{i,j=\overline{1,p-1}} = (\delta_{i,k,j})_{i,j=\overline{1,p-1}} = (\delta_{i,k,i})_{i,j=\overline{1,p-1}} = I_{1/k},$$

поскольку по лемме 3 $I_k I_{1/k} = I_1 = E$. Далее $J_k J_m = (I_{\nu})^k (I_{\nu})^m = (I_{\nu})^{k+m} = J_{k+m \pmod{p-1}}$ и значит поскольку $J_{p-1} = E$, то $J_k J_m = E \Rightarrow k+m = p-1 \Rightarrow m = p-k-1$ и значит для $k = \overline{1, p-2}$

$$J_k^{-1} = J_k^* = J_{p-k-1}. \quad (8)$$

Лемма 6. Пусть матрица B принадлежит $\mathbb{N}_p$ и записана в виде (6), тогда

$$B^* = \sum_{k=1}^{p-2} \overline{c_{p-k-1}} J_k + \overline{c_{p-1}} J_{p-1}.$$

Доказательство. Используя (8) и равенство $J_{p-1}^* = E^* = E = J_{p-1}$, мы немедленно получаем

$$B^* = \sum_{k=1}^{p-2} \bar{c}_k J_k^* + \bar{c}_{p-1} J_{p-1}^* = \sum_{k=1}^{p-2} \bar{c}_k J_{p-k-1} + \bar{c}_{p-1} J_{p-1} = \sum_{k=1}^{p-2} \bar{c}_{p-k-1} J_k + \bar{c}_{p-1} J_{p-1}.$$

Введем еще один класс матриц S_i при $i = \overline{1, p-1}$ в виде

$$S_i = \frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p-1} \lambda_i^{-k} J_k. \quad (9)$$

Здесь, как и раньше λ_i – один из корней уравнения $z^{p-1} = 1$ в $\mathbb{C}$. Ясно, что матрицы S_i принадлежат $\mathbb{N}_p$ как линейные комбинации матриц из $\mathbb{N}_p$ и $S_i \neq 0$. Пусть λ – примитивный корень уравнения $z^{p-1} = 1$ в $\mathbb{C}$, т.е. при $k = \overline{1, p-2}$ имеем $\lambda^k \neq 1$. Поэтому в формуле (9) можно считать, что $\lambda_i = \lambda^i$. Поскольку $\lambda_i^{-k} = \bar{\lambda}_i^k$, то (9) можно переписать в виде

$$S_i = \frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p-1} \bar{\lambda}_i^k J_k = \frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p-1} \bar{\lambda}_k^i J_k. \quad (9')$$

Теорема 5. Следующие равенства

$$S_i S_j = \delta_{i,j} S_i \quad (10)$$

справедливы для $i, j = \overline{1, p-1}$.

Доказательство. Рассмотрим левую часть (10). Если положить $J_0 = (I_p)^0 = E$, то $S_i = \frac{1}{p-1} \sum_{k=0}^{p-2} \bar{\lambda}_i^{-k} J_k$ и с учетом $\lambda_i^{-k} \lambda_j^k = \lambda_{i-j}^{-k}$, после некоторых преобразований будем иметь

$$S_i S_j = \frac{1}{(p-1)^2} \left(\sum_{l=0}^{p-2} \bar{\lambda}_j^{-l} J_l \sum_{k=0}^l \lambda_{i-j}^{-k} + \sum_{l=p-1}^{2(p-2)} \bar{\lambda}_j^{-l} J_l \sum_{k=l-p+2}^{p-2} \lambda_{i-j}^{-k} \right),$$

откуда, заменяя $l - p + 1 \rightarrow l$ во второй внешней сумме, с учетом равенства $J_k = J_{k+p-1}$ получим

$$S_i S_j = \frac{1}{(p-1)^2} \left(\sum_{l=0}^{p-2} \bar{\lambda}_j^{-l} J_l \sum_{k=0}^l \lambda_{i-j}^{-k} + \sum_{l=0}^{p-3} \bar{\lambda}_j^{-l} J_l \sum_{k=l+1}^{p-2} \lambda_{i-j}^{-k} \right)$$

и значит, после объединения внутренних сумм будем иметь

$$S_i S_j = \frac{1}{(p-1)^2} \sum_{l=0}^{p-2} \bar{\lambda}_j^{-l} J_l \sum_{k=0}^{p-2} \lambda_{i-j}^{-k}.$$

Исследуем полученное равенство. Используя равенство $\lambda_{i-j} = \lambda_i / \lambda_j$, где $\lambda_i \neq \lambda_j$, т.е. $i \neq j$, получаем

$$\sum_{k=0}^{p-2} \lambda_{i-j}^{-k} = \frac{\lambda_{i-j}^{1-p} - 1}{\lambda_{i-j}^{-1} - 1} = 0.$$

Следовательно (10) верно при $i \neq j$. Далее, при $i = j$ имеем $\lambda_{i-j} = \lambda^0 = 1$ и значит

$$\sum_{k=0}^{p-2} \lambda_{i-j}^{-k} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ p-1, & i = j \end{cases} \quad (11)$$

откуда получим $S_i^2 = S_i$. Доказательство завершено.

Обозначим матрицу, транспонированную к матрице A , через $A' = (a_{i,j})_{i,j=\overline{1,p-1}}$.

Лемма 7. Матрицы S_i при $i = \overline{1, p-1}$ эрмитовы, т.е. $S_i^* = S_i$ и при $i = \overline{1, p-2}$ $S_i' = S_{p-i-1}$.

Доказательство. Действительно, для $i = \overline{1, p-1}$ с учетом того, что $\bar{\lambda}_i = \lambda_{p-i-1} = \lambda_i^{-1}$, и равенства (8) запишем

$$S_i^* = \frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p-1} \lambda_i^k J_k^* = \frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p-1} \lambda_i^{k-p+1} J_{p-k-1} = S_i.$$

Аналогично, можно получить

$$S'_i = \frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p-1} \lambda_i^{-k} J_k^* = \frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p-1} \lambda_i^{p-k-1} J_{p-k-1} = \frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p-1} \lambda_i^k J_k = \frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p-1} \lambda_{p-i-1}^{-k} J_k = S_{p-i-1}.$$

Теорема 6. Для $k = \overline{1, p-1}$ справедливы равенства

$$J_k = \sum_{i=1}^{p-1} \lambda_i^k S_i, \quad (12)$$

обратные к (9).

Доказательство. Используя определение (9) матриц S_i , равенства (11) и делая некоторые преобразования, получим

$$\sum_{i=1}^{p-1} \lambda_i^k S_i = \sum_{j=1}^{p-1} \left(\frac{1}{p-1} \sum_{i=1}^{p-1} \lambda_i^{k-i} \right) J_j = \sum_{j=1}^{p-1} \left(\frac{1}{p-1} \sum_{i=0}^{p-2} \lambda_{j-k}^{-i} \right) J_j = \sum_{j=1}^{p-1} \delta_{j,k} J_j = J_k.$$

Что и утверждалось.

В дополнение к лемме 7 следует отметить, что матрица S_{p-1} состоит из одних чисел $\frac{1}{p-1}$ на всех местах и значит $S_{p-1}^t = S_{p-1}$. Это следует из следующих равенств:

$$S_{p-1} = \frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p-1} J_k = \frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p-1} I_k = \frac{1}{p-1} \left(\sum_{k=1}^{p-1} \delta_{k,i,j} \right)_{i,j=\overline{1,p-1}} = \frac{1}{p-1} (1)_{i,j=\overline{1,p-1}},$$

если учесть, что $\sum_{k=1}^{p-1} \delta_{ki(\bmod p),j} = 1$ для всех $i, j = \overline{1, p-1}$.

Лемма 8. Пусть $B \in \mathbb{N}_p$, тогда верно равенство

$$B = \sum_{i=1}^{p-1} \mu_i S_i, \quad (13)$$

где μ_i – некоторые собственные числа матрицы B .

Доказательство. Действительно из формул (6) и (7) и теоремы 6 следует представление

$$B = \sum_{k=1}^{p-1} c_k J_k = \sum_{i=1}^{p-1} S_i \sum_{k=1}^{p-1} c_k \lambda_i^k = \sum_{i=1}^{p-1} \mu_i S_i,$$

где $\mu_i = \sum_{k=1}^{p-1} c_k \lambda_i^k$. Рассмотрим вектор вида $b_i = S_i a$. Для него по теореме 5 выводим

$$S_i b_i = S_i S_i a = S_i a = b_i, \quad S_j b_i = S_j S_i a = 0, (i \neq j).$$

Поэтому

$$B b_i = \sum_{j=1}^{p-1} \mu_j S_j b_i = \mu_i b_i,$$

т.е. μ_i – собственное число матрицы B , а b_i – собственный вектор, отвечающий ему.

Ясно, что матрицы $S_1, \dots, S_{p-1}$ линейно независимы поскольку из равенства $\alpha_1 S_1 + \dots + \alpha_{p-1} S_{p-1} = 0$ после умножения на S_i по теореме 5 вытекает, что $\alpha_i S_i = 0 \Rightarrow \alpha_i = 0$. Значит, по лемме 2 $S_1, \dots, S_{p-1}$ базис в $\mathbb{N}_p$. Используя этот базис, мы можем легко выписать произведение матриц из $\mathbb{N}_p$.

Теорема 7. Пусть $\mu_1^{(i)}, \dots, \mu_{p-1}^{(i)}$ – собственные числа матриц B_i из теоремы 3. Если положим

$$\sigma_j = \prod_{i=1}^{p-1} (\mu_j^{(i)})^{n_i}, \quad (14)$$

то справедливы равенства

$$g_{\lambda}^{(k)}(n, p) = \left(\sum_{i=1}^{p-1} \sigma_i S_i \right)_{k, \lambda}. \quad (15)$$

Доказательство. Нетрудно видеть, что, используя (13) и теорему 5, мы можем получить

$$B_i^2 = \left(\mu_i^{(1)} S_1 + \dots + \mu_{p-1}^{(1)} S_{p-1} \right)^2 = \left(\mu_i^{(1)} \right)^2 S_1 + \dots + \left(\mu_{p-1}^{(1)} \right)^2 S_{p-1} \Rightarrow B_i^{n_i} = \sum_{j=1}^{p-1} \left(\mu_j^{(1)} \right)^{n_i} S_j.$$

Поэтому, равенство (4) преобразуется в (15) и доказательство завершено.

Заметим, что из равенства (1) следует, что $\sigma_j = \mu_j^{(a_1)} \dots \mu_j^{(a_0)}$.

Лемма 9. Любой собственный вектор b_i матрицы $B \in \mathbb{N}_p$, отвечающий собственному значению μ_i , может быть записан в виде

$$b_i = \sum_{(j), \mu_j = \mu_i} S_j c_j, \quad (16)$$

где $c_j \in \mathbb{C}^{p-1}$ и суммирование ведется по таким j , что $\mu_j = \mu_i$.

Доказательство. Пусть b_i – собственный вектор матрицы $B \in \mathbb{N}_p$, отвечающий собственному значению μ_i . Действуя матрицей S_{λ} на равенство $Bb_i = \mu_i b_i$, используя (13) из леммы 8 и теорему 5, получим $\mu_{\lambda} S_{\lambda} b_i = \mu_i S_{\lambda} b_i$. Если здесь $\mu_{\lambda} \neq \mu_i$, то $S_{\lambda} b_i = 0$. Теперь, используя равенство $E = S_1 + \dots + S_{p-1}$, которое следует из леммы 8, при $B = E$ ($\mu_i = 1$) получаем представление (16): $b_i = Eb_i = (S_1 + \dots + S_{p-1})b_i = \sum_{(j)} S_j b_i$.

Далее рассмотрим некоторый вектор $c \in \mathbb{C}^{p-1}$. В силу представления (13) имеем $BS_i c = \mu_i S_i c$ и значит вектор $S_i c$ – собственный вектор B , отвечающий собственному числу μ_i , т.е. правая часть (16) при любых $c_j \in \mathbb{C}^{p-1}$ – собственный вектор, отвечающий μ_i .

Продолжение доказательства леммы 4. Возьмем $c \in \mathbb{C}^{p-1}$ такое, что $\forall k, S_k c \neq 0$. Это возможно, например, для $c = (1, 0, \dots, 0)$. Выше мы видели, что вектор $c_k = S_k c$ – собственный вектор матрицы $B \in \mathbb{N}_p$, отвечающий собственному числу μ_k , определяемому из (7) при $\lambda = \lambda_k$. По выбору c он ненулевой. Докажем, что вектора $c_k \neq 0$ при $k = \overline{1, p-1}$ линейно независимы. Действительно, если числа $\delta_1, \dots, \delta_{p-1} \in \mathbb{C}$ не все равны нулю и такие, что $\delta_1 c_1 + \dots + \delta_{p-1} c_{p-1} = 0$, то действуя на это равенство матрицей S_k , получаем $\delta_k c_k = 0$ и значит $\delta_k = 0$. Противоречие. Значит вектора $c_k \neq 0$ при $k = \overline{1, p-1}$ образуют базис в $\mathbb{C}^{p-1}$. Если $\mu \neq 0$ – некоторое собственное число матрицы $B \in \mathbb{N}_p$, а c – собственный вектор, то

$$c = \delta_1 c_1 + \dots + \delta_{p-1} c_{p-1} \Rightarrow \mu c = \delta_1 \mu_1 c_1 + \dots + \delta_{p-1} \mu_{p-1} c_{p-1} \Rightarrow c = \delta_1 \frac{\mu_1}{\mu} c_1 + \dots + \delta_{p-1} \frac{\mu_{p-1}}{\mu} c_{p-1}$$

и в силу единственности разложения c по базису при $\delta_k \neq 0$ имеем $\mu = \mu_k$. Наконец, если $\forall k, \mu_k \neq 0$, то матрица $B \in \mathbb{N}_p$ не может иметь собственное число $\mu = 0$, поскольку из формулы выше в этом случае следует, что $Bc = 0 \Rightarrow c = 0$.

Лемма 10. Если $\mu_i \neq 0$ для $i = \overline{1, p-1}$ (см. (7)), то матрица $B \in \mathbb{N}_p$ имеет обратную, записываемую в виде

$$B^{-1} = \sum_{i=1}^{p-1} \mu_i^{-1} S_i.$$

Доказательство. Согласно лемме 8, теореме 5 и равенству $E = S_1 + \dots + S_{p-1}$, имеем

$$B \sum_{i=1}^{p-1} \mu_i^{-1} S_i = \sum_{i=1}^{p-1} \mu_i S_i \sum_{i=1}^{p-1} \mu_i^{-1} S_i = \sum_{i=1}^{p-1} S_i = E.$$

Лемма доказана.

Теперь мы можем применить полученные свойства матриц из $\mathbb{N}_p$ к вычислению $g_{\zeta}^{(k)}(n, p)$ для $p = 7$. Следует отметить, что в [6] эта проблема была рассмотрена для $p = 3$ и $p = 5$. Прежде чем сделать это докажем еще одно интересное свойство биномиальных коэффициентов, вытекающее из теоремы 2.

Теорема 8. [Люка] Пусть $n \geq m \geq 0$ целые. Если $n = (a_i, \dots, a_0)_p$ и $m = (b_i, \dots, b_0)_p$ являются p -арным представлением чисел n и m , то верно равенство

$$C_n^m = C_{a_i}^{b_i} \cdots C_{a_0}^{b_0} \pmod{p},$$

где следует считать, что $C_j^i = 0$ при $j < i$.

Доказательство. Используя теорему 2, запишем равенство

$$\Delta_{p^{i+1}}^{(1)} = \Delta_p^{(1)} \equiv \Delta_p^{(1)} * \Delta_{p^i},$$

которое означает, что n -я строка треугольника $\Delta_{p^{i+1}}^{(1)}$ находится в a_i -й строке треугольника

$\Delta_p^{(1)}$, состоящего из треугольников $\Delta_{p^k}^{(k)}$, $k = \overline{1, p-1}$, а элемент с номером m в этой строке нахо-

дится на b_i -м месте в строке с номером a_i треугольника $\Delta_p^{(1)}$ (см. пример 3). Нумерация строк начинается тоже с нуля. Таким образом, элемент в n -й строке, на m -м месте треугольника $\Delta_{p^{i+1}}^{(1)}$, обозначим его (n, m) , должен быть в треугольнике вида $C_{a_i}^{b_i} \pmod{p} \cdot \Delta_{p^i}^{(1)}$ и находится там

в строке с номером $n_{(1)} = (a_{i-1}, \dots, a_0)_p$ на месте с номером $m_{(1)} = (b_{i-1}, \dots, b_0)_p$. Если окажется, что $a_{i-1} < b_{i-1}$, то элемент (n, m) попадет в пространство между соседними треугольниками вида

$\Delta_{p^r}^{(k)}$, составляющими $\Delta_p^{(1)}$, которое заполнено нулями. Таким образом получим,

$(n, m) \in C_{a_i}^{b_i} \cdots C_{a_{i-k+1}}^{b_{i-k+1}} \pmod{p} \cdot \Delta_{p^{r-k+1}}^{(1)}$ и находится там в $n_{(k)}$ -й строке на $m_{(k)}$ -м месте, где

$n_{(k)} \equiv (a_{i-k}, \dots, a_0)_p$ (это будет при $a_{i-k} \geq b_{i-k}$), либо (n, m) попадет в пространство, заполненное нулями, и значит $C_n^m = 0 \pmod{p}$. Отсюда при $k = r$ с учетом того, что элемент треугольника $\Delta_p^{(1)}$

в a_0 -й строке на b_0 -м месте равен $C_{a_0}^{b_0} \pmod{p}$, получим доказываемую формулу.

Пример 4. Вычислим $C_{68}^3 \pmod{7}$. Нетрудно подсчитать, что $68 = 7^2 + 2 \cdot 7 + 5 = (125)_7$. Значит, по теореме 8 имеем $C_{68}^3 = C_1^0 C_2^0 C_5^3 = 10 = 3 \pmod{7}$.

4. Вычисление $g_{\zeta}^{(k)}(n, 7)$

Чтобы вычислить $g_{\zeta}^{(k)}(n, 7)$, в соответствии с теоремой 7, необходимо исследовать треугольники $\Delta_7^{(k)}$ для $k = \overline{1, 6}$. Треугольник $\Delta_7^{(1)}$ имеет вид

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & & & 1 \\ & & & & & 1 & 1 \\ & & & & 1 & 2 & 1 \\ & & 1 & 3 & 3 & 1 & \\ & 1 & 4 & 6 & 4 & 1 & \\ 1 & 5 & 3 & 3 & 5 & 1 & \\ 1 & 6 & 1 & 6 & 1 & 6 & 1 \end{array}$$

Если мы умножим каждый элемент треугольника $\Delta_7^{(1)}$ на k в $\mathbb{Z}_7$, то мы получим $\Delta_7^{(k)}$. Например треугольник $\Delta_7^{(3)}$ имеет вид

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & & & & & 3 \\
 & & & & & 3 & 3 \\
 & & & & 3 & 6 & 3 \\
 & & 3 & 2 & 2 & 3 & \\
 & 3 & 5 & 4 & 5 & 3 & \\
 3 & 1 & 2 & 2 & 1 & 3 & \\
 3 & 4 & 3 & 4 & 3 & 4 & 3
 \end{array}$$

Теперь нам необходимо найти матрицы B_k для $k = \overline{0,6}$. Возьмем, например, 4-ю строку треугольников $\Delta_7^{(k)}$, которая даст нам матрицу B_4 (нумерация начинается с нуля). 4-я строка треугольника $\Delta_7^{(1)}$ имеет вид $(1, 4, 6, 4, 1)$. Поскольку числа 1 и 4 встречаются дважды, а число 6 встречается один раз, то первая строка матрицы B_4 имеет вид $(2, 0, 0, 2, 0, 1)$. Если мы хотим подсчитать 3-ю строку матрицы B_4 , то надо взять 4-ю строку треугольника $\Delta_7^{(3)}$, которая даст нам желаемый результат $(0, 0, 2, 1, 2, 0)$. Таким образом, мы можем подсчитать все матрицы B_k при $k = \overline{0,6}$. Чтобы записать наши вычисления воспользуемся матрицами J_k , $k = \overline{1,6}$. Найдем матрицу J_1 . В нашем случае $\nu = 3$ потому, что для всякого $k = \overline{1,5}$ верно неравенство $3^k \not\equiv 1 \pmod{7}$ (см. определение 7). Поэтому

$$J_1 = I_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Теперь мы можем записать:

$$\begin{aligned}
 B_0 &= J_6, & B_1 &= 2J_6, & B_2 &= J_2 + 2J_6, & B_3 &= 2J_1 + 2J_6, \\
 B_4 &= J_3 + 2J_4 + 2J_6, & B_5 &= 2J_1 + 2J_5 + 2J_6, & B_6 &= 3J_3 + 4J_6.
 \end{aligned} \tag{17}$$

Используя обозначения теоремы 7, формулы (7) и (17), для каждого $k = \overline{1,6}$ найдем:

$$\begin{aligned}
 \mu_k^{(1)} &= 2, & \mu_k^{(2)} &= \lambda_k^2 + 2, & \mu_k^{(3)} &= 2\lambda_k + 2, & \mu_k^{(4)} &= \lambda_k^3 + 2\lambda_k^4 + 2, \\
 \mu_k^{(5)} &= 2(\lambda_k + \lambda_k^5 + 1), & \mu_k^{(6)} &= 3\lambda_k^3 + 4.
 \end{aligned}$$

Предположим, что число $k = \overline{1,6}$ содержится в записи числа $(n)_7$ всего n_k раз. Тогда, согласно (14) имеем $\sigma_k = (\mu_k^{(1)})^{n_1} \cdots (\mu_k^{(6)})^{n_6}$ и значит, учитывая что $\lambda_k = \exp(ik\pi/3)$ (здесь $i^2 = -1$), будем иметь (σ_1 вычислено подробно):

$$\begin{aligned}
 \sigma_1 &= 2^{n_1} \left(2 - \frac{1}{2} + i \frac{\sqrt{3}}{2} \right)^{n_2} (2 + 1 + i\sqrt{3})^{n_3} (2 - 1 - i\sqrt{3})^{n_4} (1 + i\sqrt{3} + 1 - i\sqrt{3} + 2)^{n_5} \times \\
 &\quad (-3 + 4)^{n_6} = 2^{n_1 - n_2} (3 + i\sqrt{3})^{n_2 + n_3} (-i\sqrt{3})^{n_4} 4^{n_5}, \\
 \sigma_2 &= 2^{n_1 - n_2} (3 - i\sqrt{3})^{n_2} (1 + i\sqrt{3})^{n_3} (2 + i\sqrt{3})^{n_4} (2\lambda_2 + 2\lambda_4 + 2)^{n_5} 7^{n_6}, \\
 \sigma_3 &= (-1)^{n_5} 2^{n_1 + n_5} 3^{n_2 + n_4} (2\lambda_3 + 2)^{n_3}, & \sigma_4 &= \overline{\sigma_2}, & \sigma_5 &= \overline{\sigma_1}, & \sigma_6 &= 2^{n_1} 3^{n_2} 4^{n_3} 5^{n_4} 6^{n_5} 7^{n_6},
 \end{aligned} \tag{18}$$

где черта означает комплексное сопряжение. Здесь, как нетрудно видеть, $2\lambda_2 + 2\lambda_4 + 2 = 0$ и $2\lambda_3 + 2 = 0$. Если, например $n_5 \neq 0$, т.е. в записи числа $(n)_7$ есть хотя бы одна пятерка, то $\sigma_2 = 0$.

Чтобы воспользоваться формулой (15) из теоремы 7 нам нужны матрицы S_k ($k = \overline{1, 6}$). В соответствии с (9') матрицы S_1 и S_2 имеют вид:

$$S_1 = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & \overline{\lambda_2} & \overline{\lambda_1} & \lambda_2 & \lambda_1 & -1 \\ \lambda_2 & 1 & \lambda_1 & \overline{\lambda_2} & -1 & \overline{\lambda_1} \\ \lambda_1 & \overline{\lambda_1} & 1 & -1 & \lambda_2 & \overline{\lambda_2} \\ \overline{\lambda_2} & \lambda_2 & -1 & 1 & \overline{\lambda_1} & \lambda_1 \\ \overline{\lambda_1} & -1 & \overline{\lambda_2} & \lambda_1 & 1 & \lambda_2 \\ -1 & \lambda_1 & \lambda_2 & \overline{\lambda_1} & \overline{\lambda_2} & 1 \end{pmatrix}, \quad S_2 = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & \lambda_2 & \overline{\lambda_2} & \overline{\lambda_2} & \lambda_2 & 1 \\ \overline{\lambda_2} & 1 & \lambda_2 & \lambda_2 & 1 & \overline{\lambda_2} \\ \lambda_2 & \overline{\lambda_2} & 1 & 1 & \overline{\lambda_2} & \lambda_2 \\ \lambda_2 & \overline{\lambda_2} & 1 & 1 & \overline{\lambda_2} & \lambda_2 \\ \overline{\lambda_2} & 1 & \lambda_2 & \lambda_2 & 1 & \overline{\lambda_2} \\ 1 & \lambda_2 & \overline{\lambda_2} & \overline{\lambda_2} & \lambda_2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Далее, если обозначить k -ю строку матрицы S_3 через $(S_3)_k$, тогда будем иметь

$$(S_3)_1 = (S_3)_2 = -(S_3)_3 = (S_3)_4 = -(S_3)_5 = -(S_3)_6 = \frac{1}{6}(1, 1, -1, 1, -1, -1).$$

Кроме этого из леммы 7 вытекает, что $S_4 = S_2^t$, $S_5 = S_1^t$, $S_6 = 1/6(1)_{i,j=\overline{1,6}}$. Теперь из (15), учитывая (18), легко получаем:

$$\begin{aligned} g_1^{(1)}(n, 7) &= 1/6(2\operatorname{Re}(\sigma_1 + \sigma_2) + \sigma_3 + \sigma_6), \\ g_2^{(1)}(n, 7) &= 1/6(2\operatorname{Re}(\lambda_4\sigma_1 + \lambda_2\sigma_2) + \sigma_3 + \sigma_6), \\ g_3^{(1)}(n, 7) &= 1/6(2\operatorname{Re}(\lambda_5\sigma_1 + \lambda_4\sigma_2) - \sigma_3 + \sigma_6), \\ g_4^{(1)}(n, 7) &= 1/6(2\operatorname{Re}(\lambda_2\sigma_1 + \lambda_4\sigma_2) + \sigma_3 + \sigma_6), \\ g_5^{(1)}(n, 7) &= 1/6(2\operatorname{Re}(\lambda_1\sigma_1 + \lambda_2\sigma_2) - \sigma_3 + \sigma_6), \\ g_6^{(1)}(n, 7) &= 1/6(2\operatorname{Re}(-\sigma_1 + \sigma_2) - \sigma_3 + \sigma_6), \end{aligned} \quad (19)$$

Полученные равенства справедливы только если $n_3 = n_5 = 0$, поскольку $2\lambda_2 + 2\lambda_4 + 2 = 0$ и $2\lambda_3 + 2 = 0$. Если $n_3 \neq 0$ и $n_5 = 0$, то в (19) надо считать $\sigma_3 = 0$. Если $n_3 = 0$ и $n_5 \neq 0$, то в (19) надо считать, что $\sigma_2 = 0$. Наконец, если $n_3 \neq 0$ и $n_5 \neq 0$, то $\sigma_2 = \sigma_3 = 0$. Во всех других случаях, кроме указанных выше, надо пользоваться формулами (18).

5. Заключение

Отметим три простых свойства чисел $g_s^{(k)}(n, p)$. Рассмотрим две строки треугольника Паскаля с номерами $(n)_p$ и $(m)_p$. Первое, если числа $(n)_p$ и $(m)_p$ содержат в их записи одно и то же число цифр $1, 2, \dots, p-1$ исключая 0, то $g_s^{(k)}(n, p) = g_s^{(k)}(m, p)$ для всех s и k . Это так, поскольку в (4) $B_0 = E$. Второе, если число $(n)_p$ содержит цифру 1 на l штук больше, чем число $(m)_p$, то $g_s^{(k)}(n, p) = 2^l g_s^{(k)}(m, p)$ для всех s и k . Это так, поскольку в (4) $B_1 = 2E$ для любого p . Третье, если число $(n)_p$ в своей записи содержит только цифры 0 и $p-1$, то строка треугольника Паскаля с номером $(n)_p$ не содержит чисел $2, \dots, p-2$, т.е. $g_s^{(1)}(n, p) = 0$ при $s = 2, \dots, p-2$. Это так, поскольку в формуле (4) будет присутствовать только степень матрицы B_{p-1} , которая является суммой диагональной матрицы и косодиагональной матрицы:

$$B_{p-1} = \frac{p+1}{2}E + \frac{p-1}{2}\tilde{E}. \quad (20)$$

Поскольку $\tilde{E}^2 = E$, то степень матрицы B_{p-1} обладает такой же структурой, а значит $(B_{p-1}^k)_{1,1} = 0$ при $s = 2, \dots, p-2$. Для доказательства (20) рассмотрим последнюю строку треугольника $\Delta_{p-1}^{(1)}$. Нетрудно получить равенство $(k+1)C_{p-1}^{k+1} = (p-k-1)C_{p-1}^k$, из которого следует,

что $(k+1)(C_{p-1}^{k+1} + C_{p-1}^k) = 0 \pmod{p} \Rightarrow C_{p-1}^{k+1} + C_{p-1}^k = 0 \pmod{p}$. Так как $C_{p-1}^0 = 1$, то $C_{p-1}^1 = p-1$ и значит $C_{p-1}^2 = 1$ и т.д. В последней строке треугольника $\Delta_{p-1}^{(1)}$ идет чередование чисел 1 и $p-1$, причем единиц на одну больше. В последней строке треугольника $\Delta_{p-1}^{(2)}$ будут только числа $2 \cdot 1 = 2$ и $2 \cdot (p-1) = p-2$ и значит на втором месте во второй строке B_{p-1} будет $\frac{p+1}{2}$, а в предпоследней строке $\frac{p-1}{2}$ и т.д. Формула (20) доказана.

Литература

1. Bondarenko, B.A. Generalized Pascal Triangles and Pyramids: Their Fractals, Graphs and Applications / B.A. Bondarenko; пер. с рус.; под ред. R.C. Bollinger. – Santa Clara, Calif: The Fibonacci Association, 1993.
2. Karachik, V.V. Distribution of Eulerian and Stirling numbers mod m in arithmetical triangles / V.V. Karachik, B.A. Bondarenko // Вопросы вычислительной и прикладной математики. – 1996. – Issue 102. – P. 133–140.
3. Karachik, V.V. P-latin matrices and Pascal's triangle modulo a prime / V.V. Karachik // The Fibonacci Quarterly. – 1996. – Vol. 34, № 4. – P. 362–372.
4. Карачик, В.В. Свойства нормализованных p -латинских матриц / В.В. Карачик // Узбекский журнал «Проблемы информатики и энергетики». – 1992. – № 5–6. – С. 9–14.
5. Denes, J. Latin Squares and Their Applications / J. Denes, A.D. Keedwell. – Budapest: Akad. Kiado, 1974. – 547 p.
6. Hexel, E. Counting Residues Modulo a Prime in Pascal's Triangle / E. Hexel, H. Sachs // Indian J. Math. – 1978. – Vol. 20, № 2. – P. 91–105.

Поступила в редакцию 17 апреля 2012 г.

PASCAL'S TRIANGLE AND p -LATIN MATRICES

V.V. Karachik¹

Properties of a special class of matrices arising in the analysis of binominal coefficients distribution in terms of a prime number modulus are considered. Formulae of elements distribution in the row of Pascal's triangle in terms of a prime number modulus are obtained.

Keywords: Pascal's triangle, latin matrices, binominal coefficient.

References

1. Bondarenko B.A. Generalized Pascal Triangles and Pyramids: Their Fractals, Graphs and Applications. Santa Clara, Calif: The Fibonacci Association, 1993.
2. Karachik V.V., Bondarenko B.A. Distribution of Eulerian and Stirling numbers mod m in arithmetical triangles. *Voprosy vychislitel'noi i ppikladnoi matematiki*. 1996. Issue 102. pp. 133–140. (in Russ.).
3. Karachik V.V. P-latin matrices and Pascal's triangle modulo a prime. *The Fibonacci Quarterly*. 1996. Vol. 34, no. 4. pp. 362–372.
4. Karachik V.V. Svoistva nornalizovannykh p -latinskikh matpits (Properties of Standardized p -Latin Matrices). *Uzbekskii zhurnal «Problemy informatiki i energetiki»*. 1992. no. 5–6. pp. 9–14. (in Russ.).
5. Denes J., Keedwell A.D. *Latin Squares and Their Applications*. Budapest: Akad. Kiado, 1974. 547 p.
6. Hexel E., Sachs H. Counting Residues Modulo a Prime in Pascal's Triangle. *Indian J. Math*. 1978. Vol. 20, no. 2. pp. 91–105.

¹ Karachik Valeriy Valentinovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Head of Differential equations and Dynamical Systems Department, South Ural State University.
E-mail: karachik@usu.ru

ПРИЗНАКИ h -ОДНОРОДНОСТИ ПРОСТРАНСТВА

С.В. Медведев¹

Доказан критерий h -однородности для метрического однородного пространства. В качестве следствия получены два признака h -однородности метрических пространств.

Ключевые слова: однородное пространство, h -однородное пространство, π -база, группа, гомеоморфизм.

h -однородные пространства играют важную роль в дескриптивной теории множеств. В заметке доказывается критерий, позволяющий выделить h -однородные пространства из класса однородных метрических пространств. С помощью этого критерия получены два признака h -однородности пространства.

Запись $X \approx Y$ означает, что пространства X и Y гомеоморфны. $w(X)$ – вес пространства X . Под кардиналом k понимается множество всех ординалов, которые меньше k . Наименьший бесконечный кардинал обозначается буквой ω , также $\omega = \{0, 1, 2, \dots\}$. Пространство X называется *однородным*, если для любых двух точек a и b из X найдется гомеоморфизм $f: X \rightarrow X$, для которого $f(a) = b$. Пространство X называется *h -однородным*, если каждое непустое открыто-замкнутое множество из X гомеоморфно всему пространству X . Доказано, что каждое метрическое h -однородное пространство является однородным. Семейство γ непустых открытых множеств называется *π -базой* пространства X , если каждое непустое открытое множество из X содержит некоторый элемент семейства γ .

Остальные используемые определения и обозначения можно найти в [1].

Теорема 1. Пусть дано однородное, нигде не локально компактное метрическое пространство X веса k , причем $\text{Ind}X = 0$. Тогда следующие условия эквивалентны:

- 1) X – h -однородное пространство,
- 2) для каждого непустого открытого множества $U \subseteq X$ найдутся такие непустое открытое множество $V \subseteq X$ и дискретное открытое семейство $\{V_\alpha : \alpha \in k\}$, что объединение $\cup\{V_\alpha : \alpha \in k\} \subseteq U$ и каждое V_α гомеоморфно V .

Доказательство. 1) $\Rightarrow$ 2). Зафиксируем открытое множество $U \subseteq X$. Из h -однородности пространства X следует, что $w(U) = w(X) = k$. Более того, U содержит замкнутое (в X) дискретное множество D мощности k . Так как метрические пространства коллективно нормальны, найдется такое дискретное открытое семейство $\{V_\alpha : \alpha \in k\}$, что пересечение $D \cap V_\alpha$ состоит из одной точки для любого α . Тогда каждое $V_\alpha \approx X \approx V$ по определению h -однородного пространства.

2) $\Rightarrow$ 1). Выберем базу топологии $\mathcal{B}$ пространства X , состоящую из открыто-замкнутых множеств. Для каждого $U \in \mathcal{B}$, удовлетворяющего условию 2) из формулировки теоремы, построим открыто-замкнутое множество $U^* \subseteq U$, которое гомеоморфно X . Для этого зафиксируем точку $a \in V$. По условию пространство X однородное. Поэтому для любой точки $x \in X$ найдется такой гомеоморфизм $f_x: X \rightarrow X$, что $f_x(a) = x$. Так как $\text{Ind}X = 0$, то из покрытия $\{f_x(V) : x \in X\}$ пространства X можно выделить дискретное подпокрытие $\{W_\alpha : \alpha \in k_1\}$. Из условия $w(X) = k$ вытекает неравенство $k_1 \leq k$. По построению каждое множество W_α гомеоморфно открыто-замкнутому подмножеству из V_α . Следовательно, $X = \cup\{W_\alpha : \alpha \in k_1\}$ гомеоморфно некоторому открыто-замкнутому подмножеству U^* из $\cup\{V_\alpha : \alpha \in k_1\} \subseteq U$. Семейство $\{U^* : U \in \mathcal{B}\}$ образует π -базу пространства X . Тогда по теореме 2.4 из [2] пространство X будет h -однородным. Теорема доказана.

Рассмотрим случаи, когда существует семейство, удовлетворяющее условию 2) из теоремы 1.

¹ Медведев Сергей Васильевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра математического анализа, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: medv@math.susu.ac.ru

Теорема 2. Пусть дано однородное, однородное по весу метрическое пространство X веса k , причем $cf(k) > \omega$ и $IndX = 0$. Тогда X – h -однородное пространство.

Доказательство. Так как $cf(k) > \omega$, то пространство X нигде не локально компактно.

Возьмем непустое открыто-замкнутое множество $U \subseteq X$. Так как $cf(k) > \omega$ и $IndX = 0$, то существует дискретное открытое покрытие $\mathcal{U} = \{U_\alpha : \alpha \in k\}$ пространства X . Зафиксируем точку $a \in X$ и убывающую открыто-замкнутую базу $\{O_n : n \in \omega\}$ в точке a . Для каждого $n \in \omega$ через k_n обозначим мощность семейства $\mathcal{U}_n = \{U \in \mathcal{U} : U \text{ содержит открыто-замкнутое подмножество, гомеоморфное } O_n\}$. Тогда $k_0 \leq k_1 \leq \dots$. Из однородности пространства X следует, что каждое $U \in \mathcal{U}$ принадлежит некоторому семейству $\mathcal{U}_n$. Тогда $\sup\{k_n : n \in \omega\} = k$. Так как $cf(k) > \omega$, то найдется такой номер j , что $k_j = k$. Поэтому $\mathcal{U}_j = \{U_\alpha : \alpha \in k\}$. По построению $O_j \approx V_\alpha$ для некоторого $V_\alpha \subseteq W_\alpha$. Положим $V = O_j$. Семейство $\{V_\alpha : \alpha \in k\}$ дискретно в X и $\bigcup\{V_\alpha : \alpha \in k\} \subseteq U$. Тогда пространство X будет h -однородным по теореме 1. Теорема доказана.

Топологическая группа G называется *локально вполне ограниченной*, если существует такое непустое открытое множество $U \subseteq G$, что для любой окрестности V единичного элемента e группы G выполняются условия $U \subseteq F \cdot V$ и $U \subseteq V \cdot F$ для некоторого конечного множества $F \subseteq G$.

Теорема 3. Пусть дана сепарабельная нульмерная метризуемая топологическая группа G , которая не является локально вполне ограниченной. Тогда G – h -однородное пространство.

Доказательство. Так как группа G не локально вполне ограничена, то она нигде не локально компактна. По теореме Биркгофа–Какутани существует левоинвариантная метрика d , совместимая с топологией группы G . Зафиксируем базу $\{O_n : n \in \omega\}$ для единичного элемента e группы G , состоящую из открыто-замкнутых множеств и удовлетворяющую условию $diam(O_n) < (n+1)^{-1}$ для любого $n \in \omega$. Возьмем непустое открыто-замкнутое множество $U \subseteq G$. Внутри U выделим непустое открыто-замкнутое множество $U^* \subseteq U$ так, чтобы расстояние $d(U^*, G \setminus U) > m^{-1}$ для некоторого $m \in \omega$. Так как группа G не локально вполне ограничена, то найдется бесконечное множество $\{a_n : n \in \omega\} \subset U^*$, которое j^{-1} -метрически дискретно для некоторого $j \in \omega$; причем, без ограничения общности, $j > m$. Положим $V = O_{2j}$ и $V_n = a_n \cdot V$. Несложно проверить, что множества $\{V_n : n \in \omega\}$ попарно не пересекаются и их объединение принадлежит U .

По теореме 1 пространство G будет h -однородным. Теорема доказана.

Литература

1. Энгелькинг, Р. Общая топология / Р. Энгелькинг. – М.: Мир, 1986. – 752 с.
2. Terada, T. Spaces whose all nonempty clopen subspaces are homeomorphic / T. Terada // Yokohama Math. J. – 1993. – Vol. 40. – P. 87–93.

Поступила в редакцию 20 августа 2012 г.

CHARACTERISTICS OF h -HOMOGENEITY OF A SPACE

S.V. Medvedev¹

The criterion of h -homogeneity of a homogeneous metric space with $IndX = 0$ is proved. As a consequence we obtain two characteristics of h -homogeneity for metric spaces.

Keywords: homogeneous space, h -homogeneous space, π -base, group, homeomorphism.

References

1. Engel'king, R. *Obshchaya topologiya* (General Topology). Moscow: Mir, 1986. – 752 p. [Engelking R. General Topology. Warsaw: PWN, 1977. 626 p.]
2. Terada T. Spaces whose all nonempty clopen subspaces are homeomorphic. *Yokohama Math. J.* 1993. Vol. 40. pp. 87–93.

¹ Medvedev Sergey Vasiljevich is Cand.Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Mathematical Analysis Department, South Ural State University. E-mail: medv@math.susu.ac.ru

ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ СТРАТЕГИИ В ИГРОВЫХ ЗАДАЧАХ ДЛЯ ЛИНЕЙНЫХ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ СИСТЕМ ВОЛЬТЕРРА, I

В.Л. Пасиков¹

Изучены игровые ситуации для систем, описываемых линейными интегро-дифференциальными уравнениями Вольтерра с управляющими воздействиями вне интеграла. Для решения этих задач предложена некоторая модификация известной экстремальной конструкции академика Н.Н. Красовского.

Ключевые слова: игровая задача, интегро-дифференциальная система, управляющее воздействие, позиции игры, программный максимум.

Введение

В предлагаемой работе рассматривается задача сближения-уклонения для линейных интегро-дифференциальных систем Вольтерра с управляющими воздействиями вне интеграла. Задача трактуется как позиционная антагонистическая игра в условиях конфликта при подходящем выборе пространства позиций. Особенность работы заключается в том, что эволюция объектов в рассматриваемой задаче описывается линейными интегро-дифференциальными системами Вольтерра, что усложняет применение методов решения, развитых в работах [1–8], на основе которых проводятся исследования. Предлагаемые модификации этих методов используют полную память по управляющим воздействиям [2, 7, 8].

1. Вывод формулы решения управляемой линейной интегро-дифференциальной системы Вольтерра

Рассматривается управляемая система, динамика которой описывается векторными линейными интегро-дифференциальными уравнениями Вольтерра:

$$\dot{z}(t) = f(t) + A(t)z(t) + \int_0^t K(t, s)z(s)ds + \omega(t), \quad z(0) = z_0. \quad (1)$$

Здесь z – n -мерный фазовый вектор; $f(t)$ – n -мерная измеримая по Лебегу на $[0, \theta]$ вектор-функция; $A(t)$ – непрерывная на $[0, \theta]$ матрица $n \times n$; $K(t, s)$ – непрерывная при $0 \leq s \leq t \leq \theta$ матрица $n \times n$; ω – управляющее воздействие, стесненное вложением $\omega \in T \subset R^n$, где T – выпуклый компакт; реализация управляющего воздействия $\omega[t]$, $t \in [0, \theta]$, измеримая по Лебегу функция; $0 < \theta$ – фиксированный момент. Все интегралы понимаются в смысле Лебега.

По плану доказательства теоремы 27 [9, с. 41] проверяется справедливость следующего утверждения.

Теорема 1.1. Если функции $f(t)$, $\omega(t)$ измеримы по Лебегу, а матрицы $A(t)$, $K(t, s)$ непрерывны в соответствующих областях определения, то уравнение (1) имеет единственное абсолютно непрерывное решение $z(t)$, удовлетворяющее заданному начальному условию $z(0) = z_0$.

Доказательство. Предположим, что $z(t)$ – абсолютно непрерывное решение (1) с начальным условием $z(0) = z_0$. Тогда при почти всех $t \in [0, \theta]$:

$$\dot{z}(t) - A(t)z(t) - \int_0^t K(t, s)z(s)ds = f(t) + \omega(t). \quad (2)$$

Проинтегрируем (2) по Лебегу:

$$z(t) - \int_0^t A(s)z(s)ds - \int_0^t \left[\int_0^s K(\tau, s)z(s)ds \right] d\tau = z_0 + \int_0^t f(s)ds + \int_0^t \omega(s)ds,$$

¹ Пасиков Владимир Леонидович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра математического анализа и информатики, Орский гуманитарно-технологический институт (филиал Оренбургского государственного университета)
E-mail: pasikov_fmfa@mail.ru

поменяем порядок интегрирования по формуле Дирихле [9, с. 38]. Тогда

$$z(t) = \int_0^t \left[A(s) + \int_s^t K(\tau, s) d\tau \right] z(s) ds + z_0 + \int_0^t f(s) ds + \int_0^t \omega(s) ds. \quad (3)$$

Равенство (3) – линейное интегральное уравнение Вольтерра второго рода

$$z(t) = \int_0^t Q(t, s) z(s) ds + \varphi(t). \quad (4)$$

Здесь $Q(t, s) = A(s) + \int_s^t K(\tau, s) d\tau$ – непрерывное ядро уравнения (4) при $0 \leq s \leq t \leq \theta$;

$\varphi(t) = z_0 + \int_0^t f(s) ds + \int_0^t \omega(s) ds$ – абсолютно непрерывная на $[0, \theta]$ функция.

Согласно [10, с. 132] уравнение (4) имеет единственное абсолютно непрерывное решение, а значит исходное уравнение (1) имеет единственное абсолютно непрерывное решение, удовлетворяющее условию $z(0) = z_0$. Теорема доказана.

Далее по схеме [9, с. 43] получим формулу для решения уравнения (1) с начальным условием $z(0) = z_0$. Введем обозначение $k(t) = \dot{z}(t) - A(t)z(t)$ и получим линейное обыкновенное дифференциальное уравнение $\dot{z}(t) = y(t) + A(t)z(t)$. Запишем его решение по формуле Коши [1, с. 370]

$$z(t) = Z(t, 0)z_0 + \int_0^t Z(t, s)k(s) ds, \quad (5)$$

где $Z(t, s)$ – матрица Коши однородной системы $\dot{z}(t) = A(t)z(t)$. Подставляем $z(t)$ в (1) и меняем порядок интегрирования:

$$k(t) = f(t) + \omega(t) + \int_0^t K(t, s)Z(t, 0)z_0 ds + \int_0^t \left[\int_s^t K(t, \tau)Z(\tau, s) d\tau \right] k(s) ds. \quad (6)$$

Пусть $\Phi(t, s) = \int_s^t K(t, \tau)Z(\tau, s) d\tau$. Тогда (6) примет вид

$$k(t) = f(t) + \omega(t) + \Phi(t, 0)z_0 + \int_0^t \Phi(t, s)k(s) ds. \quad (7)$$

Равенство (7) является интегральным уравнением Вольтерра второго рода. Обозначим символом $R(t, s)$ резольвенту матрицы $\Phi(t, s)$. Тогда суммируемое решение уравнения (7) можно записать в виде

$$y(t) = f(t) + \omega(t) + \Phi(t, 0)z_0 + \int_0^t R(t, s) [f(s) + \omega(s) + \Phi(s, 0)z_0] ds. \quad (8)$$

Подставив (8) в (5) и изменив порядок интегрирования, получим

$$z(t) = Z(t, 0)z_0 + \int_0^t \left[Z(t, s) + \int_s^t Z(t, \tau)R(\tau, s) d\tau \right] (f(s) + \omega(s) + \Phi(s, 0)z_0) ds. \quad (9)$$

Положим, $\tilde{z}(t, s) = Z(t, s) + \int_s^t Z(t, \tau)R(\tau, s) d\tau$. Тогда для (9) получим:

$$z(t) = Z(t, 0)z_0 + \int_0^t \tilde{z}(t, s) [\Phi(s, 0)z_0 + f(s)] ds + \int_0^t \tilde{z}(t, s) \omega(s) ds. \quad (10)$$

Доказано следующее утверждение.

Теорема 1.2. Если функции $f(t)$, $\omega(t)$ измеримы, а матрицы $A(t)$, $K(t, s)$ непрерывны в соответствующих областях определения, то уравнение (1) имеет абсолютно непрерывное решение $z(t)$ с начальным условием $z(0) = z_0$, определяемое формулой (10).

2. Задача сближения-уклонения

для линейных интегро-дифференциальных систем Вольтерра

Рассматривается динамическая система, складывающаяся из двух управляемых объектов, эволюция которых описывается линейными интегро-дифференциальными уравнениями Вольтерра:

$$\dot{x}(t) = f_1(t) + A_1(t)x(t) + \int_0^t K_1(t, s)x(s)ds + u(t), \quad x(0) = x_0, \quad (11)$$

$$\dot{y}(t) = f_2(t) + A_2(t)y(t) + \int_0^t K_2(t, s)y(s)ds + v(t), \quad y(0) = y_0, \quad (12)$$

$$u \in P \subset R^{n_1}, \quad v \in Q \subset R^{n_2}. \quad (13)$$

Ограничения на параметры систем аналогичны пункту 1; x – n_1 -мерный, а y – n_2 -мерный фазовые векторы. Движение системы (11) подчинено первому игроку – преследователю. Движение системы (12) подчинено второму игроку – преследуемому. Управляющие воздействия игроков стеснены ограничениями (13). Игра рассматривается на заданном промежутке $[0, \theta]$ и плата изображается равенством

$$\gamma(\theta) = \left\| \{y(\theta)\}_m - \{x(\theta)\}_m \right\|. \quad (14)$$

Здесь и в дальнейшем $\|\cdot\|$ – символ евклидовой нормы, $\{z\}_m$ – вектор, составленный из первых m компонент вектора z , $\theta = \text{const} > 0$ – фиксированный момент окончания игры, $m \leq \min\{n_1, n_2\}$. Первый игрок распоряжается выбором управления $u \in P$, стремясь минимизировать величину $\gamma(\theta)$ на траекториях $x[t]$, $0 \leq t \leq \theta$, системы (11), реализующихся под действием его управлений $u[t]$, $0 \leq t \leq \theta$, $u \in P$, в паре с любой интегрируемой реализацией $v[t]$, $0 \leq t \leq \theta$, $v \in Q$, управления второго игрока. Цель второго игрока противоположна и состоит в максимизации величины $\gamma(\theta)$ на траекториях $y[t]$, $0 \leq t \leq \theta$, системы (12), реализующихся под действием его управлений $v[t]$, $0 \leq t \leq \theta$, $v \in Q$, в паре с любой интегрируемой реализацией $u[t]$, $0 \leq t \leq \theta$, $u \in P$, управлений первого игрока.

Введем обозначения, аналогичные пункту 1:

$$x(t) = X(t, 0)x_0 + \int_0^t \tilde{x}(t, s)[L(s, 0)x_0 + f_1(s)]ds + \int_0^t \tilde{x}(t, s)u(s)ds, \quad (15)$$

$$y(t) = Y(t, 0)y_0 + \int_0^t \tilde{y}(t, s)[M(s, 0)y_0 + f_2(s)]ds + \int_0^t \tilde{y}(t, s)v(s)ds, \quad (16)$$

$$\tilde{x}(t, s) = X(t, s) + \int_s^t X(t, \tau)R_1(\tau, s)d\tau, \quad (17)$$

$$\tilde{y}(t, s) = Y(t, s) + \int_s^t Y(t, \tau)R_2(\tau, s)d\tau, \quad (18)$$

где $X(t, s)$ и $Y(t, s)$ – матрицы Коши систем $\dot{x}(t) = A_1(t)x(t)$, $\dot{y}(t) = A_2(t)y(t)$; $R_1(t, s)$ и $R_2(t, s)$ – резольвенты матриц $L(t, s) = \int_s^t K_1(t, \tau)X(\tau, s)d\tau$ и $M(t, s) = \int_s^t K_2(t, \tau)Y(\tau, s)d\tau$.

Окончательно решения (15) и (16) записываем в виде:

$$x(t) = X(t, 0)x_0 + \int_0^t \tilde{x}(t, s)N_1(s)ds + \int_0^t \tilde{x}(t, s)u(s)ds, \quad (19)$$

$$y(t) = Y(t, 0)y_0 + \int_0^t \tilde{y}(t, s)N_2(s)ds + \int_0^t \tilde{y}(t, s)v(s)ds, \quad (20)$$

где $N_1(s) = L(s, 0)x_0 + f_1(s)$, $N_2(s) = M(s, 0)y_0 + f_2(s)$.

Если до момента t , $t_0 \leq t \leq \theta$, оба игрока применяли некоторые допустимые управления $u[t]$, $v[t]$, а после момента t имеем $u[t] \equiv 0$, $v[t] \equiv 0$, то состояния систем (19), (20) имеют вид:

$$x(\theta, t) = X(\theta, t)x_0 + \int_0^\theta \tilde{x}(\theta, s)N_1(s)ds + \int_0^{t_0} \tilde{x}(\theta, s)u_0[s]ds + \int_{t_0}^t \tilde{x}(\theta, s)u(s)ds, \quad (21)$$

$$y(\theta, t) = Y(\theta, t)y_0 + \int_0^\theta \tilde{y}(\theta, s)N_2(s)ds + \int_0^{t_0} \tilde{y}(\theta, s)v_0[s]ds + \int_{t_0}^t \tilde{y}(\theta, s)v(s)ds. \quad (22)$$

Обозначим

$$x_0(\theta) = X(\theta, 0)x_0 + \int_0^\theta \tilde{x}(\theta, s)N_1(s)ds, \quad y_0(\theta) = Y(\theta, 0)y_0 + \int_0^\theta \tilde{y}(\theta, s)N_2(s)ds.$$

Тогда из равенств (21) и (22) получим:

$$x(\theta, t) = x_0(\theta) + \int_0^{t_0} \tilde{x}(\theta, s)u_0[s]ds + \int_{t_0}^t \tilde{x}(\theta, s)u(s)ds, \quad (23)$$

$$y(\theta, t) = y_0(\theta) + \int_0^{t_0} \tilde{y}(\theta, s)v_0[s]ds + \int_{t_0}^t \tilde{y}(\theta, s)v(s)ds. \quad (24)$$

Определение 2.1. Тройку $p = \{t, x(\theta, t), y(\theta, t)\}$ будем называть позицией игры в момент t , $t_0 \leq t \leq \theta$, $0 \leq t_0 < \theta$; $p_0 = \{t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)\}$ – начальной позицией.

Из определения 2.1 следует, что области достижимости [1, с. 109] систем (11) и (12) в момент $t = \theta$ из начальной позиции p_0 состоят из всех точек соответственно

$$x(\theta) = x(\theta, t_0) + \int_{t_0}^\theta \tilde{x}(\theta, s)u[s]ds, \quad y(\theta) = y(\theta, t_0) + \int_{t_0}^\theta \tilde{y}(\theta, s)v[s]ds, \quad \text{где } u[t], v[t], t_0 \leq t \leq \theta, \text{ все допус-}$$

тимые реализации управляющих воздействий u и v . Из вида формул для $x(\theta)$, $y(\theta)$ вытекает, что свойства выпуклости и замкнутости областей достижимости, установленные в [1], имеют место в рассматриваемом случае.

Из определения 2.1 и формул (23), (24) следует, что для вычисления позиций требуется полная память по управлениям. Такие игры называются играми с запоминанием информации или играми с полной памятью [2, 7, 8].

Определение 2.2. Стратегией U (V) первого (второго) игрока будем называть многозначное отображение, которое каждой реализовавшейся позиции $p = \{t, x(\theta, t), y(\theta, t)\}$, $t_0 \leq t \leq \theta$, ставит в соответствие некоторое непустое множество [1, с. 61] $U(t, x(\theta, t), y(\theta, t)) \div u(t, x(\theta, t), y(\theta, t)) \subset P$ ($V(t, x(\theta, t), y(\theta, t)) \div v(t, x(\theta, t), y(\theta, t)) \subset Q$).

Множества $U(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$ и $V(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$ предполагаются выпуклыми замкнутыми и полунепрерывными сверху по включению при изменении позиции [1, с. 61]. Такие стратегии называем допустимыми, а соответствующие им управления $u(t) \in U(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$ и $v(t) \in V(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$ – допустимыми управлениями.

Под движениями систем (11), (12) будем понимать решения этих систем, в которых реализации допустимых управлений являются измерительными селекторами многозначных стратегий U и V , существующих согласно теореме об измеримом выборе [3, с. 55].

Уточним постановки задач для обоих игроков.

Задача 2.1. Среди допустимых стратегий U первого игрока найти стратегию U^c , которая при любом допустимом способе управления второго игрока для любой начальной позиции p_0 , $0 \leq t_0 < \theta$, гарантирует результат игры:

$$(\gamma(\theta) | t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0), U^c, v) \leq \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)).$$

Задача 2.2. Среди допустимых стратегий V второго игрока найти стратегию V^c , которая при любом допустимом способе управления первого игрока для любой начальной позиции p_0 , $0 \leq t_0 < \theta$, гарантирует результат игры:

$$(\gamma(\theta) | t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0), u, V^c) \geq \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)).$$

Задача 2.3. Среди допустимых стратегий U, V первого и второго игроков соответственно требуется найти пару оптимальных стратегий $U^c(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$ и $V^c(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$, $0 \leq t_0 \leq t < \theta$, которые доставляют седловую точку игре 2.1, 2.2 и, следовательно, удовлетворяют условиям

$$\gamma[\theta] | t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0) U^c, v \leq \gamma[\theta] | t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0) U^c, V^c \leq \gamma[\theta] | t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0) u, V^c$$

для любой начальной позиции p_0 .

Здесь $\varepsilon(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$, $0 \leq t_0 < \theta$, – программный максимум для начальной позиции p_0 , определяемый согласно (23), (24) формулой [4, с. 131]

$$\begin{aligned} \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)) = \max_{\|l\|=1} & \left[\int_{t_0}^{\theta} \max_{v \in Q} l' \{y(\theta, s)v(s)\}_m ds - \right. \\ & \left. - \int_{t_0}^{\theta} \max_{u \in P} l' \{x(\theta, s)u(s)\}_m ds + l' \left(\{y(\theta, t_0)\}_m - \{x(\theta, t_0)\}_m \right) \right], \end{aligned} \quad (25)$$

если правая часть этого равенства положительна, или $\varepsilon(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)) = 0$ в противном случае. В формуле (25) и далее штрих означает транспонирование.

Аналогично [1, с. 131] скажем, что имеет место регулярный случай, если для всех позиций $(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$, которые могут встретиться в рассматриваемой игре и для которых $\varepsilon(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)) > 0$, максимум в правой части (25) достигается на единственном векторе $l = l_0(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$. Иначе скажем, что случай нерегулярный. Здесь рассмотрим только регулярный случай.

Свойства функций $\varepsilon(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$, $l_0(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$, рассмотренные в [1], имеют место и в нашем случае. В частности, устанавливается, что функция $\varepsilon(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$ непрерывна по совокупности своих аргументов $\{t, x, y\}$, и в регулярном случае в области $\varepsilon(t, x(\theta, t), y(\theta, t)) > 0$, $0 \leq t \leq \theta$ вектор $l_0\{t, x, y\}$ зависит от аргументов $\{t, x, y\}$ непрерывно.

Пусть m -мерный вектор $l = l_0(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$ доставляет наибольшее значение правой части равенства (25) для произвольной начальной позиции p_0 , $0 \leq t_0 < \theta$. Тогда из (15), (16) получим:

$$\{l'_0 \cdot x(\theta, t)\} = \{l'_0 \cdot X(\theta, t)\}_m + \int_{t_0}^t \{l'_0 X(\theta, \tau)\}_m \cdot R_1(\tau, t) d\tau = x^c(t), \quad (26)$$

$$\{l'_0 \cdot y(\theta, t)\} = \{l'_0 \cdot Y(\theta, t)\}_m + \int_{t_0}^t \{l'_0 Y(\theta, \tau)\}_m \cdot R_2(\tau, t) d\tau = y^c(t). \quad (27)$$

Согласно [1, с. 387] $\{l'_0 \cdot X(\theta, t)\} = x(t)$, $\{l'_0 \cdot Y(\theta, t)\} = y(t)$ – первые m координат решений систем $\dot{x}(t) = -A'_1(t)x(t)$, $\dot{y}(t) = -A'_2(t)y(t)$ с красвыми условиями $x(\theta) = l_0$, $y(\theta) = l_0$, сопряженных системам $\dot{x}(t) = A_1(t)x(t)$, $\dot{y}(t) = A_2(t)y(t)$.

Таким образом, экстремальные векторы $x^c[t]$, $y^c[t]$ в рассматриваемом случае вычисляются сложнее, чем в случае обыкновенных дифференциальных систем, а при отсутствии интегралов в (11), (12) совпадают с экстремальными векторами для случая обыкновенных дифференциальных уравнений.

Определение 2.3. Пусть $l_0(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$ – вектор, состоящий из первых m координат вектора, доставляющего максимум правой части равенства (25), и позиция $p_0(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$ такова, что $\varepsilon(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)) > 0$. Этой позиции сопоставим множество $U^c(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$ ($V^c(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$) всех векторов $u^c \in P$ ($v^c \in Q$), для которых $x^c(t_0)u^c(t_0) = \max_{u \in P} x^c(t_0)u$ ($y^c(t_0)v^c(t_0) = \max_{v \in Q} y^c(t_0)v$). Тогда стратегию U^c (V^c) назовем экстремальной стратегией первого (второго) игрока.

Из определения 2.2, формул (19), (20) и результатов [1, с. 148] следует, что экстремальные стратегии допустимы. Отметим, что построенная выше экстремальная конструкция содержит элементы экстремальных конструкций из [1] и [11].

По плану доказательств аналогичных теорем из [1, с. 153] с использованием приведенных выше фрагментов доказательств проверяется справедливость следующего утверждения.

Теорема 2.1. В регулярном случае игры из задач 2.1 и 2.2 экстремальные стратегии $U^c(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$ и $V^c(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$, $0 \leq t_0 \leq t < \theta$, доставляют решения этих задач. Они составляют пару оптимальных стратегий $\{U^c, V^c\}$, которые разрешают задачу 2.3 и доставляют седловую рассматриваемой игры, причём $(\gamma[\theta]|_{t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)} U^c, V^c) = \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$, то есть оптимальная плата игры $(\gamma[\theta]|_{t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)} U^c, V^c)$ для всякой исходной позиции $(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$ равняется программному максимуму $\varepsilon(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0))$.

Доказательство. Запишем функцию

$$\begin{aligned} \varepsilon(t) = & \int_t^\theta \max_{v \in Q} \{l'_0(s, x(\theta, s), y(\theta, s)) \cdot \tilde{y}(\theta, s)\}_m \cdot v(s) ds - \\ & - \int_t^\theta \max_{u \in P} \{l'_0(s, x(\theta, s), y(\theta, s)) \cdot \tilde{x}(\theta, s)\}_m \cdot u(s) ds + \\ & + \int_{t_0}^t \{l'_0(s, x(\theta, s), y(\theta, s)) \cdot \tilde{y}(\theta, s)\}_m \cdot v[s] ds - \\ & - \int_{t_0}^t \{l'_0(s, x(\theta, s), y(\theta, s)) \cdot \tilde{x}(\theta, s)\}_m \cdot u[s] ds + \\ & + l'_0(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)) (\{y(\theta, t_0)\}_m - \{x(\theta, t_0)\}_m). \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь $l_0(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$ – экстремальный вектор, доставляющий максимум правой части (25) в позиции $p(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$, $t_0 \leq t \leq \theta$, $0 \leq t_0 < \theta$, в котором после m -й компоненты приписаны нули; $u[s]$, $v[s]$, $t_0 \leq s < t$ – допустимые управления, реализовавшиеся в момент t .

Совершенно аналогично [1, с. 151] можно показать, что при дифференцировании функции ε по t вектор l_0 от t не зависит.

Функция $\varepsilon(t)$ является абсолютно непрерывной функцией в области $\varepsilon(t) > 0$ в регулярном случае [1, с. 144]. Ее производная существует почти всюду на $[t_0, \theta]$ и имеет вид

$$\frac{d\varepsilon(t)}{dt} = \max_{u \in P} \{l'_0(t, x(\theta, t), y(\theta, t)) \cdot x(\theta, t)\}_m u - \max_{v \in Q} \{l'_0(t, x(\theta, t), y(\theta, t)) \cdot y(\theta, t)\}_m v + \\ + \{l'_0(t, x(\theta, t), y(\theta, t)) \cdot y(\theta, t)\}_m v[t] - \{l'_0(t, x(\theta, t), y(\theta, t)) \cdot x(\theta, t)\}_m u[t].$$

С учетом (2.16), (2.17) это выражение представляется в форме

$$\frac{d\varepsilon(t)}{dt} = -\max_{v \in Q} y^c(t)v + \max_{u \in P} x^c(t)u + y^c(t)v - x^c(t)u. \quad (29)$$

Считаем теперь, что первый игрок в течение всей игры применяет экстремальную стратегию U^c , а второй – произвольную допустимую. Тогда из (29) имеем $\frac{d\varepsilon(t)}{dt} = -\max_{v \in Q} y^c(t)v + y^c(t)v$, отсюда $\frac{d\varepsilon(t)}{dt} \leq 0$.

Следовательно, когда функция $\varepsilon(t) = \varepsilon(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$ положительна, то при почти всех t , $t_0 \leq t \leq \theta$, она имеет неположительную производную. Таким образом, функция $\varepsilon(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$, $t_0 \leq t \leq \theta$, не возрастает, а значит,

$$\varepsilon(\theta) = \varepsilon(\theta, x(\theta, \theta), y(\theta, \theta)) \leq \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)).$$

Здесь $\varepsilon(\theta) = \|\{y(\theta)\}_m - \{x(\theta)\}_m\|$ согласно (28) в ситуации, когда первый игрок применяет свою экстремальную стратегию, а второй – произвольную допустимую.

Допустим теперь, что второй игрок в течение всей игры применяет экстремальную стратегию. Тогда $\frac{d\varepsilon(t)}{dt} = \max_{u \in P} x^c(t)u - x^c(t)u$ в силу (29), отсюда $\frac{d\varepsilon(t)}{dt} \geq 0$. Следовательно, когда функция $\varepsilon(t)$ положительна, то при почти всех t , $t_0 \leq t \leq \theta$, она имеет неотрицательную производную. Таким образом, функция $\varepsilon(t, x(\theta, t), y(\theta, t))$ не убывает, а значит, $\varepsilon(\theta) \geq \varepsilon(t_0)$.

Пусть теперь в регулярном случае оба игрока применяют свои экстремальные стратегии, тогда им будет, как это следует из предыдущего, гарантирован результат

$$\|\{y(\theta)\}_m - \{x(\theta)\}_m\| = \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0), y(\theta, t_0)).$$

Теорема доказана.

Пример. Пусть движение объекта описывается скалярным уравнением

$$\dot{z}(t) = e^t + \int_0^t z(s)ds + \omega(t), \quad z(0) = 1, \quad (30)$$

здесь $f(t) = e^t$, $A(t) \equiv 0$, $K(t, s) \equiv 1$; соответствующая однородная дифференциальная система для

(1) имеет вид $\dot{s}(t) = 0$, тогда положим, что фундаментальная матрица $Z(t, s) = Z(t)Z^{-1}(s) = 1$, $Z(t, 0) = 1$; для начального условия $z(0) = 2$ выберем $Z(t) = 2$, $Z(t, s) = 1$.

Далее вычисляем матрицу $\Phi(t, s) = \int_0^t K(t, \tau)Z(\tau, s)d\tau = \int_s^t d\tau = t - s$, $\Phi(t, 0) = t$, резольвента этой матрицы определяется формулой $R(t, s) = \text{sh}(t - s)$ [12, с. 22] или в другой форме $\text{sh}(t - s) = \frac{e^{t-s} - e^{-(t-s)}}{2}$, тогда

$$\tilde{z}(t, s) = Z(t, s) + \int_s^t Z(t, \tau)R(\tau, s)d\tau = 1 + \int_s^t \text{sh}(\tau - t)d\tau = 1 + \text{ch}(\tau - s) \Big|_{\tau=s}^{\tau=t} = \\ = 1 + \text{ch}(t - s) - 1 = \text{ch}(t - s).$$

Для начального условия $z(0) = 1$ имеем $\varphi(t) = f(t) + \Phi(t, 0)z_0 = e^t + t$, для начального условия $z(0) = 2$ имеем $\varphi(t) = e^t + 2t$.

Записываем состояние уравнения (1) в момент t :

$$z(t) = Z(t, 0)z_0 + \int_0^t z(t, s)\varphi(s)ds + \int_0^t z(t, s)\omega(s)ds;$$

для случая $z(0) = 1$ имеем

$$z(t) = 1 + \int_0^t \text{ch}(t-s)(e^s + 2s)ds + \int_0^t \text{ch}(t-s)\omega(s)ds. \quad (31)$$

Вычисляем

$$\begin{aligned} \int_0^t \text{ch}(t-s)(e^s + 2s)ds &= \frac{1}{2} \int_0^t (e^{t-s} + e^{-(t-s)})(e^s + 2s)ds = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^t (e^{t-s} + e^{-(t-s)})e^s ds + \frac{1}{2} \int_0^t (e^{t-s} + e^{-(t-s)})2s ds, \end{aligned}$$

для первого слагаемого получаем $\frac{1}{2} \int_0^t (e^t + e^{-t+2s})ds = \frac{1}{2} e^t t + \frac{1}{4} e^{-t} e^{2s} \Big|_0^t = \frac{1}{2} e^t t + \frac{1}{4} e^t - \frac{1}{4} e^{-t}$, для вто-

рого слагаемого $\int_0^t s(e^{t-s} + e^{-(t-s)})ds = e^t \int_0^t s e^{-s} ds + e^{-t} \int_0^t s e^s ds$, интегрируем по частям

$$\begin{aligned} e^t \int_0^t s e^{-s} ds &= \left| \begin{array}{l} u = s \Rightarrow du = ds \\ dv = e^{-s} ds \Rightarrow v = -e^{-s} \end{array} \right| = e^t \left(-s e^{-s} \Big|_0^t + \int_0^t e^{-s} ds \right) = e^t \left(-t e^{-t} - e^{-s} \Big|_0^t \right) = \\ &= e^t (-t e^{-t} - e^{-t} + 1) = -t - 1 + e^t, \quad e^{-t} \int_0^t s e^s ds = \left| \begin{array}{l} u = s \Rightarrow du = ds \\ dv = e^s ds \Rightarrow v = e^s \end{array} \right| = e^{-t} \left(t e^t - e^s \Big|_0^t \right) = \\ &= e^{-t} (t e^t - e^t + 1) = t - 1 + e^{-t}. \end{aligned}$$

Получаем, подставляя в (31)

$$\begin{aligned} z(t) &= 1 + \frac{1}{2} t e^t + \frac{1}{4} e^t - \frac{1}{4} e^{-t} - t - 1 + e^t + t - 1 + e^{-t} + \int_0^t \text{ch}(t-s)\omega(s)ds = \\ &= 1 + \frac{1}{2} t e^t + \frac{5}{4} e^t + \frac{3}{4} e^{-t} - 2 + \int_0^t \text{ch}(t-s)\omega(s)ds = -1 + \frac{1}{2} t e^t + \frac{5}{4} e^t + \frac{3}{4} e^{-t} + \int_0^t \text{ch}(t-s)\omega(s)ds, \end{aligned}$$

нетрудно видеть, что решение удовлетворяет начальному условию $z(0) = 1$. Аналогично, для начального условия $z(0) = 2$ получаем

$$z(t) = 2 + \frac{1}{2} t e^t + \frac{5}{4} e^t + \frac{3}{4} e^{-t} - 2 + \int_0^t \text{ch}(t-s)\omega(s)ds = \frac{1}{2} t e^t + \frac{5}{4} e^t + \frac{3}{4} e^{-t} + \int_0^t \text{ch}(t-s)\omega(s)ds.$$

Окончательно решения записываем в виде:

$$z(t) = -1 + \frac{1}{2} e^t (t+1) + \frac{3}{2} \text{ch } t + \int_0^t \text{ch}(t-s)\omega(s)ds, \quad (32)$$

$$z(t) = \frac{1}{2} e^t (t+1) + \frac{3}{2} \text{ch } t + \int_0^t \text{ch}(t-s)\omega(s)ds \quad (33)$$

с начальными условиями соответственно $z(0) = 1$ и $z(0) = 2$.

Будем теперь рассматривать движения двух управляемых объектов

$$\dot{x}_i(t) = e^t + \int_0^t x_i(s)ds + u_i(s), \quad x_i(0) = 1, \quad i = 1, 2, \quad (34)$$

$$\dot{y}_i(t) = e^t + \int_0^t y_i(s) ds + v_i(s), y_i(0) = 2, i = 1, 2. \quad (35)$$

Записываем состояния систем (34), (36) в момент t аналогично (32), (33):

$$x_i(t) = -1 + \frac{1}{2}e^t(t+1) + \frac{3}{2}\text{ch } t + \int_0^t \text{ch}(t-s)u_i[s]ds, i = 1, 2, \quad (36)$$

$$y_i(t) = \frac{1}{2}e^t(t+1) + \frac{3}{2}\text{ch } t + \int_0^t \text{ch}(t-s)v_i[s]ds, i = 1, 2. \quad (37)$$

Для позиция игры в момент t_0 получаем из (36), (37):

$$x_i(\theta, t_0) = -1 + \frac{1}{2}e^\theta(\theta+1) + \frac{3}{2}\text{ch } \theta + \int_0^{t_0} \text{ch}(\theta-s)u_i[s]ds,$$

$$y_i(\theta, t_0) = \frac{1}{2}e^\theta(\theta+1) + \frac{3}{2}\text{ch } \theta + \int_0^{t_0} \text{ch}(\theta-s)v_i[s]ds,$$

а состояния систем в момент t записываем в виде:

$$x_i(\theta, t) = x_i(\theta, t_0) + \int_{t_0}^t \text{ch}(\theta-s)u_i[s]ds, \quad (38)$$

$$y_i(\theta, t) = y_i(\theta, t_0) + \int_{t_0}^t \text{ch}(\theta-s)v_i[s]ds. \quad (39)$$

Будем теперь считать, что управляющие воздействия стеснены ограничениями: их возможные значения содержатся на $[0, 1]$ или на любом другом отрезке, или на любых различных отрезках. Из элементарных соображений заключаем, что экстремальный вектор l_0 имеет постоянное направление по прямой $y = x$ в сторону возрастания x и y . В момент $t = 0$ координаты преследователя, эволюция которого описывается системой (34), имеют значения $(1, 1)$, а координаты преследуемого согласно (35) имеют значения $(2, 2)$; экстремальные управления имеют вид $(u^e_1, u^e_2) = (1, 1)$, $(v^e_1, v^e_2) = (1, 1)$. При $t = 0$ расстояние между объектами $\sqrt{2}$. Если оба игрока применяли свои экстремальные стратегии, то из (38), (39)

$$x_i(\theta, \theta) = -1 + \frac{1}{2}e^\theta(\theta+1) + \frac{3}{2}\text{ch } \theta + \text{sh } \theta, y_i(\theta, \theta) = \frac{1}{2}e^\theta(\theta+1) + \frac{3}{2}\text{ch } \theta + \text{sh } \theta,$$

таким образом, $\|x(\theta, \theta) - y(\theta, \theta)\| = \sqrt{2}$, где $\|\bullet\|$ – символ евклидовой нормы. Получаем, что расстояние между объектами не меняется и равно значению программного максимина.

При использовании ресурсов управления, не являющихся одновременно экстремальными, получаем иллюстрацию других утверждений теоремы.

Литература

1. Красовский, Н. Н. Игровые задачи о встрече движений / Н.Н. Красовский. – М.: Наука, 1970. – 420 с.
2. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. – М.: Наука, 1974. – 456 с.
3. Субботин, А.И. Оптимизация гарантии в задачах управления / А.И. Субботин, А.Г. Ченцов – М.: Наука, 1981. – 287 с.
4. Красовский, Н.Н. Управление динамической системой / Н.Н. Красовский. – М.: Наука, 1985. – 518 с.
5. Осипов, Ю.С. Дифференциальные игры систем с последствием / Ю.С. Осипов // ДАН СССР. – 1971. – Т. 196, № 4. – С. 779–782.
6. Осипов, Ю.С. Альтернатива в дифференциальной игре / Ю.С. Осипов // ДАН СССР. – 1971. – Т. 197, № 5. – С. 1023–1025.
7. Субботин, А.И. Экстремальные стратегии в дифференциальных играх с полной памятью / А.И. Субботин // ДАН СССР. – 1972. – Т. 206, № 3. – С. 211–213.

8. Субботин, А.И. Дифференциальные игры с полной памятью / А.И. Субботин // Экстремальные стратегии в позиционных дифференциальных играх. – Свердловск: ИММ УНЦ АН СССР, 1974. – Вып. 8. – С. 211–223.
9. Ландо, Ю.К. Элементы математической теории управления движением: учебное пособие / Ю.К. Ландо. – М.: Просвещение, 1984. – 88 с.
10. Цалюк, З.Б. / З.Б. Цалюк // Итоги науки и техники. Сер. Математический анализ. – М.: ВИНТИ, 1977. – Т. 15. – С. 199–266.
11. Пасиков, В.Л. Экстремальное прицеливание в игре линейных систем Вольтерра / В.Л. Пасиков // Дифференциальные уравнения. – 1986. – Т. XXII, № 5. – С. 907–909.
12. Краснов, М.Л. Интегральные уравнения: Введение в теорию: учеб. пособ. для вузов / М.Л. Краснов. – М.: Наука, 1975. – 303 с.

Поступила в редакцию 20 января 2012 г.

EXTREME STRATEGIES IN GAME-THEORY PROBLEMS FOR LINEAR INTEGRAL DIFFERENTIAL VOLTERRA SYSTEMS, I

V.L. Pasikov¹

Game situations for the systems, defined by linear integral differential Volterra equations with control actions beyond the integral are studied. To solve these problems a modification of a familiar extreme construction of academician N.N. Krasovskiy is given.

Keywords: game-theory problem, integral differential system, control action, game positions, program maximin.

References

1. Krasovskii N.N. *Igrovye zadachi o vstreche dvizhenii* (Motion game problems). Moscow: Nauka, 1970. 420 p. (in Russ.).
2. Krasovskii N.N., Subbotin A.I. *Pozitsionnye differentsial'nye igry* (Position differential games). Moscow: Nauka, 1974. 456 p. (in Russ.).
3. Subbotin A.I., Chentsov A.G. *Optimizatsiia garantii v zadachakh upravleniia* (Guarantee optimization in control problems). Moscow: Nauka, 1981. 287 p. (in Russ.).
4. Krasovskii N.N. *Upravlenie dinamicheskoi sistemoi* (Dynamic system control). – Moscow: Nauka, 1985. 518 p. (in Russ.).
5. Osipov Yu.S. *DAN SSSR*. 1971. Vol. 196, no. 4. pp. 779–782. (in Russ.).
6. Osipov Yu.S. *DAN SSSR*. 1971. Vol. 197, no. 5. pp. 1023–1025. (in Russ.).
7. Subbotin A.I. *DAN SSSR*. 1972. Vol. 206, no. 3. pp. 211–213. (in Russ.).
8. Subbotin A.I. *Ekstremal'nye strategii v pozitsionnykh differentsial'nykh igrakh*. Sverdlovsk: IMM UNTs AN SSSR, 1974. Issuc 8. pp. 211–223. (in Russ.).
9. Lando Yu.K. *Elementy matematicheskoi teorii upravleniia dvizheniem: uchebnoe posobie* (Elements of a mathematical motion control theory: study guide). Moscow: Prosveshchenie, 1984. 88 c. (in Russ.).
10. Tsaliuk Z.B. *Itogi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskii analiz*. Moscow: VINITI, 1977. Vol. 15. pp. 199–266.
11. Pasikov V.L. *Differentsial'nye uravneniia*. 1986. Vol. 22. no. 5. pp. 907–909. (in Russ.).
12. Krasnov M.L. *Integral'nye uravneniia* (Integral equations). Moscow: Nauka, 1975. 303 p. (in Russ.).

¹ Pasikov Vladimir Leonidovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor. Mathematical Analysis and Information Service, Orsk Humanist and Technological Institute (Branch of Orenburg State University)

E-mail: pasikov_lm@mail.ru

О РЕШЕНИИ ТРЕХЭЛЕМЕНТНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ СО СДВИГОМ КАРЛЕМАНА ДЛЯ АНАЛИТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ В НЕВЫРОЖДЕННОМ СЛУЧАЕ

К.М. Расулов¹

Статья посвящена разработке конструктивного алгоритма решения трехэлементной односторонней краевой задачи со сдвигом Карлемана в классах аналитических функций в единичном круге в случае, когда рассматриваемая задача не вырождается в двухэлементную краевую задачу без сдвига.

Ключевые слова: трехэлементная краевая задача, аналитическая функция, сдвиг Карлемана, интегральное уравнение.

1. Постановка задачи. Пусть T^+ – конечная, односвязная область на плоскости комплексного переменного $z = x + iy$, ограниченная простым замкнутым контуром Ляпунова L .

Обозначим через $A(T^+) \cap H(L)$ класс аналитических в области T^+ функций $F(z)$, непрерывно (в смысле Гельдера) продолжающихся на контур L .

Рассмотрим следующую краевую задачу. Требуется найти все аналитические в области T^+ функции $F(z) = U(x, y) + iV(x, y)$ класса $A(T^+) \cap H(L)$, удовлетворяющие на L условию

$$F^+[\alpha(t)] = A(t)F^+(t) + B(t)\overline{F^+(t)} + h(t), \quad (1)$$

где $A(t), B(t), h(t)$ – заданные на L функции класса $H(L)$ (Гельдера), $\alpha(t)$ – прямой или обратный сдвиг контура L , удовлетворяющий условию Карлемана

$$\alpha[\alpha(t)] = t, \quad (2)$$

причем $\alpha'(t) \neq 0$ и $\alpha'(t) \in H(L)$.

Сформулированную задачу (1), (2) будем называть *трехэлементной односторонней задачей Карлемана* или, короче, *задачей K_3* , а соответствующую однородную задачу ($h(t) \equiv 0$) – *задачей K_3^0* .

В монографии Г.С. Литвинчука [1, с. 294–318] построена теория Нетера для задачи K_3 при различных предположениях относительно коэффициентов $A(t), B(t), H(t)$ и функции сдвига $\alpha(t)$. В частности, в [1] установлено, что краевое условие (1) задачи K_3 легко приводится к виду

$$A_1(t)F^+(t) = B_1(t)\overline{F^+(t)} + h_1(t), \quad (3)$$

где

$$A_1(t) = 1 - A(t) \cdot A[\alpha(t)] - \overline{B(t)} \cdot B[\alpha(t)], \quad (4)$$

$$B_1(t) = A[\alpha(t)] \cdot B(t) + \overline{A(t)} \cdot B[\alpha(t)], \quad (5)$$

$$h_1(t) = A[\alpha(t)] \cdot h(t) + B[\alpha(t)] \cdot \overline{h(t)} + h[\alpha(t)]. \quad (6)$$

Следовательно, если на контуре L выполняются условия

$$A_1(t) \neq 0, \quad B_1(t) \neq 0, \quad h_1(t) \neq 0, \quad (7)$$

то задача K_3 «вырождается» в хорошо исследованную *двухэлементную краевую задачу* вида (3). Поэтому в случае выполнения условий (7) (мы в дальнейшем называем этот случай *вырожденным*), используя известные методы решения *двухэлементных* краевых задач вида (3) (см., например, [1, 3, 4]), устанавливаются конструктивные методы решения и исходной задачи K_3 .

¹ Расулов Карим Магомедович – профессор, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой математического анализа, физико-математический факультет, Смоленский государственный университет.
E-mail: kahrmanr@yandex.ru

Предположим теперь, что на контуре L выполняются тождества $A_1(t) \equiv 0$, $B_1(t) \equiv 0$, $h_1(t) \equiv 0$, которые с учетом обозначений (4)–(6) можно переписать в следующей «развернутой» форме:

$$A(t) \cdot A[\alpha(t)] + \overline{B(t)} \cdot B[\alpha(t)] \equiv 1, \quad (8)$$

$$A[\alpha(t)] \cdot B(t) + \overline{A(t)} \cdot B[\alpha(t)] \equiv 0, \quad (9)$$

$$A[\alpha(t)] \cdot h(t) + B[\alpha(t)] \cdot \overline{h(t)} + h[\alpha(t)] \equiv 0. \quad (10)$$

Известно (см., например, [1, с. 296]), что из условий (8) и (9) следует, что коэффициенты $A(t)$ и $B(t)$ всюду на контуре L удовлетворяют одному из следующих неравенств:

$$|A(t)| > |B(t)| \quad \text{или} \quad |A(t)| < |B(t)|. \quad (11)$$

Общий метод решения задачи K_3 в невырожденном случае (т.е. при выполнении условий (8)–(10)) до сих пор не был получен. Поэтому основной целью настоящей заметки является разработка *общего конструктивного метода решения задачи K_3 в невырожденном случае* лишь при выполнении одного из условий: либо $A(t) \neq 0$, либо $B(t) \neq 0$. В некоторых частных случаях идея этого метода была анонсирована в работах автора [7, 8].

Всюду в дальнейшем для определенности будем предполагать, что $L = \{t: |t| = 1\}$ и $T^+ = \{z: |z| < 1\}$, так как общий случай с помощью конформного отображения всегда можно привести к этому. Кроме того, обозначим через T^- дополнение замкнутого круга $\overline{T^+} = \{z: |z| \leq 1\}$ до полной комплексной плоскости.

2. Метод решения невырожденной задачи K_3 в случае прямого сдвига и $B(t) \neq 0$. Пусть $\alpha(t)$ – *прямой* сдвиг контура L , выполняются условия (8)–(10) и $B(t) \neq 0$. При указанных предположениях, краевое условие (1) можно переписать в следующем виде

$$F^+[\alpha(t)] = B(t)F^+(t) + g(t), \quad (12)$$

где

$$g(t) = h(t) + A(t)F^+(t).$$

Если временно предположить, что $g(t)$ – известная функция, то равенство (12) представляет собой краевое условие *двухэлементной задачи типа Карлемана*, теория которой изложена, например, в монографии [1, §14].

Известно (см. например, [1, с. 172]), что при исследовании и решении двухэлементной задачи (12) представляет интерес следующие три случая:

а) $B[\alpha(t)] \cdot \overline{B(t)} - 1 \equiv 0$;

б) $B[\alpha(t)] \cdot \overline{B(t)} - 1 \neq 0$, $t \in L$;

в) когда $B[\alpha(t)] \cdot \overline{B(t)} - 1$ обращается в нуль в отдельных точках контура L (как, например, в случае $\alpha(t) = -t$, $A(t) = i\sqrt{2} \cdot \left(t - \frac{1}{t}\right)$, $B(t) = 2 - \frac{1}{t^2}$ и $h(t) = \frac{1}{t^3} - \frac{2}{t} + i\sqrt{2} - t - i\sqrt{2} \cdot t^2$).

2.1. О решении задачи K_3 в случае $B[\alpha(t)] \cdot \overline{B(t)} - 1 \equiv 0$. Очевидно, что при выполнении условия (8) из тождества $B[\alpha(t)] \cdot \overline{B(t)} - 1 \equiv 0$ вытекает $A(t) \equiv 0$. Следовательно, в случае $B[\alpha(t)] \cdot \overline{B(t)} - 1 \equiv 0$ исходная задача K_3 равносильна хорошо изученной (см., например, [1, §14]) двухэлементной краевой задаче типа Карлемана вида

$$F^+[\alpha(t)] = B(t)F^+(t) + h(t). \quad (13)$$

2.2. Метод «интегральных ловушек» для решения задачи K_3 в случае $B[\alpha(t)] \cdot \overline{B(t)} - 1 \neq 0$, $t \in L$. В этом случае в силу (8) имеем $A(t) \neq 0$ всюду на L , т.е. во всех точках контура L имеет место одно из следующих соотношений:

$$|A(t)| > |B(t)| > 0 \quad (14)$$

или

$$|B(t)| > |A(t)| > 0. \quad (15)$$

Прежде чем построить общий конструктивный алгоритм решения задачи K_3 (при выполнении любого из неравенств (14) или (15)), заметим (см. также [1, с. 298]) одно важное в дальнейших рассуждениях и очевидное

Утверждение 1. Все решения краевой задачи K_3 можно получить, если решить краевую задачу

$$\Phi^+[\alpha(t)] = A(t)F^+(t) + \overline{B(t)F^+(t)} + h(t), \quad t \in L, \quad (16)$$

для двух неизвестных аналитических функций $F^+(z)$ и $\Phi^+(z)$ из класса $A(T^+) \cap H(L)$, а затем потребовать, чтобы $F^+(z) \equiv \Phi^+(z)$, $z \in T^+ \cup L$.

Следуя [1], в дальнейшем краевую задачу (16) для пары аналитических функций $F^+(z)$ и $\Phi^+(z)$ назовем *вспомогательной*, и обозначим для краткости символом GK_3 , а соответствующую ей *однородную задачу* ($h(t) \equiv 0$) – GK_3^0 .

Важно отметить, что основное «родство» между задачами K_3 и GK_3 определяется следующими двумя леммами.

Лемма 1. Если для коэффициентов $A(t), B(t)$ выполняются условия (8), (9) и хотя бы одно из неравенств (14) или (15), то для любых комплексных функций $F^+(t)$ и $\Phi^+(t)$, определенных на L , и любого $\alpha(t)$, удовлетворяющего условию (2), равенства

$$\Phi^+[\alpha(t)] = A(t)F^+(t) + \overline{B(t)F^+(t)}, \quad t \in L \quad (17)$$

и

$$F^+[\alpha(t)] = A(t)\Phi^+(t) + \overline{B(t)\Phi^+(t)}, \quad t \in L \quad (18)$$

равносильны, т.е. $(17) \Leftrightarrow (18)$.

Доказательство. Предположим, что для пары функций $(\Phi^+(t), F^+(t))$ имеет место равенство (17). Тогда, с учетом (2), из (17) будем иметь:

$$\begin{aligned} \Phi^+(t) &= A[\alpha(t)]F^+[\alpha(t)] + \overline{B[\alpha(t)]F^+[\alpha(t)]}, \quad t \in L, \\ A(t)\Phi^+(t) &= A(t)A[\alpha(t)]F^+[\alpha(t)] + \overline{A(t)B[\alpha(t)]F^+[\alpha(t)]}, \quad t \in L, \\ B(t)\Phi^+(t) &= B(t)\overline{A[\alpha(t)]F^+[\alpha(t)]} + \overline{B(t)B[\alpha(t)]F^+[\alpha(t)]}, \quad t \in L. \end{aligned}$$

Складывая последние два равенства, в силу соотношений (8) и (9) получаем равенство (18), т.е. $(17) \Rightarrow (18)$. Совершенно аналогичными рассуждениями устанавливается $(18) \Rightarrow (17)$. Лемма доказана.

Из леммы 1 вытекает (см. также [1, с. 298]) важное

Следствие 1. Если пара $(\Phi^+(z), F^+(z))$ аналитических в круге T^+ функций образует решение однородной задачи GK_3^0 , то и пары вида $(F^+(z), \Phi^+(z))$, $\left(\frac{F^+(z) + \Phi^+(z)}{2}, \frac{F^+(z) + \Phi^+(z)}{2} \right)$, $\left(\frac{F^+(z) - \Phi^+(z)}{2i}, \frac{F^+(z) - \Phi^+(z)}{2i} \right)$ также образуют решения этой задачи.

На основании леммы 1 и следствия 1 Г.С. Литвинчуку [1, с. 300] удалось установить следующее важное утверждение.

Лемма 2. При выполнении условий (8), (9) и $B(t) \neq 0$ общее решение однородной краевой задачи K_3^0 содержит в два раза меньше произвольных действительных постоянных, чем общее решение однородной вспомогательной задачи GK_3^0 . Фундаментальные системы решений одно-

родных задач K_3^0 и GK_3^0 всегда можно выбрать одинаковыми; тогда общее решение задачи K_3^0 или GK_3^0 выражается формулой

$$(F^+(z), \Phi^+(z)) = \sum_{k=1}^l (c_k F_k^+(z), \overline{c_k} F_k^+(z)), \quad (19)$$

где c_k ($k=1, 2, \dots, l$) – соответственно действительные или комплексные произвольные постоянные.

Точно так же, как лемма 1, устанавливается

Лемма 3. Если для коэффициентов $A(t), B(t), h(t)$ выполняются условия (8)–(10) и хотя бы одно из неравенств (14) или (15), то для любых комплексных функций $F^+(t)$ и $\Phi^+(t)$, определенных на L , и любого $\alpha(t)$, удовлетворяющего условию (2), равенства

$$\Phi^+[\alpha(t)] = A(t)F^+(t) + B(t)\overline{F^+(t)} + h(t), \quad t \in L \quad (20)$$

и

$$F^+[\alpha(t)] = A(t)\Phi^+(t) + B(t)\overline{\Phi^+(t)} + h(t), \quad t \in L \quad (21)$$

равносильны, т.е. (20) $\Leftrightarrow$ (21).

Из леммы 3 вытекает полезное в дальнейшем

Следствие 2. Если пара $(\Phi^+(z), F^+(z))$ аналитических в круге T^+ функций образует решение неоднородной задачи GK_3 , то и пара вида $(F^+(z), \Phi^+(z))$ также образует решения этой задачи.

Общая идея предлагаемого ниже метода решения задачи K_3 состоит в следующем. Сначала строится интегральное уравнение типа Фредгольма («первая интегральная ловушка»), позволяющее среди всех аналитических функций класса $A(T^+) \cap H(L)$ выделить («выловить») те, которые являются решениями вспомогательной задачи GK_3 . Затем строится второе интегральное уравнение типа Фредгольма («вторая интегральная ловушка»), позволяющее выделить («выловить») среди решений первого интегрального уравнения лишь те, которые являются граничными значениями решений исходной задачи K_3 .

Переходим теперь к построению основного алгоритма решения задачи K_3 в рассматриваемом случае.

Так как в рассматриваемом случае $A(t) \neq 0$ и $B(t) \neq 0$ на L , то краевое условие (16) задачи GK_3 можно переписать в виде

$$F^+(t) = G(t)\overline{F^+(t)} + G_1(t)\Phi^+[\alpha(t)] + h_1(t), \quad (22)$$

где

$$G(t) = -\frac{B(t)}{A(t)}, \quad G_1(t) = \frac{1}{A(t)}, \quad h_1(t) = -\frac{h(t)}{A(t)}. \quad (23)$$

Предположим, что задача GK_3 разрешима и пара аналитических функций $(F^+(z), \Phi^+(z))$ класса $A(T^+) \cap H(L)$ образует некоторое ее решение. Далее выясним, каким образом можно восстановить значения аналитической в круге T^+ функции $F^+(z)$, если известны граничные значения функции $\Phi^+(z)$. Для этого введем в рассмотрение вспомогательную аналитическую в области T^- функцию

$$F^-(z) = \overline{F^+ \left(\frac{1}{z} \right)}, \quad z \in T^-, \quad (24)$$

граничные значения которой во всех точках окружности $L = \{t: |t|=1\}$ удовлетворяют условию «симметрии» (см., например, [3, с. 97]):

$$F^-(t) = F^+(t), \quad t \in L. \quad (25)$$

С учетом (25) краевое условие (22) можно переписать так:

$$F^+(t) = G(t)F^-(t) + g(t), \quad (26)$$

где

$$g(t) = G_1(t)\Phi^+[\alpha(t)] + h_1(t). \quad (27)$$

Очевидно, что для любой функции $\Phi^+(z)$ из $A(T^+) \cap H(L)$ функция $g(t) = G_1(t)\Phi^+[\alpha(t)] + h_1(t)$ будет принадлежать классу Гельдера $H(L)$. Следовательно, если временно предположим, что $g(t)$ – известная функция, то равенство (26) представляет собой обычную скалярную задачу Римана («задачу сопряжения») относительно кусочно-аналитической функции $F(z) = \{F^+(z), F^-(z)\}$ (см., например, [3, с. 106]).

Пусть $\chi = \text{Ind } G(t) = \chi_2 - \chi_1$, где $\chi_1 = \text{Ind } A(t)$ и $\chi_2 = \text{Ind } B(t)$. Тогда, как известно (см., например, [3, с. 111]), при $\chi \geq 0$ (т.е. $\chi_2 \geq \chi_1$) задача Римана (26) безусловно разрешима и ее общее решение задается формулами:

$$F^+(z) = \frac{X^+(z)}{2\pi i} \int_L \frac{G_1(\tau)\Phi^+[\alpha(\tau)] + h_1(\tau)}{X^+(\tau)} \frac{d\tau}{\tau - z} + X^+(z)P_\chi(z), \quad z \in T^+, \quad (28)$$

$$F^-(z) = \frac{X^-(z)}{2\pi i} \int_L \frac{G_1(\tau)\Phi^+[\alpha(\tau)] + h_1(\tau)}{X^+(\tau)} \frac{d\tau}{\tau - z} + X^-(z)P_\chi(z), \quad z \in T^-, \quad (29)$$

где $X^\pm(z)$ – канонические функции задачи Римана (26), а $P_\chi(z) = \sum_{k=0}^{\chi} C_k z^k$ – произвольный многочлен степени не выше χ .

Если же $\chi = \text{Ind } G(t) < 0$, то при выполнении $-\chi - 1$ условий вида

$$\int_L \frac{G_1(t)\Phi^+[\alpha(t)]}{X^+(t)} t^{k-1} dt = - \int_L \frac{h_1(t)}{X^+(t)} t^{k-1} dt, \quad k = 1, 2, \dots, -\chi - 1 \quad (30)$$

единственное решение задачи Римана (26) задается формулами (28) и (29), где нужно положить $P_\chi(z) \equiv 0$.

Из формул (28) и (30) с учетом леммы 3 вытекает справедливость следующего утверждения.

Лемма 4. Пусть для коэффициентов $A(t), B(t)$, $h(t)$ выполняются условия (8)–(10) и хотя бы одно из неравенств (14) или (15). Тогда в случае $\chi = \text{Ind } G(t) \geq 0$ для любого решения $(F^+(z), \Phi^+(z))$ задачи GK_3 значения аналитической функции $F^+(z)$, $z \in T^+$ выражаются через граничные значения $\Phi^+[\alpha(t)]$ функции $\Phi^+(z)$ по формуле (28). Если же $\chi = \text{Ind } G(t) < 0$, то для любого решения $(F^+(z), \Phi^+(z))$ задачи GK_3 такого, что функция $\Phi^+[\alpha(t)]$ удовлетворяет $-\chi - 1$ условиям вида (30), значения аналитической функции $F^+(z)$, $z \in T^+$, выражаются через граничные значения $\Phi^+[\alpha(t)]$ функции $\Phi^+(z)$ по формуле (28), где нужно положить $P_\chi(z) \equiv 0$.

Поскольку $\alpha(t)$ – прямой сдвиг контура L , причем $\alpha'(t) \in H(L)$, то для любой функции $\Phi^+(z) \in A(T^+) \cap H(L)$ справедливы равенства (см., например, [3, с. 40]):

$$\frac{1}{2}\Phi^+(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{\Phi^+(\tau)d\tau}{\tau - t}, \quad \frac{1}{2}\Phi^+[\alpha(t)] = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{\Phi^+[\alpha(\tau)]\alpha'(\tau)}{\alpha(\tau) - \alpha(t)} d\tau. \quad (31)$$

Теперь с учетом равенств (31) и формул Сохоцкого (см., например, [5, с. 38]), из формул (28) и (29) находим предельные значения $F^+(z)$ и $F^-(z)$ при $z \rightarrow t \in L$:

$$F^+(t) = \frac{1}{A(t)} \varphi(t) + \int_L K^+(t, \tau) \varphi(\tau) d\tau + q^+(t), \quad t \in L, \quad (32)$$

$$F^-(t) = \int_L K^-(t, \tau) \varphi(\tau) d\tau + q^-(t), \quad t \in L, \quad (33)$$

где $\varphi(t) = \Phi^+[\alpha(t)]$, $K^+(t, \tau) = X^+(t)K(t, \tau)$, $K^-(t, \tau) = X^-(t)K(t, \tau)$,

$$K(t, \tau) = \frac{1}{2\pi i} \left(\frac{1}{A(\tau)X^+(\tau)} \frac{1}{\tau - t} - \frac{1}{A(t)X^+(t)} \frac{\alpha'(\tau)}{\alpha(\tau) - \alpha(t)} \right), \quad (34)$$

$$q^+(t) = \frac{1}{2} h_1(t) + \frac{X^+(t)}{2\pi i} \int_L \frac{h_1(\tau)}{X^+(\tau)} \frac{d\tau}{\tau - t} + X^+(t) P_\chi(t), \quad (35)$$

$$q^-(t) = -\frac{1}{2} \frac{X^-(t)}{X^+(t)} h_1(t) + \frac{X^-(t)}{2\pi i} \int_L \frac{h_1(\tau)}{X^+(\tau)} \frac{d\tau}{\tau - t} + X^-(t) P_\chi(t), \quad (36)$$

причем в формулах (35)–(36) в случае $\chi < 0$ нужно положить $P_\chi(t) \equiv 0$.

Нетрудно проверить [5, 6], что при сделанных в условии задачи K_3 предположениях относительно функции сдвига $\alpha(t)$ и коэффициентов $A(t)$, $B(t)$, $h(t)$ красного условия (1) ядра $K^+(t, \tau)$ и $K^-(t, \tau)$ будут фредгольмовыми, т.е. $K^+(t, \tau)$, $K^-(t, \tau) \in H_*(L \times L)$ (определение класса $H_*(L \times L)$ см., например, в [2, с. 7]), а функции $q^+(t)$, $q^-(t) \in H(L)$.

Далее среди функций $F^+(t)$ и $F^-(L)$, задаваемых формулами (32) и (33), «отбираем» те, которые удовлетворяют условию «симметрии» (25). В силу формул (32) и (33) равенство (25) можно записать в виде следующего интегрального уравнения типа Фредгольма относительно функции $\varphi(t)$:

$$(N\varphi)(t) \equiv \varphi(t) + \int_L n_1(t, \tau) \varphi(\tau) d\tau + \int_L \overline{n_2(t, \tau) \varphi(\tau)} d\tau = q(t), \quad (37)$$

где $q(t) = A(t)[\overline{q^-(t)} - q^+(t)]$, $n_1(t, \tau) = A(t)K^+(t, \tau)$, $n_2(t, \tau) = -\overline{A(t)K^+(t, \tau)}$.

Вывод уравнения (37) (с учетом следствия 2) является одновременно доказательством следующего утверждения.

Лемма 5. Если $(F^+(z), \Phi^+(z))$ – решение вспомогательной задачи GK_3 , то граничные значения $\Phi^+[\alpha(t)]$ и $F^+[\alpha(t)]$ представляют собой решения интегрального уравнения типа Фредгольма (37).

Замечание 1. Здесь важно отметить, что теория разрешимости интегральных уравнений вида (37) хорошо известна (см., например, [4, с. 364]).

Введем в рассмотрение однородное интегральное уравнение, союзное с уравнением (37) (см. также [4, с. 365]):

$$(N'\mu)(t) \equiv \mu(t) + \int_L n_1(\tau, t) \mu(\tau) d\tau + \int_L \overline{n_2(\tau, t) \mu(\tau)} d\tau = 0. \quad (38)$$

Как известно (см., [4, с. 370]), для разрешимости неоднородного интегрального уравнения (37) необходимо и достаточно выполнение следующих условий:

$$\operatorname{Re} \int_L q(t) \mu_j(t) dt = 0, \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad (39)$$

где $\mu_1(t), \mu_2(t), \dots, \mu_m(t)$ – полная система линейно независимых (над полем $\mathbb{R}$) решений однородного уравнения (38).

Замечание 2. Отметим, что если $\chi \geq 0$, то некоторые из условий разрешимости (39) можно удовлетворить за счет определенного выбора значений произвольных постоянных, входящих в выражение $q(t)$.

Предположим, что интегральное уравнение (37) разрешимо (т.е. выполняются условия (39)) и уже найдено его общее решение (см., например, [4, с. 372]):

$$\varphi(t) = q(t) + \int_L \gamma_1(t, \tau) q(\tau) d\tau + \int_L \gamma_2(t, \tau) q(\tau) d\tau + \sum_{k=1}^m \lambda_k \varphi_{k0}(t), \quad (40)$$

где $\gamma_1(t, \tau)$ и $\gamma_2(t, \tau)$ – обобщенные резольвенты уравнения (37), а $\sum_{k=1}^m \lambda_k \varphi_{k0}(t)$ – общее решение соответствующего однородного уравнения $(N\varphi)(t) = 0$ (т.е. здесь $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ – произвольные действительные постоянные).

Пусть $\hat{\varphi}_j(t) = \hat{\Phi}_j^+[\alpha(t)]$ ($j = 1, 2, \dots, n$), где $n \leq m$ – те из функций вида (40), для которых $\hat{\varphi}_j[\alpha(t)] = \hat{\Phi}_j^+(t) \in H^+(L)$, т.е. $\hat{\Phi}_j^+(t)$ – граничные значения аналитических функций класса $A(T^+) \cap H(L)$. Тогда в силу леммы 4 пары $(\hat{F}_j^+(z), \hat{\Phi}_j^+(z))$, где

$$\hat{F}_j^+(z) = \frac{X^+(z)}{2\pi i} \int_L \frac{G_1(\tau) \hat{\varphi}_j(\tau) + h_1(\tau)}{X^+(\tau)} \frac{d\tau}{\tau - z} + X^+(z) P_\chi(z), \quad z \in T^+, \quad (41)$$

$$\hat{\Phi}_j^+(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{\hat{\varphi}_j[\alpha(\tau)]}{\tau - z} d\tau, \quad z \in T^+, \quad (42)$$

образуют решения вспомогательной задачи GK_3 . При этом в случае $\chi = \text{Ind} G(t) < 0$ в формуле (41) нужно положить $P_\chi(z) \equiv 0$, причем функция $\hat{\varphi}(t) = \hat{\Phi}^+[\alpha(t)]$ должна удовлетворять еще и $-\chi - 1$ условиям вида (30).

Предположим теперь, что $(\tilde{F}^+(z), \tilde{\Phi}^+(z))$ – общее решение вспомогательной краевой задачи GK_3 . Для того чтобы выделить («выловить») среди решений $(\tilde{F}^+(z), \tilde{\Phi}^+(z))$ задачи GK_3 функции $F^+(z)$, являющиеся решениями исходной задачи K_3 , нужно потребовать, чтобы $\tilde{F}^+(z) \equiv \tilde{\Phi}^+(z)$, $z \in T^+$, или $\tilde{F}^+(t) = \tilde{\Phi}^+(t) = \tilde{\varphi}[\alpha(t)]$, $t \in L$. Но в силу (32) последнее равенство равносильно тому, что функции вида $\tilde{F}^+(t) = \tilde{\varphi}[\alpha(t)]$ должны быть решениями интегрального уравнения

$$\tilde{\varphi}[\alpha(t)] = \frac{1}{A(t)} \tilde{\varphi}(t) + \int_L K^+(t, \tau) \tilde{\varphi}(\tau) d\tau + q^+(t), \quad t \in L. \quad (43)$$

С учетом (2), (8) и $B(t) \neq 0$ уравнение (43) легко приводится к следующему равносильному ему уравнению Фредгольма второго рода

$$(M\varphi)(t) \equiv \tilde{\varphi}(t) + \int_L M(t, \tau) \tilde{\varphi}(\tau) d\tau = \omega(t), \quad t \in L, \quad (44)$$

где

$$M(t, \tau) = \frac{A(t)}{B(t)B[\alpha(t)]} \{K^+(t, \tau) + A[\alpha(t)]K^+[\alpha(t), \tau]\}, \quad \omega(t) = -\frac{A(t)}{B(t)B[\alpha(t)]} \{q^+(t) + A[\alpha(t)]q^+[\alpha(t)]\}.$$

Действительно, перепишем сначала (43) в виде

$$A(t)\tilde{\varphi}[\alpha(t)] = \tilde{\varphi}(t) + \int_L A(t)K^+(t, \tau)\tilde{\varphi}(\tau) d\tau + A(t)q^+(t). \quad (45)$$

С другой стороны, в силу (2) из уравнения (45) будем иметь

$$-\tilde{\varphi}[\alpha(t)] = -A[\alpha(t)]\tilde{\varphi}(t) + \int_L A[\alpha(t)]K^+[\alpha(t), \tau]\tilde{\varphi}(\tau) d\tau + A[\alpha(t)]q^+[\alpha(t)]. \quad (46)$$

Наконец, умножив обе части (46) на $A(t)$ и почленно складывая полученное уравнение с уравнением (45) в силу тождества (8) получим уравнение (44).

Вывод уравнения (44) является одновременно доказательством следующего утверждения.

Лемма 6. Если функция $F^+(z)$ – решение задачи K_3 , то ее граничные значения $F^+(t) = \varphi[\alpha(t)]$, $t \in L$, представляют собой решение интегрального уравнения Фредгольма (43) (или, что то же самое, (44)).

На основании лемм 5 и 6 нетрудно установить следующее важное утверждение.

Теорема 1. Если $\chi = \text{Ind} G(t) \geq 0$, то для того чтобы функция $F^+(z)$ класса $A(T^+) \cap H(L)$ было решением краевой задачи K_3 , необходимо и достаточно, чтобы ее граничные значения $F^+(t) = \varphi[\alpha(t)]$, $t \in L$ удовлетворяли системе интегральных уравнений типа Фредгольма, составленной из (37) и (44), т.е. системе

$$\begin{cases} (N\varphi)(t) \equiv \varphi(t) + \int_L n_1(t, \tau) \varphi(\tau) d\tau + \int_I \overline{n_2(t, \tau) \varphi(\tau)} d\tau = q(t), \\ (M\varphi)(t) \equiv \varphi(t) + \int_L M(t, \tau) \varphi(\tau) d\tau = \alpha(t). \end{cases} \quad (47)$$

Если же $\chi = \text{Ind} G(t) < 0$, то для того чтобы функция $F^+(z)$ класса $A(T^+) \cap H(L)$ было решением краевой задачи K_3 , необходимо и достаточно, чтобы ее граничные значения $F^+[\alpha(t)] = \varphi(t)$, $t \in L$ удовлетворяли системе интегральных уравнений (47), где нужно положить $P_\chi(t) \equiv 0$, и кроме того функция $F^+[\alpha(t)] = \varphi(t)$ должна удовлетворять $-\chi - 1$ условиям вида

$$\int_I \frac{G_1(t) \varphi(t)}{X^+(t)} t^{k-1} dt = - \int_L \frac{h_1(t)}{X^+(t)} t^{k-1} dt, \quad k = 1, 2, \dots, -\chi - 1. \quad (48)$$

Доказательство. Необходимость вытекает из утверждений лемм 5 и 6. Установим далее достаточность.

Пусть $\chi = \text{Ind} G(t) \geq 0$ и предположим, что граничные значения $F^+(t) = \varphi[\alpha(t)]$, $t \in L$ некоторой функции $F^+(z)$ класса $A(T^+) \cap H(L)$ удовлетворяют системе интегральных уравнений (47). Покажем, что тогда $F^+(z)$ – решение задачи K_3 .

Действительно поскольку второе уравнение из системы (47) равносильно уравнению (43), то будем иметь:

$$F^+(t) = \frac{1}{A(t)} F^+[\alpha(t)] + \int_L K^+(t, \tau) F^+[\alpha(\tau)] d\tau + q^+(t), \quad t \in L. \quad (49)$$

Но равенство (49), в силу соотношений (см., например, [3, с. 40])

$$\frac{1}{2} F^+(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{F^+(\tau) d\tau}{\tau - t}, \quad \frac{1}{2} F^+[\alpha(t)] = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{F^+[\alpha(\tau)] \alpha'(\tau) d\tau}{\alpha(\tau) - \alpha(t)}, \quad t \in L \quad (50)$$

и формулы (28), где в правой части вместо $\Phi^+[\alpha(t)]$ положено $F^+[\alpha(t)]$, равносильно следующему:

$$\frac{F^+(t)}{X^+(t)} = \frac{1}{2} \frac{F^+[\alpha(t)]}{A(t)X^+(t)} + \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{F^+[\alpha(\tau)]}{A(\tau)X^+(\tau)} \frac{d\tau}{\tau - t} + \frac{q^+(t)}{X^+(t)}, \quad t \in L. \quad (51)$$

С другой стороны, так как функция $F^+(t) = \varphi[\alpha(t)]$ удовлетворяет первому интегральному уравнению из системы (47), то это равносильно тому, что для аналитической функции $F^-(z)$ класса $A(T^-) \cap H(L)$, задаваемой формулой

$$F^-(z) = \frac{X^-(z)}{2\pi i} \int_I \frac{G_1(\tau) F^+[\alpha(\tau)] + h_1(\tau)}{X^+(\tau)} \frac{d\tau}{\tau - z} + X^-(z) P_\chi(z), \quad z \in T^-, \quad (52)$$

справедливо равенство (25). Но в силу формул Сохоцкого (см., например, [5, с. 38]) из (52) имеем:

$$\frac{F^-(t)}{X^-(t)} = -\frac{1}{2} \frac{F^+[\alpha(t)]}{A(t)X^+(t)} + \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{F^+[\alpha(\tau)]}{A(\tau)X^+(\tau)} \frac{d\tau}{\tau - t} + \frac{q^-(t)}{X^-(t)}, \quad t \in L. \quad (53)$$

Вычитая из (51) равенство (53) с учетом формул (35) и (36), получаем

$$\frac{F^+(t)}{X^+(t)} - \frac{F^-(t)}{X^-(t)} = \frac{F^+[\alpha(t)]}{A(t)X^+(t)} + \frac{h_1(t)}{X^+(t)}, \quad t \in L. \quad (54)$$

Наконец, с учетом равенства (25) и $G(t) = \frac{X^+(t)}{X^-(t)}$, умножив обе части равенства (54) на $X^+(t)$,

будем иметь:

$$F^+(t) = G(t)F^+(t) + G_1(t)F^+[\alpha(t)] + h_1(t), \quad t \in L. \quad (55)$$

Но последнее равенство означает, что функция $F^+(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{F^+(\tau)}{t-z} d\tau$, $z \in T^+$, является решением задачи K_3 .

Пусть теперь $\chi = \text{Ind} G(t) < 0$ и предположим, что граничные значения $F^+(t) = \varphi[\alpha(t)]$, $t \in L$ некоторой функции $F^+(z)$ класса $A(T^+) \cap H(L)$ удовлетворяют системе интегральных уравнений (47) и $-\chi - 1$ условиям вида (48). Тогда, рассуждая точно так же, как и в предыдущем случае, можно убедиться, что $F^+(z)$ удовлетворяет красовому условию (55), т.е. $F^+(z)$ – решение задачи K_3 . Теорема полностью доказана.

Итак, для решения задачи K_3 в рассматриваемом случае можно использовать следующий алгоритм:

1. Находим индекс $\chi = \text{Ind} G(t)$, канонические функции $X^+(z)$, $X^-(z)$ задачи Римана (26) и по формулам (34)–(36) функции $K^+(t, \tau)$, $K^-(t, \tau)$, $q^+(t)$, $q^-(t)$. Затем переходим к пункту 2.

2. Составляем интегральное уравнение типа Фредгольма (37). Решая его (в случае его разрешимости), находим все его решения $\varphi(t)$ и переходим к пункту 3. Если же интегральное уравнение (37) неразрешимо, то в силу леммы 5 неразрешима и задача K_3 .

3. Если $\chi = \text{Ind} G(t) \geq 0$, то среди решений $\varphi(t)$ интегрального уравнения (37) выбираем только те $\tilde{\varphi}(t)$, которые удовлетворяют и уравнению (44) (т.е. находим решения системы уравнений (47)), а затем переходим к пункту 4. Если же $\chi = \text{Ind} G(t) < 0$, то сначала среди решений $\varphi(t)$ интегрального уравнения (37) выбираем только те, для которых выполняются условия (29), а затем, из выбранных таким образом решений интегрального уравнения (37) отбираем те $\tilde{\varphi}(t)$, которые являются также решениями интегрального уравнения (44) (т.е. являются решениями системы уравнений (47)), и переходим к пункту 4. В случае, когда ни одно решение $\varphi(t)$ интегрального уравнения (37) не удовлетворяет уравнению (44) (т.е. когда система (47) неразрешима), задача K_3 в силу леммы 6 также неразрешима.

4. Находим общее решение искомой задачи K_3 по формуле

$$F^+(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{\tilde{\varphi}(\tau)}{t-z} d\tau, \quad z \in T^+.$$

Таким образом, в данном случае получили следующий основной результат.

Теорема 2. Пусть $\alpha(t)$ – прямой сдвиг контура L , удовлетворяющий условию (2), всюду на этом контуре выполняются условия (8)–(10) и одно из неравенств (14) или (15). Тогда решение задачи K_3 сводится к решению системы интегральных уравнений типа Фредгольма (47). При этом если $\chi \geq 0$, то для разрешимости задачи K_3 необходимо и достаточно, чтобы была разрешима система интегральных уравнений (47); если же $\chi < 0$, то для разрешимости задачи K_3 необходимо и достаточно, чтобы была разрешима система интегральных уравнений (47) и для решений этой системы выполнялись $-\chi - 1$ условий вида (48).

В заключение отметим, что разработанный выше «метод интегральных ловушек» применим для решения задачи K_3 и в исключительном случае, т.е. когда выражение $B[\alpha(t)] \cdot \overline{B(t)} - 1$ обращается в нуль в отдельных точках контура L . Отличие от рассмотренного выше случая будет

лишь в том, что при построении интегрального уравнения вида (37) в исключительном случае нужно будет использовать формулы для решения задачи Римана (задачи сопряжения) для аналитических функций в исключительном случае (см., например, [3, с. 136]).

Литература

1. Литвинчук, Г.С. Краевые задачи и сингулярные интегральные уравнения со сдвигом / Г.С. Литвинчук. – М.: Наука, 1977. – 448 с.
2. Расулов, К.М. Краевые задачи для полианалитических функций и некоторые их приложения / К.М. Расулов. – Смоленск: Изд-во СГПУ, 1998. – 343 с.
3. Гахов, Ф.Д. Краевые задачи / Ф.Д. Гахов. – М.: Наука, 1977. – 640 с.
4. Мусхелишвили, Н.И. Сингулярные интегральные уравнения / Н.И. Мусхелишвили. – М.: Наука, 1968. – 511 с.
5. Расулов, К.М. Трехэлементная односторонняя краевая задача со сдвигом Карлемана в классах аналитических функций в круге / К.М. Расулов // Известия СмолГУ. – 2008. – № 2. – С. 94–104.
6. Расулов, К.М. О решении трехэлементной краевой задачи со сдвигом Карлемана в классах аналитических функций в круге / К.М. Расулов // Vesnik of Yanka Kupala State University of Grodno. Series 2. Mathematics. Physics. Informatics, Computer Technology and its Control. – 2010. – № 3(102). – С. 31–37.

Поступила в редакцию 18 апреля 2012 г.

TO THE SOLUTION OF A THREE-ELEMENT BOUNDARY VALUE PROBLEM WITH A CARLEMAN SHIFT FOR ANALYTICAL FUNCTIONS IN THE NONDEGENERATE CASE

K.M. Rasulov¹

The article considers constructive algorithm to solve a three-element one-side boundary value problem with Carleman shift in classes of analytic functions of the unit disk in case when the problem is not reducible to a two-element boundary value problem without shift.

Keywords: three-element boundary value problem, analytic functions, Carleman shift, integral equation.

References

1. Litvinchuk G.S. *Kraevye zadachi i singuliarnye integral'nye uravneniia so sdvigom* (Boundary value problems and singular integral equations with shift). Moscow: Nauka, 1977. 448 p. (in Russ.).
2. Rasulov K.M. *Kraevye zadachi dlia polianaliticheskikh funktsii i nekotorye ikh prilozheniia* (Boundary value problems for polyanalytic functions and some applications). Smolensk: Izd-vo SGPU, 1998. 343 p. (in Russ.).
3. Gakhov F.D. *Kraevye zadachi* (Boundary value problems). M.: Nauka, 1977. 640 p. (in Russ.).
4. Muskhelishvili N.I. *Singuliarnye integral'nye uravneniia* (Singular integral equations). M.: Nauka, 1968. 511 p. (in Russ.).
5. Rasulov K.M. *Izvestiia SmolGU*. 2008. no. 2. pp. 94–104. (in Russ.).
6. Rasulov K.M. *Vesnik of Yanka Kupala State University of Grodno. Series 2. Mathematics. Physics. Informatics, Computer Technology and its Control*. 2010. no 3(102). pp. 31–37. (in Russ.).

¹ Rasulov Karim Magomedovich is Dr.Sc (Physics and Mathematics), Professor, The Head of the Mathematical Analysis Department, Smolensk State University.

E-mail: kahrmanr@yandex.ru

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ВЕКТОРНЫМ ВХОДОМ КВАДРАТИЧНЫМИ ПОЛИНОМАМИ ВОЛЬТЕРРА¹

С.В. Солодуша²

Рассматриваются полиномиальные интегральные уравнения Вольтерра I рода второй степени, возникающие в задаче автоматического регулирования нелинейной динамической системы. Разработан адаптивный алгоритм учета обратной связи. Приводятся результаты тестовых расчетов для эталонной модели теплообмена.

Ключевые слова. нелинейная динамическая система, полиномиальное уравнение Вольтерра I рода, теплообмен.

Введение

В теории моделирования систем управления традиционно используется аппарат дифференциальных уравнений. Тем не менее разработка альтернативных методов моделирования, связанных с применением интегральных уравнений типа Вольтерра, является актуальной прикладной задачей (см., например, [1, 2]).

В цикле публикаций [3] (ссылка сделана на последнюю работу автора, в которой имеются ссылки на другие публикации) исследовались полиномиальные уравнения Вольтерра I рода, в том числе уравнение

$$\int_0^t K_1(t,s)x(s)ds + \int_0^t \int_0^t K_{11}(t,s_1,s_2)x(s_1)x(s_2)ds_1ds_2 = y(t), t \in [0,T], \quad (1)$$

которое возникает при аппроксимации нелинейной динамической системы типа черного ящика квадратичным полиномом Вольтерра, и ставится задача об определении входного сигнала $x(t)$, которому соответствует заданный выход $y(t)$. В (1) t имеет физический смысл времени, ядра $K_1(t,s)$, $K_{11}(t,s_1,s_2)$ идентифицированы каким-либо способом (например, с помощью методики из [4, 5]), $y(t)$ – скалярная функция времени, причем $y(0) = 0$, $y'(t) \in C_{[0,T]}$, ядро K_{11} симметрично по переменным s_1 и s_2 . В этой работе рассмотрим случай, когда $x(t)$ есть вектор-функция времени. Вместо (1) имеем:

$$\sum_{i=1}^p V_{1,i}x_i + \sum_{i=1}^p V_{2,i}x_i^2 + \sum_{i=2}^p \sum_{j=1}^{i-1} V_{2,ij}(x_i, x_j) = y(t), t \in [0,T], \quad (2)$$

$$V_{1,i}x_i \equiv \int_0^t K_i(t,s)x_i(s)ds, \quad V_{2,i}x_i^2 \equiv \int_0^t \int_0^t K_{ii}(t,s_1,s_2)x_i(s_1)x_i(s_2)ds_1ds_2,$$

$$V_{2,ij}(x_i, x_j) \equiv \int_0^t \int_0^t K_{ij}(t,s_1,s_2)x_i(s_1)x_j(s_2)ds_1ds_2, i \neq j; i, j = \overline{1, p},$$

где для определенности $x_i(t)$, $i = \overline{2, p}$, считаются заданными; ядра K_{ii} , $i = \overline{1, p}$, симметричны по переменным s_1, s_2 ; $y(0) = 0$, $y'(t) \in C_{[0,T]}$; $K_1(t,t) \neq 0 \quad \forall t \in [0,T]$.

1. О специфике полиномиальных уравнений Вольтерра I рода вида (2)

Рассмотрим задачу стабилизации (регулирования), связанную с поиском управляющего воздействия $x_1(t)$, поддерживающего выходной сигнал $y(t)$ на заданном уровне $y^* = 0$. Все функ-

¹ Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 12-01-00722

² Солодуша Светлана Витальевна – кандидат физико-математических наук, доцент, зав. лабораторией «Неустойчивые задачи вычислительной математики» Института систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН

E-mail: solodusha@isem.sci.srb.ru

циональные пространства считаем вещественными. Уравнение (2) является полиномиальным уравнением Вольтерра I рода, непрерывное решение которого, вообще говоря, носит локальный характер.

В работах [6–8] рассматривались некоторые частные классы (2). Если, например, $K_i(t, s) = k_i$, $k_i > 0$, $K_{ji}(t, s_1, s_2) = k_{ji}$, $k_{11} \neq 0$, $1 \leq j \leq i \leq p$, то (2) переходит в

$$\left[1 + \sum_{i=2}^p k_{1i} \int_0^t x_i(s) ds \right] \int_0^t x_1(s) ds + k_{11} \left(\int_0^t x_1(s) ds \right)^2 = f(t), \quad t \in [0, T], \quad (3)$$

где

$$f(t) = y(t) - \sum_{i=2}^p k_i \int_0^t x_i(s) ds - \sum_{i=2}^p \sum_{j=2}^p k_{ji} \left(\int_0^t x_j(s) ds \right) \left(\int_0^t x_i(s) ds \right). \quad (4)$$

В (3), (4) для сокращения записи принято $k_1 = 1$. В [7] показано, что если $f(t) \in C_{[0, T]}^{(1)}$, $f(0) = 0$, то единственное непрерывное решение (3), (4) определяется формулой

$$x_1(t) = \frac{f'(t)}{\alpha(t)} + \frac{1}{2k_{11}} \beta'(t) \left(\frac{1}{\alpha(t)} (1 + \beta(t)) - 1 \right), \quad (5)$$

где

$$\beta(t) = \sum_{i=2}^p k_{1i} \theta_i(t); \quad \theta_i(t) = \int_0^t x_i(s) ds, \quad i = \overline{2, p}; \quad \alpha(t) = \sqrt{(1 + \beta(t))^2 + 4k_{11} f(t)}.$$

Также в [7] на примере (3), (4) получено, что кроме единственного непрерывного решения $x_1^*(t)$ есть решение $x_1^{**}(t)$, принадлежащее пространству обобщенных функций:

$$x_1^{**}(t) = - \left(x_1^*(t) + \frac{1}{k_{11}} \delta(t) + \frac{1}{k_{11}} \sum_{i=2}^p k_{1i} x_i(t) \right),$$

где $\delta(t)$ есть δ -функция Дирака.

Для установления области существования непрерывного решения (3), (4) в [6, 8] была применена техника, основанная на введении специальных мажорантных интегральных уравнений.

Не уменьшая общности, положим $K_i(t, t) = 1$. С учетом симметрии K_{ji} по s_1, s_2 уравнение (2) эквивалентно интегральному уравнению Вольтерра II рода

$$\begin{aligned} x_1(t) \left(1 + \sum_{i=2}^p \int_0^t K_{1i}(t, s_1, t) x_i(s_1) ds_1 \right) + 2x_1(t) \int_0^t K_{11}(t, s_1, t) x_1(s_1) ds_1 + \sum_{i=2}^p x_i(t) \int_0^t K_{1i}(t, t, s_2) x_1(s_2) ds_2 + \\ + \int_0^t K'_{1i}(t, s_1) x_1(s_1) ds_1 + \sum_{i=1}^p \int_0^t \int_0^t K'_{1i}(t, s_1, s_2) x_1(s_1) x_i(s_2) ds_1 ds_2 = f'(t), \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} f'(t) = y'(t) - \sum_{i=2}^p K_i(t, t) x_i(t) - \sum_{i=2}^p \int_0^t K'_{1i}(t, s_1) x_i(s_1) ds_1 - \sum_{i=2}^p \sum_{j=2}^p x_j(t) \int_0^t K_{ji}(t, s_1, t) x_i(s_1) ds_1 - \\ - \sum_{i=2}^p \sum_{j=2}^p x_i(t) \int_0^t K_{ji}(t, t, s_2) x_j(s_2) ds_2 - \sum_{i=2}^p \sum_{j=2}^p \int_0^t \int_0^t K'_{ji}(t, s_1, s_2) x_i(s_1) x_j(s_2) ds_1 ds_2. \end{aligned}$$

Следуя [3], рассмотрим мажорантное интегральное уравнение для (2), (6)

$$\varphi(t) \left(1 - \sum_{i=2}^p M_{1i}(t) G_i(t) \right) = F(t) + 2\varphi(t) M_{11}(t) \int_0^t \varphi(s) ds + L(t) \int_0^t \varphi(s) ds + L_{11}(t) \left(\int_0^t \varphi(s) ds \right)^2, \quad (7)$$

где

$$M_{11}(t) = \max_{0 \leq s_1 \leq \xi \leq t} |K_{11}(\xi, s_1, \xi)| > 0, \quad L_{11}(t) = \max_{0 \leq s_1, s_2 \leq \xi \leq t} |K'_{11}(\xi, s_1, s_2)| \geq 0, \quad F(t) = \max_{0 \leq \xi \leq t} |f'(\xi)| > 0,$$

$$L(t) = L_1(t) + \sum_{i=2}^p L_{1i}(t)G_i(t) + \sum_{i=2}^p M_{1i}(t)g_i(t), \quad L_1(t) = \max_{0 \leq s_1 \leq \xi \leq t} |K'_{11}(\xi, s_1)| \geq 0,$$

$$L_{1i}(t) = \max_{0 \leq s_1, s_2 \leq \xi \leq t} |K'_{1i}(\xi, s_1, s_2)| \geq 0, \quad G_i(t) = \max_{0 \leq \xi \leq t} \int_0^\xi |x_i(s)| ds \geq 0, \quad g_i(t) = \max_{0 \leq \xi \leq t} |x_i(\xi)| \geq 0,$$

$$M_{1i}(t) = \max_{0 \leq s_1, s_2 \leq \xi \leq t} \{|K_{1i}(\xi, \xi, s_2)|, |K_{1i}(\xi, s_1, \xi)|\} \geq 0, \quad 2 \leq i \leq p, \quad t \in [0, T],$$

и соответствующую задачу Коши

$$\dot{\Theta}(t) = \Phi(\Theta(t)) \equiv \frac{F(t) + L(t)\Theta(t) + L_{11}(t)\Theta^2(t)}{1 - \sum_{i=2}^p M_{1i}(t)G_i(t) - 2M_{11}(t)\Theta(t)}, \quad \Theta(0) = 0, \quad t \in [0, T], \quad (8)$$

где

$$\Theta(t) = \int_0^t \varphi(s) ds.$$

Как отмечено в [3], локальная Липшиц-непрерывность отображения $\Phi(\Theta(t)): C_{[0, \bar{t}]} \rightarrow C_{[0, \bar{t}]}$ гарантирует единственность решения (8) $\Theta^*(t)$ при достаточно малом $\bar{t}$. Следовательно, (7) имеет единственное решение $\varphi^*(t) = \dot{\Theta}^*(t)$, такое что $|x_1^*(t)| \leq \varphi^*(t)$, $t \in [0, \bar{t}]$.

Для определения максимального значения $\bar{t}$ приравняем знаменатель (8) к нулю:

$$\psi(t) \equiv \sum_{i=2}^p M_{1i}(t)G_i(t) + 2M_{11}(t)\Theta(t) = 1.$$

Функция $\psi(t)$ является непрерывной строго возрастающей функцией t , причем $\psi(0) = 0$. Значит, найдется такое $t^* > 0$, что $\psi(t^*) = 1$.

2. Численный алгоритм учета обратной связи

Развивая исследование, начатое в [6], рассмотрим вопрос получения управляющего воздействия $x_1(t)$ с учетом апостериорных данных об отклонении выходной переменной $y(t)$ от желаемого значения $y^1 = 0$, так что $x_1(t) = u(t - h)$, $u(\xi) = 0$, $\xi \in [-h, 0]$, h – известное постоянное запаздывание. В этом случае задача регулирования стационарного нелинейного динамического объекта сводится к поиску непрерывного решения $u^1(t)$ полиномиального уравнения Вольтерра I рода

$$V_{1,1}u + \sum_{i=2}^p V_{2,1i}(u, x_i) + V_{2,1}u^2 = f(t) - \sum_{i=2}^p V_{1,i}x_i - \sum_{i=2}^p V_{2,i}x_i^2 - \sum_{i=2}^p \sum_{j=2}^{i-1} V_{2,ij}(x_j, x_i), \quad (9)$$

где $f(t) = \varepsilon(t) - \varepsilon(t - h)$, $t \in [0, T]$. Сигнал $\varepsilon(t) = y^1 - y(t)$, $\varepsilon(\xi) = 0$, $\xi \in [-h, 0]$, считаем рассогласованием или ошибкой управления.

При малом t решение (9) заведомо существует [3]. Найдем его кубатурным методом средних прямоугольников. Введем сетку узлов $t_i = ih$, $t_{i-2} = \left(i - \frac{1}{2}\right)h$, $i = \overline{1, n}$, $nh = T$. Аппроксимируем интегралы в (9) суммами. Для вычисления $u^1(t)$ в $\left(i - \frac{1}{2}\right)$ -м узле получим квадратное уравнение относительно u_{i-2}^h :

$$h^2 K_{11,1,1} \left(u_{i-2}^h \right)^2 + h \left(K_{1,1} + 2h \sum_{j=2}^i K_{11,1,j-1} u_{i-j+2}^h + h \sum_{\mu=2}^p \sum_{k=1}^i K_{1\mu,1,2,k-1} x_{\mu,i-k+2}^h \right) u_{i-2}^h =$$

$$\begin{aligned}
 &= f(ih) - z(ih) - h \sum_{j=2}^l \left(K_{1, j-1} + h \sum_{k=2}^l K_{11, j-1, k-1} u_{j-k+1}^h + h \sum_{\mu=2}^p \sum_{k=1}^l K_{1\mu, j-1, k-1} x_{\mu, j-k+1}^h \right) u_{j-1+1}^h, \quad (10) \\
 &z(ih) = h \sum_{\mu=2}^p \sum_{j=1}^l \left(K_{\mu, j-1} + h \sum_{k=1}^l K_{\mu\mu, j-1, k-1} x_{\mu, j-k+1}^h + h \sum_{v=2}^{\mu-1} \sum_{k=1}^l K_{v\mu, j-1, k-1} x_{v, j-k+1}^h \right) x_{\mu, j-1+1}^h, \\
 &y(lh) = h \sum_{j=1}^l \left(K_{1, j-1} + h \sum_{k=1}^l K_{11, j-1, k-1} u_{j-k+1}^h + h \sum_{\mu=2}^p \sum_{k=1}^l K_{1\mu, j-1, k-1} x_{\mu, j-k+1}^h \right) u_{j-1+1}^h + z(lh), \\
 &y(h) = z(h), \quad f(h) = \varepsilon(h), \quad f(lh) = \varepsilon(lh) - \varepsilon((l-1)h), \quad \varepsilon(ih) = y - y(ih), \quad l = \overline{2, n}.
 \end{aligned}$$

Выбор нужного корня в (10) определяется условием

$$u_1^h \xrightarrow{h \rightarrow 0} u(0) = \frac{y'(0)}{K_1(0)}.$$

Дальнейшее развитие работы связано с исследованием нелинейных процессов теплообмена. В качестве эталонной динамической системы рассмотрим математическую модель переходного процесса в элементе теплообменного аппарата, предложенную в [9]. Зависимость возмущения энтальпии $\Delta i(t)$ (кДж/кг) теплоносителя на выходе теплообменника от возмущения расхода теплоносителя $\Delta D(t)$ (кг/с) и теплоподвода $\Delta Q(t)$ (кВт) имеет следующий вид:

$$\Delta i_{et}(t) = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} \int_0^t \left(\Delta Q(\eta) - \frac{Q_0}{D_0} \Delta D(\eta) \right) \begin{pmatrix} e^{-\lambda_1 \int_0^\eta D(s) ds} & -\lambda_2 \int_0^\eta D(s) ds \\ & -e^{-\lambda_2 \int_0^\eta D(s) ds} \end{pmatrix} d\eta, \quad t \in [0, T], \quad (11)$$

где t – время, D_0 и Q_0 – стационарные значения расхода и теплоподвода, $D_0 = 0,16$ кг/с, $Q_0 = 100$ кВт, λ_1 и λ_2 – корни характеристического уравнения некоторой системы двух обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, $D(t) = D_0 + \Delta D(t)$. Нелинейный стационарный динамический объект с входными воздействиями $x_1(t) = \Delta D(t)$, $x_2(t) = \Delta Q(t)$ и откликом $y(t) = \Delta i_{et}(t)$ моделируется с помощью полинома Вольтерра второй степени в форме

$$\begin{aligned}
 \Delta i_{\text{mod}}(t) &= \int_0^t K_1(s_1) \Delta D(t-s_1) ds_1 + \int_0^t \int_0^t K_{11}(s_1, s_2) \Delta D(t-s_1) \Delta D(t-s_2) ds_1 ds_2 + \\
 &+ \int_0^t K_2(s_1) \Delta Q(t-s_1) ds_1 + \int_0^t \int_0^t K_{12}(s_1, s_2) \Delta D(t-s_1) \Delta Q(t-s_2) ds_1 ds_2, \quad t \in [0, T].
 \end{aligned} \quad (12)$$

Таким образом, задача выбора $u(t)$, который обеспечивает $\Delta i_{\text{mod}}(t) = 0$ при известном $\Delta Q(t)$, может быть сведена к решению уравнения (10) (для $p = 2$). С помощью (12) на базе метода средних прямоугольников выполнено построение $\Delta i_{1\text{mod}}^h(t_i)$, $\Delta i_{2\text{mod}}^h(t_i)$, причем при выборе тестовых сигналов для идентификации ядер Вольтерра использовались алгоритмы, описанные в [5] и [10] соответственно. В частности, для идентификации K_1 , K_{11} в [5] использовались наборы тестовых сигналов

$$\begin{cases} x_1^{\alpha_1, 2}(t) = \alpha_{1,2} D_0 I(t), \\ x_2(t) = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} x_{1,\omega}^{\alpha_1, 2}(t) = \alpha_{1,2} D_0 (I(t) - I(t-\omega)), \\ x_2(t) = 0, \end{cases} \quad (13)$$

где $\alpha_1 + \alpha_2 = 0$, $0 \leq \omega \leq t \leq T$, $I(t)$ – функция Хевисайда. В [10] для однозначного поиска K_1 , K_{11} были использованы

$$\begin{cases} x_{1,\omega_j}^{\alpha_1}(t) = \alpha_1 D_0 (I(t) - I(t-\omega_j)), \\ x_2(t) = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} x_{1,\omega_j}^{\alpha_2}(t) = \alpha_2 D_0 (I(t) - I(t-\omega_j)), \\ x_2(t) = 0, \end{cases} \quad (14)$$

где $0 \leq \omega_j \leq t \leq T$, $\omega_j = jh$, $j = \overline{1, n}$, $nh = T$.

Схема решения (10) была внедрена в программный комплекс [11], позволяющий проводить идентификацию и тестирование квадратичной интегральной модели (12) применительно к математической модели (11) теплообменного аппарата. Расчеты $\Delta D_1^h(t_i)$ и $\Delta D_2^h(t_i)$ выполнялись с использованием апостериорных данных о выходных значениях $\Delta i_{1\text{mod}}^h(t_i)$ и $\Delta i_{2\text{mod}}^h(t_i)$ соответственно. При проведении вычислительных экспериментов была учтена скорость открытия регулирующих клапанов (задвижек) [12, с. 112]. Предположим, что допустимые входные возмущения $\Delta Q(t) = \gamma Q_0 I(t)$, $t \in [0, T]$. Вычисление управляющего сигнала $\Delta D_1^h(t_i)$ ($\Delta D_2^h(t_i)$), обеспечивающего желаемый отклик $\Delta i_{1\text{mod}}^h = 0$ ($\Delta i_{2\text{mod}}^h = 0$) при заданном возмущении $\Delta Q^h(t_i)$, $0,5 \leq \gamma \leq 0,75$, проводилось с помощью нескольких уравнений вида (10) (для $p = 2$), ядра Вольтерра в которых были настроены на тестовые сигналы с амплитудами $0,008 \leq |\alpha| \cdot D_0 \leq 0,12$ кг/с и $5 \leq |\alpha| \cdot Q_0 \leq 75$ кВт. Приведем некоторые результаты вычислительных экспериментов для $i_0 = 434$ кДж/кг, $T = 30$ с, $h = 1$ с.

Основная специфика (9), как и в скалярном случае, связана с локальностью области существования его вещественного непрерывного решения. При вычислении $\Delta D_1(t)$, $0 \leq t \leq 30$ с было получено, что специфика (9) проявляется при возмущающих воздействиях $\Delta Q(t)$ с $\gamma \geq \gamma_{\max}$ (см. таблицу), что означает возможную потерю управляемости изучаемого процесса теплообмена.

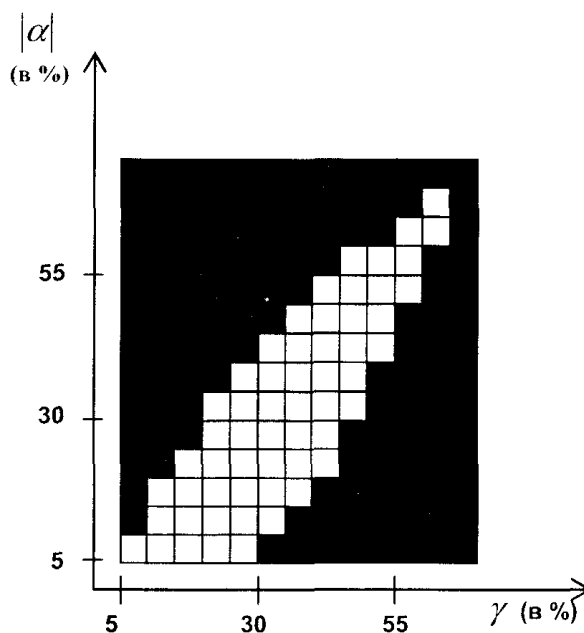
Значения $\gamma_{\max}$, при которых существует решение $\Delta D_1^h(t_i)$, $0 \leq t_i \leq 29$ с

$ \alpha $ (в %)	20	25	30	35	40	45	50	55	60	65	70	75
$\gamma_{\max}$ (в %)	58,8	57,2	56	55,6	55,8	56,4	57,3	58,9	61,4	64,9	69,3	71,3

Из таблицы видно, что на величину $\gamma_{\max}$ влияет выбор значений α , используемых для восстановления ядер Вольтерра.

Для сравнения эффективности применения способов идентификации, описанных в [5, 10], с помощью (11) были найдены значения $\Delta i_{1\text{ct}}^h(T)$ ($\Delta i_{2\text{ct}}^h(T)$), соответствующие входам ΔQ^h и ΔD_1^h (ΔD_2^h). Рисунок иллюстрирует результаты расчетов с точностью $\delta = 10^{-5}$. Видно, что при согласовании уровня $\gamma \leq 0,6$ с величиной $|\alpha|$ предпочтительнее использование ядер, восстановленных с использованием (13) из [5]. Было получено, что $4 \cdot 10^{-6} \cdot i_0 \leq |\varepsilon_1(T)| \leq 0,065 \cdot i_0$, $|\varepsilon_1(T)| = |\Delta i_{1\text{ct}}^h(T)|$.

С другой стороны, применение в (10) ядер Вольтерра, построенных с помощью набора тестов (14) из [10], дает решение ΔD_2^h на всем исследуемом промежутке $0 \leq t_i \leq 30$ с для любых $|\alpha|$ и $\gamma \geq \gamma_{\max}$, хотя погрешность регулирования в этом случае достаточно велика: $|\varepsilon_2(T)| \leq 0,189 \cdot i_0$, $|\varepsilon_2(T)| = |\Delta i_{2\text{ct}}^h(T)|$.



Вычислительный эксперимент:

- – если $|\Delta i_{1\text{ct}}^h(T)| < |\Delta i_{2\text{ct}}^h(T)|$;
- – если $|\Delta i_{1\text{ct}}^h(T)| > |\Delta i_{2\text{ct}}^h(T)|$

Заключение

В работе исследуется один класс нелинейных интегральных уравнений Вольтерра I рода, связанный с задачей моделирования нелинейной динамики в векторном случае. Разработан адаптивный алгоритм учета обратной связи для применения полиномов Вольтерра в задачах автоматического управления нелинейными динамическими системами типа черного ящика. Приводятся иллюстративные расчеты на примере эталонной динамической системы, описывающей процессы теплообмена. Численные эксперименты показали важность выбора тестовых сигналов, используемых для идентификации ядер Вольтерра.

Литература

1. Верлань, А.Ф. Моделирование систем автоматического управления с реальной обратной связью на основе интегро-дифференциальных уравнений Вольтерра / А.Ф. Верлань, В.Ф. Миргород, Д.Э. Контрерас // Труды Одесского политехнического университета. – 2000. – № 3. – С. 120–123.
2. Belbas, S.A. Numerical solution of multiple nonlinear Volterra integral equations / S.A. Belbas, Yu. Bulka // Applied Mathematics and Computation. – 2011. – V. 217. – Issuc 9. – P. 4791–4804.
3. Апарцин, А.С. Полиномиальные интегральные уравнения Вольтерра I рода и функция Ламберта / А.С. Апарцин // Труды института математики и механики УрО РАН. – 2012. – Т. 18, № 1. – С. 69–81.
4. Апарцин, А.С. Неклассические уравнения Вольтерра первого рода: теория и численные методы / А.С. Апарцин. – Новосибирск: Наука, 1999. – 193 с.
5. Апарцин, А.С. К идентификации несимметричных ядер Вольтерра в интегральных моделях нелинейной динамики / А.С. Апарцин, С.В. Солодуша // Тр. Сиб. конф. по прикладной и индустриальной математике. – Новосибирск, 1997. – Т. 1. – С. 1–13.
6. Солодуша, С.В. Приложение нелинейных уравнений Вольтерра I рода к задаче управления динамикой теплообмена / С.В. Солодуша // Автоматика и телемеханика. – 2011. – № 6. – С. 133–140.
7. Солодуша, С.В. Применение полиномиальных уравнений Вольтерра I рода в задачах автоматического регулирования / С.В. Солодуша // Вестник Тамбовского университета. Серия «Естественные и технические науки». – 2011. – Т. 16, № 4. – С. 1181–1183.
8. Солодуша, С.В. Моделирование систем автоматического управления на основе полиномов Вольтерра / С.В. Солодуша // Моделирование и анализ информационных систем. – 2012. – № 1. – С. 60–68.
9. Таиров, Э.А. Нелинейное моделирование динамики теплообмена в канале с однофазным теплоносителем / Э.А. Таиров // Изв. АН СССР: Энергетика и транспорт. – 1989. – № 1. – С. 150–156.
10. Солодуша, С.В. О моделировании нелинейных динамических систем с векторным входом полиномами Вольтерра / С.В. Солодуша, В.А. Спиряев, М.С. Щербинин // Материалы Всероссийской научной конференции «Математика. Механика. Информатика». – Челябинск: ЧелГУ, 2007. – С. 181–187.
11. Солодуша, С.В. Программно-вычислительный комплекс для моделирования нелинейной динамики теплообмена на базе квадратичных полиномов Вольтерра / С.В. Солодуша // Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2012614246. – 12. 05. 2012.
12. Таиров, Э.А. Применение сетевой модели к расчету потокораспределения в трактах энергоустановок / Э.А. Таиров, В.Ф. Чистяков, И.В. Караулова // Изв. РАН. Энергетика. – 2003. – № 3. – С. 105–114.

Поступила в редакцию 14 мая 2012 г.

NUMERICAL SIMULATION OF NONLINEAR DYNAMIC SYSTEMS WITH VECTOR INPUT BY QUADRATIC VOLTERRA POLYNOMIALS

S.V. Solodusha¹

Second degree quadratic polynomial Volterra integral equations of the first kind are considered. Such equations arise in the automatic control problem of a nonlinear dynamic system. An adaptive algorithm based on feedback is developed. Results of test calculations for the reference heat exchanger model are produced.

Keywords: nonlinear dynamic system, polynomial Volterra integral equation of the first kind, heat exchange.

References

1. Verlan' A.F., Mirgorod V.F., Kontreras D.E. Modelirovanie sistem avtomaticheskogo upravleniia s real'noi obratnoi svyaz'iu na osnove integro-differentsial'nykh uravnenii Vol'terra (Simulation of automatic control systems with actual feedback on the basis of integral differential Volterra equations). *Trudy Odesskogo politekhnicheskogo universiteta*. 2000. no. 3. pp. 120–123. (in Russ.).
2. Belbas S.A., Bulka Yu. Numerical solution of multiple nonlinear Volterra integral equations. *Applied Mathematics and Computation*. 2011. Vol. 217. Issuc 9. pp. 4791–4804.
3. Apartsin A.S. Polinomial'nye integral'nye uravneniia Vol'terra I roda i funktsiia Lambertta (Polynomial integral Volterra equations of the first kind and Lambert function). *Trudy instituta matematiki i mekhaniki UrO RAN*. 2012. Vol. 18, no. 1. pp. 69–81. (in Russ.).
4. Apartsin A.S. *Neklassicheskie uravneniia Vol'terra pervogo roda: teoriia i chislennye metody* (Nonclassical Volterra equations of the first kind: theory and numerical methods). Novosibirsk: Nauka, 1999. 193 pp.
5. Apartsin A.S., Solodusha S.V. K identifikatsii nesimmetrichnykh iader Vol'terra v integral'nykh modeliakh nelineinoi dinamiki (To identification of nonsymmetric Volterra kernels in integral models of nonlinear dynamics). *Trudy Sibirskoi konferentsii po prikladnoi i industrial'noi matematike* (Proc. Sib. Conf. on Applied and Industrial Mathematics). Novosibirsk, 1997. Vol. 1. pp. 1–13. (in Russ.).
6. Solodusha S.V. *Automation and Remote Control*. 2011. Vol. 72. no. 6. pp. 1264–1270.
7. Solodusha S.V. *Vestnik Tambovskogo universiteta. Seriya: Estestvennye i tekhnicheskie nauki*. 2011. Vol.16, no. 4. pp. 1181–1183. (in Russ.).
8. Solodusha S.V. *Modelirovanie i analiz informatsionnykh sistem*. 2012. no. 1. pp. 60–68. (in Russ.).
9. Tairov E.A. *Izv. AN SSSR: Energetika i transport*. 1989. no. 1. pp. 150–156. (in Russ.).
10. Solodusha S.V., Spiriaev V.A., Shcherbinin M.S. O modelirovanii nelincinykh dinamicheskikh sistem s vektornym vkhodom polinomami Vol'terra (On the modeling of nonlinear dynamic systems with vector input Volterra polynomials). *Materialy Vserossiiskoi nauchnoi konferentsii «Matematika. Mekhanika. Informatika»* (Proc. All-Russian Sci. Conf. «Mathematics. Mechanics. informatics»). Cheliabinsk, ChelGU, 2007. pp. 181–187. (in Russ.).
11. Solodusha S.V. Programmno-vychislitel'nyi kompleks dlia modelirovaniia nelineinoi dinamiki teploobmena na baze kvadraticnykh polinomov Vol'terra (Programming and computing suite for nonlinear dynamics of heat exchange simulation on the basis of quadratic Volterra polynomials). *Svidetel'stvo o gosudarstvennoi registratsii programm dlia EVM №2012614246* (Certificate of state registration of computer programs №2012614246). 12.05.2012. (in Russ.).
12. Tairov E.A., Chistiakov V.F., Karaulova I.V. *Izv. RAN. Energetika*. 2003. no. 3. pp. 105–114. (in Russ.).

¹ Solodusha Svetlana Vitalievna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Head of the Laboratory of «Ill-posed problems of computational mathematics» of Melentiev Energy Systems Institute SB RAS.

E-mail: solodusha@isem.sci.irk.ru

О РАЗЛИЧНЫХ ПОДХОДАХ К РЕШЕНИЮ ОБРАТНЫХ ГРАНИЧНЫХ ЗАДАЧ ТЕПЛОВОЙ ДИАГНОСТИКИ

Н.М. Япарова¹

Рассмотрены некоторые задачи тепловой диагностики, сводящиеся к обобщенной задаче, для решения которой был использован метод проекционной регуляризации. Построен алгоритм численного решения задачи. Полученные результаты проверены на модельных примерах.

Ключевые слова: метод решения операторных уравнений, метод регуляризации, метод проекционной регуляризации, уравнение теплопроводности, обратные задачи теплопроводности.

При экспериментальном исследовании нестационарных процессов тепломассообмена, возникает необходимость в решении обратных граничных задач теплопроводности. К таким задачам относится задача об определении плотности потоков жидкости и газов к телу, возникающие при взаимодействии этих потоков с твердыми телами, а также задача об определении границы твердой и жидкой фаз потока. Как правило, эти задачи являются неустойчивыми относительно погрешности исходных данных. Для решения подобного рода задач используют методы теории регуляризации [1–5]. Одним из таких методов является метод проекционной регуляризации.

1. Метод проекционной регуляризации. Постановка задачи и основные определения

Пусть H – гильбертово пространство. $A: H \rightarrow H$ линейный, инъективный, ограниченный оператор. Рассмотрим операторное уравнение

$$Au = f, \quad u, f \in H. \quad (1)$$

Известно, что при некотором $f = f_0$ существует точное решение $u_0 \in M_r$, где $M_r \subset H$. Но вместо f_0 известны некоторые приближения f_δ и $\delta > 0$ такие, что $\|f_\delta - f_0\| \leq \delta$.

Требуется по исходным данным задачи M_r , f_δ и δ построить приближенное решение u_δ для уравнения (1) и оценить его отклонение от точного.

Определим M_r следующим образом. Пусть оператор $A_1 = A^*A$, а $Sp(A_1) = [0, \|A\|^2]$. Рассмотрим $S_r = \{v: v \in H, \|v\| \leq r\}$ и линейный, ограниченный оператор $B: H \rightarrow H$ такой, что для оператора $B_1 = BB^*$ выполнено соотношение

$$B_1^{1/2} = G(A_1^{1/2}), \quad (2)$$

где функция $G(\sigma)$ – непрерывна, строго возрастает на $[0, \|A\|]$ и $G(0) = 0$, тогда $M_r = BS_r$.

Определение 1. Семейство непрерывных операторов $\{T_\delta: 0 < \delta \leq \delta_0\}$ называют методом решения уравнения (1) на множестве M_r , если $\forall \delta \in (0, \delta_0]$ оператор $T_\delta: H \rightarrow H$ и при $\delta \rightarrow 0$

$$T_\delta f_\delta \rightarrow u_0$$

равномерно на множестве M_r при условии, что $\|f_\delta - Au_0\| \leq \delta$.

Определение 2. Элемент $u_\delta = T_\delta f_\delta$ называют регуляризованным решением, а M_r – классом равномерной регуляризации.

Метод проекционной регуляризации, следуя [6], основан на том, что регуляризующее семейство операторов $\{P_\alpha | \alpha \in (0, \|A\|)\}$ определено формулой:

$$P_\alpha f = \int_{\alpha}^{\|A\|} \frac{1}{\sigma^2} dE_\sigma A^* f, \quad f \in H, \quad (3)$$

¹ Япарова Наталья Михайловна – кандидат физико-математических наук, кафедра математического анализа, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: ddjy@math.susu.ac.ru

где $\{E_\sigma \mid \sigma \in [0, \|A\|]\}$ – спектральное разложение E , порожденное оператором $A_1^{-1/2}$.

В качестве параметра регуляризации α выбирается одно из решений уравнения

$$\|Au_\delta^\alpha - f_\delta\|^2 = 9\|A\|^2 \delta^2. \quad (4)$$

Лемма 1. Если $\|f_\delta\| > 3\|A\|\delta$, то уравнение (4) имеет решение.

Заместим, что уравнение (4) может иметь множество решений. Этот факт не оказывает влияния на точность приближенного решения уравнения (1).

Лемма 2. Пусть семейство операторов $\{P_\alpha \mid \alpha \in (0, \|A\|)\}$ определено формулой (4), тогда при $\alpha_n \rightarrow \alpha_0$ и $f_n \rightarrow f_0$ имеет место $P_{\alpha_n}(f_n) \rightarrow P_{\alpha_0}(f_0)$ при $n \rightarrow \infty$.

Доказательство лемм 1 и 2 приведено в [6].

При использовании предложенного подхода к построению метода проекционной регуляризации приближенное решение уравнения (1) будет определено формулой

$$u_\delta^{\bar{\alpha}} = \tilde{T}_\delta f_\delta = \begin{cases} P_{\bar{\alpha}} f_\delta & \text{при } \|f_\delta\| > 3\|A\|\delta, \\ 0 & \text{при } \|f_\delta\| \leq 3\|A\|\delta, \end{cases} \quad (5)$$

где оператор P_α задан формулой (3), а $\bar{\alpha}$ – одно из решений уравнения (4).

Имеют место следующие результаты [6].

Теорема 1. Оператор $\tilde{T}_\delta$, определенный в (5), непрерывен на всем пространстве H .

Из леммы 2 и теоремы 1 следует, что семейство операторов $\{\tilde{T}_\delta : \delta \in (0, \delta_0]\}$, удовлетворяющее (5), будет являться методом решения уравнения (1) в смысле определения 1.

Теорема 2. Пусть $u_0 \in M_r$, $\bar{\alpha}$ – решение уравнения (4), а функция $G(\sigma)$ определяет соотношение (2), тогда

$$\|\tilde{T}_\delta f_\delta - u_0\| \leq 6\|A\| r G(\bar{\alpha}(\delta)).$$

В статье метод проекционной регуляризации был применен для решения обобщенной обратной задачи теплопроводности.

2. Обратная задача тепловой диагностики

Многие задачи тепловой диагностики сводятся к решению задачи о восстановлении функции $u(x, t)$ – функции температуры, зависящей от времени t на одном из концов стержня единичной длины. Известно, что стержень имеет теплоизолированную боковую поверхность и вблизи одного из концов температура равна $f(t)$, а температура на другом конце и начальная температура равны 0. Следуя [7], математическая модель этой обратной задачи имеет вид:

$$u'_t = u''_{xx}, \quad x \in (0, 1), \quad t \geq 0, \quad (6)$$

$$u(x, 0) = 0, \quad u(0, t) = 0, \quad x \in (0, 1), \quad t \geq 0, \quad (7)$$

$$u(x_0, t) = f(t), \quad x_0 \in (0, 1), \quad t \geq 0. \quad (8)$$

В этой задаче необходимо восстановить граничное значение $u(1, t) = u(t)$ при $t \geq 0$.

Известно, что при некотором $f(t) = f_0(t)$ существует точное решение задачи (6)–(8) $u_0(t) \in W_2^1([0, \infty))$, для которого справедливы следующие соотношения:

$$u(0) = u'(0) = 0, \quad (9)$$

$$u''(0, t) \in L_1([0, a]) \text{ при } \forall a > 0. \quad (10)$$

Но вместо $f_0(t)$ известны приближения $f_\delta(t)$ и $\delta > 0$ такие, что $\|f_\delta(t) - f(t)_0\| \leq \delta$. Требуется по $f_\delta(t)$ и δ построить приближенное решение $u_\delta(t)$ для задачи (1)–(3).

Полученная задача будет неустойчивой относительно приближений $f_\delta(t)$, так как небольшие погрешности функции $f_0(t)$ оказывают значительное влияние на решение задачи. Поэтому нашей целью будет построение приближенного решения $u_\delta(t)$, близкого в некотором смысле к точному. Для построения такого решения используют методы теории регуляризации.

3. Обратная задача тепломассообмена

Другим видом задач теплопроводности является задача, состоящая в определении неизвестного теплового режима, обеспечивающего заданный закон изменения границы раздела жидкой и твердой фазы в среде. Один из возможных подходов к решению этой задачи был предложен в [3].

Пусть $T(y, t)$ – тепловая функция, характеризующая этот режим, зависящая от времени t и переменной $y \in [0; h(t)]$, где $h(t)$ – непрерывная, ограниченная, строго возрастающая функция, описывающая закон изменения границы раздела, $h(0) = y_0 > 0$, тогда, следуя [8] задачу тепломассообмена можно сформулировать следующим образом:

$$T'_t = T''_{yy}, \quad y \in (0, h(t)), \quad t \geq 0, \quad (11)$$

$$T(y, 0) = z(y), \quad y \in (0, y_0) \quad (12)$$

$$T(h(t), t) = 0, \quad T'_t(h(t), t) = s(t), \quad t \geq 0. \quad (13)$$

Необходимо по этим данным восстановить граничное значение $T(0, t) = T_0(t)$ при $t \geq 0$.

Следуя [8] получим, что в задаче Стефана граница $h(t)$ определяется формулой

$$\frac{dh(t)}{dt} = -ks(t),$$

где $k > 0$ – известная константа. Тогда функции $h(t)$ и $s(t)$ связаны соотношением

$$h(y) = y_0 - k \int_0^t s(\tau) d\tau.$$

Полученная задача является задачей с подвижной границей, кроме того, она неустойчива относительно возможных погрешностей функций $h(t)$ и $s(t)$, поэтому для решения этой задачи используются методы построения регуляризованного решения, устойчивого относительно погрешностей.

4. Сведение задач тепловой диагностики и тепломассообмена к обобщенной задаче

Решение задач тепловой диагностики и тепломассообмена будем осуществлять в несколько этапов. На первом эти задачи сводятся к обобщенной задаче с постоянной границей. На втором этапе для обобщенной задачи строится регуляризованное решение.

Сведем задачу (6)–(8) к обобщенной. Рассмотрим функцию $g(t)$ такую, что

$$g(t) = u'_x(0, t) = \frac{1}{x_0} \left(f(t) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t e^{-\pi^2 n^2 (t-\tau)} f'(\tau) d\tau \right).$$

Так как искомая функция $u(t) = u(1, t)$ удовлетворяет условиям (9)–(10), то, заменив при точном значении $f_0(t)$ условие (8) на условие $u'_x(0, t) = g_0(t)$, а при приближенном значении $f_\delta(t)$ на $g_\delta(t)$, и используя выкладки, аналогичные приведенным в работе [7], получим, что для функций $g_\delta(t)$ и $g_0(t)$ выполнено $\|g_\delta - g_0\| \leq \delta$.

Таким образом, получим следующую задачу с постоянной границей:

$$u'_t = u''_{xx}, \quad x \in (0, 1), \quad t \geq 0,$$

$$u(x, 0) = 0, \quad u(0, t) = 0 \quad x \in (0, 1), \quad t \geq 0,$$

$$u'_x(0, t) = g(t) \quad t \geq 0,$$

в которой необходимо найти граничное значение функции $u(1, t)$ при $t \geq 0$ по приближенно заданным значениям $g_\delta(t)$ таким, что $\|g_\delta - g_0\| \leq \delta$.

Теперь сведем задачу тепломассообмена (11)–(13) к обобщенной задаче с постоянной границей. Для этого выполним замену переменных $x = y/h(t)$. Тогда $T(y, t) = T(h(t) \cdot x, t) = V(x, t)$, а при $t = 0$ получим, что $T(y_0 \cdot x, 0) = z(y_0 \cdot x)$ будет соответствовать функция $g(x)$ и уравнение (11) примет вид:

$$h^2(t) \cdot V'_t = V''_{xx}, \quad x \in (0, 1), \quad t \geq 0,$$

а условия (12)–(13) преобразуются в следующие:

$$\begin{aligned} V(x, 0) &= g(x), \quad x \in (0, 1), \\ V(1, t) &= 0, \quad V'_t(1, t) = h(t)s(t), \quad t \geq 0. \end{aligned}$$

После выполнения предложенной замены искомой граничной функции $u(1, t)$ будет соответствовать функция $V(0, t) = V_0(t)$ при $t \geq 0$.

Выполним еще одну замену переменных, положив $\vartheta = b(t) = \int_0^t \frac{1}{h^2(\tau)} d\tau$, тогда $V(x, t)$ примет вид $u_1(x, s) = V(x, b^{-1}(\vartheta))$, а задача (11)–(13) будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1(x, \vartheta)}{\partial \vartheta} &= \frac{\partial^2 u_1(x, \vartheta)}{\partial x^2}, \quad x \in (0, 1), \quad \vartheta \geq 0, \\ u_1(x, 0) &= g(x), \quad x \in (0, 1), \\ u_1(1, \vartheta) &= 0, \quad \frac{\partial u_1(1, \vartheta)}{\partial \vartheta} = h(b^{-1}(\vartheta)) \cdot s(b^{-1}(\vartheta)), \quad \vartheta \geq 0. \end{aligned}$$

Если дополнительно известно, что

$$z(0) = z(y_0) = 0, \quad z(y_0 \cdot x) \in C^2[0, 1], \quad (14)$$

то для построения решения можем использовать решение вспомогательной задачи:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_2(x, \vartheta)}{\partial \vartheta} &= \frac{\partial^2 u_2(x, \vartheta)}{\partial x^2}, \quad x \in (0, 1), \quad \vartheta \geq 0, \\ u_2(x, 0) &= g(x), \quad x \in (0, 1), \quad u_2(0, \vartheta) = u_2(1, \vartheta) = 0, \quad \vartheta \geq 0. \end{aligned}$$

Эта задача имеет единственное решение, которое можно представить в виде

$$u_2(x, \vartheta) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\pi^2 n^2 \vartheta} \sin \pi n x \cdot \int_0^1 g(\xi) \sin \pi n \xi d\xi,$$

Отсюда следует, что будет справедливо утверждение

$$\frac{\partial u_2(x, \vartheta)}{\partial x} = \eta(\vartheta) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\pi^2 n^2 \vartheta} \left(\pi n \cos \pi n x \cdot \int_0^1 g(\xi) \sin \pi n \xi d\xi - g(x) \sin^2 \pi n x \right),$$

тогда, учитывая (14), получим, что $\exists c > 0$ такое, что $\forall \vartheta \geq 0$ выполнено $\left| \frac{\partial u_2(1, \vartheta)}{\partial x} \right| \leq \frac{c}{e^\vartheta}$.

Окончательно в качестве функции $u(x, \vartheta)$ возьмем функцию $u(x, \vartheta) = u_1(x, \vartheta) - u_2(1, \vartheta)$, которая будет являться решением задачи:

$$\begin{aligned} u'_\vartheta &= u''_{xx}, \quad x \in (0, 1), \quad \vartheta \geq 0, \\ u(x, 0) &= g(x), \quad u(1, \vartheta) = 0, \\ u'_x(1, t) &= f(\vartheta), \quad \vartheta \geq 0, \end{aligned}$$

где $f(\vartheta) = h(b^{-1}(\vartheta)) \cdot s(b^{-1}(\vartheta)) - \eta(\vartheta)$. Граничное значение $u(0, \vartheta)$ подлежит определению. Таким образом, исходная задача была сведена к обобщенной задаче с постоянной границей.

5. Использование метода проекционной регуляризации для решения обобщенной задачи в пространстве $W_2^1([0, \infty))$

Рассмотрим обобщенную задачу:

$$\begin{aligned} u'_t &= u''_{xx}, \quad x \in (0, 1), \quad t \geq 0, \\ u(x, 0) &= 0, \quad u(0, t) = 0, \quad x \in (0, 1), \quad t \geq 0, \\ u'_x(0, t) &= g(t), \quad t \geq 0. \end{aligned} \quad (15)$$

В этой задаче необходимо найти граничное значение функции $u(1, t)$ при $t \geq 0$. Предполагается, что при $g(t) = g_0(t)$ существует точное решение $u_0(t) \in W_2^1([0, \infty))$ такое, что при некотором $T > 0$ выполнено $u_0(t) = 0$ для $t \geq T$.

Вместо точного значения g_0 известны g_δ и $\delta > 0$ такие, что $\|g_\delta - g_0\| \leq \delta$. Требуется построить приближенное решение u_δ уравнения (15).

Если известно, что решение прямой задачи удовлетворяет условиям

$$u(x, t), u'_t(x, t) \in C([0, 1] \times [0, \infty)) \cap L_2([0, 1] \times [0, \infty)),$$

$$u'_t(x, t), u''_{tt}(x, t) \in L_2([0, 1] \times [0, \infty))$$

и для функции $u(t) \in W_2^1([0, \infty))$ выполнено $\|u(t)\|_{W_2^1([0, \infty))} \leq r$, то в этой ситуации для решения обобщенной задачи можем применить преобразование Фурье по переменной t , а затем использовать метод проекционной регуляризации.

Будем искать приближенное решение с помощью метода проекционной регуляризации. Для этого найдем операторное изображение задачи (15), применяя преобразование Фурье F_t по переменной t . Получим, что операторное изображение этой задачи имеет вид:

$$i\lambda \tilde{u}(x, \lambda) = \frac{d^2}{dx^2} \tilde{u}(x, \lambda), \quad x \in (0, 1), \quad \lambda \in R, \quad (16)$$

$$\tilde{u}(0, \lambda) = 0, \quad \tilde{u}'_x(0, \lambda) = \tilde{g}_\delta(\lambda),$$

где $\tilde{u}(x, \lambda) = F_t(u(x, t))$, а $\tilde{g}_\delta(\lambda) = F_t(g_\delta(t))$.

Решая задачу (16), получим, что искомая функция $\tilde{u}(1, \lambda)$ может быть представлена в виде

$$\tilde{u}(1, \lambda) = \frac{2 \operatorname{sh}(\mu_0 \sqrt{\lambda})}{\mu_0 \sqrt{\lambda}} \tilde{g}_\delta(\lambda), \quad (17)$$

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

Для построения приближенного решения используем метод проекционной регуляризации, регуляризовав исходные данные следующим образом.

В качестве параметра регуляризации $\bar{\alpha}(\delta)$ при $\|g_\delta\|_{L_2} > 3\delta$ возьмем решение уравнения

$$\int_{-\infty}^{-\bar{\alpha}(\delta)} |\tilde{g}_\delta(\lambda)|^2 d\lambda + \int_{\bar{\alpha}(\delta)\infty}^{+\infty} |\tilde{g}_\delta(\lambda)|^2 d\lambda = 9\delta^2. \quad (18)$$

Тогда при $\|g_\delta\|_{L_2} > 3\delta$ функция $\tilde{g}_\delta(\lambda, \bar{\alpha}(\delta))$ будет удовлетворять соотношению

$$\tilde{g}_\delta(\lambda, \bar{\alpha}(\delta)) = \begin{cases} \tilde{g}_\delta(\lambda) & , \quad |\lambda| \leq \bar{\alpha}(\delta) \\ 0 & , \quad |\lambda| > \bar{\alpha}(\delta) \end{cases},$$

а функция $\tilde{u}(1, \lambda)$, определенная (18), примет вид

$$\tilde{u}(1, \lambda) = \frac{2 \operatorname{sh}(\mu_0 \sqrt{\lambda})}{\mu_0 \sqrt{\lambda}} \tilde{g}_\delta(\lambda, \bar{\alpha}(\delta)).$$

Применяя к функции $\tilde{u}(1, \lambda)$ обратное преобразование Фурье F_λ^{-1} , получим функцию

$$\bar{u}_\delta(1, t) = F_\lambda^{-1}(\tilde{u}_\delta(1, \lambda)).$$

Используем для этой функции метод проекционной регуляризации, получим, что регуляризованное решение задачи (16) будет определено соотношением

$$u_\delta(t) = P(\operatorname{Re} \bar{u}_\delta(1, t)) = \begin{cases} \operatorname{Re} \bar{u}_\delta(1, t) & \text{при } t \geq 0, \\ 0 & \text{при } t < 0. \end{cases}$$

На основании полученных результатов, была разработана программа, позволяющая находить регуляризованное решение задачи (15) по приближенно заданной функции $f(t) = u'_t(0, t)$.

В качестве тестирующих программ были решены обратные задачи для некоторых модельных функций. Решение, полученное для модельной функции $u(1,t) = t(e^{-t} - e^{-1})$, изображено на рис. 1, а для модельной функции $u(1,t) = \sin(10\pi t)e^{-t}$ – на рис. 2. При этом δ – уровень погрешности, α – это значение параметра регуляризации при заданном δ .

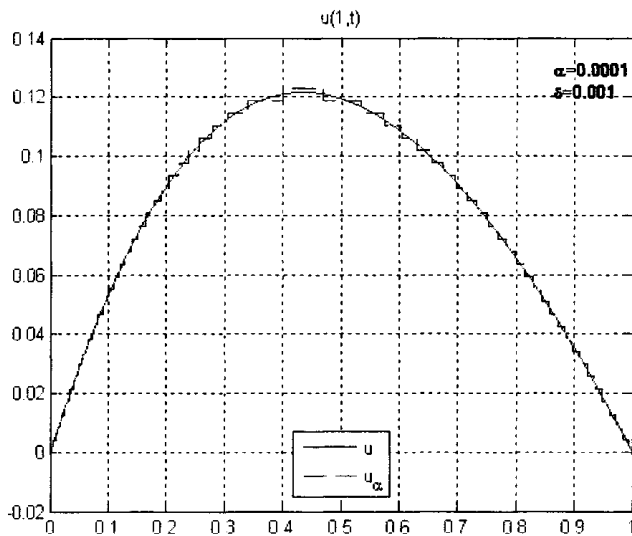


Рис. 1. u – точное решение, u_δ – приближенное

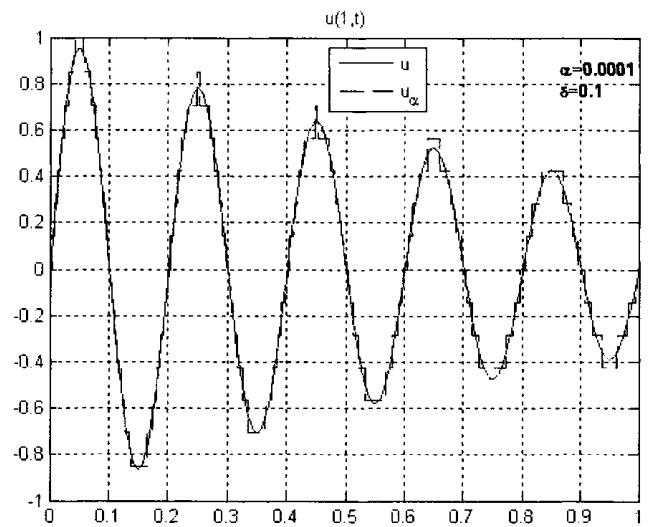


Рис. 2. u – точное решение, u_α – приближенное

6. Моделирование обобщенной обратной задачи в пространстве $L_1([0,1] \times [0,\infty))$

При решении прикладных задач возникают ситуации, когда из априорной информации нельзя однозначно сделать вывод о возможности применения преобразования Фурье для решения задачи. Возникает необходимость в использовании других методов решения.

Численное моделирование такой обратной граничной задачи проводилось в несколько этапов. На первом этапе задача сводится к интегральному операторному уравнению вида (1). На втором с помощью метода проекционной регуляризации для полученного уравнения строится конечномерная аппроксимация и регуляризованное решение находится в виде частичной суммы ряда.

Для того, чтобы применить метод проекционной регуляризации, сведем задачу (15) к интегральному уравнению. С этой целью найдем решение прямой задачи, предположив, что искомая функция $u(1,t) = \varphi(t)$ нам известна точно. Таким образом, рассмотрим задачу:

$$\begin{aligned} u'_t &= u''_{xx}, \quad x \in (0,1), \quad t \geq 0, \\ u(x,0) &= 0, \quad x \in (0,1), \\ u(0,t) &= 0, \quad u(1,t) = \varphi(t), \quad t \geq 0, \end{aligned} \quad (19)$$

решив которую, получим уравнение, связывающее функции $u'_x(0,t) = g(t)$ и $u(1,t) = \varphi(t)$.

Пусть $u(x,t) \in L_1([0,1] \times [0,\infty))$, кроме того, $\exists C > 0$, $\beta_0 \geq 0$ такие, что $\forall t \in [0,\infty)$ выполнено $|\varphi(t)| \leq ce^{\beta_0 t}$, а для любого $T \neq \infty$ и $\forall t \in [0;T]$ функция $\varphi(t)$ удовлетворяет условиям Дирихле, тогда для решения задачи можно использовать преобразование Лапласа [9].

Пусть $\bar{u}(x,p)$ – изображение функции $u(x,t)$, а $\bar{\varphi}(p)$ – функции $u(1,t) = \varphi(t)$, тогда операторное изображение задачи (19) имеет вид

$$\frac{d^2 \bar{u}}{dx^2} - p\bar{u} = 0, \quad \bar{u}(0,p) = 0, \quad \bar{u}(1,p) = \bar{\varphi}(p),$$

откуда $\bar{u}(x,p) = \bar{\varphi}(p) \operatorname{sh}(\sqrt{p}x) / \operatorname{sh}(\sqrt{p})$. Оператор $\bar{\psi}(x,p) = \operatorname{sh}(\sqrt{p}x) / \operatorname{sh}(\sqrt{p})$ целесообразно вычислить посредством разложения на простые дроби. Мероморфная функция $\bar{\psi}(x,p)$ имеет простые полюсы в точках $\sqrt{p} = \pm i\pi n$, $n = 1, 2, 3, \dots$, тогда разложение примет вид

$$\bar{\psi}(x, p) = x + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \sin(\pi n x) \frac{p}{p + n^2 \pi^2}.$$

Выполняя обратные преобразования, получаем, что оператору $\bar{\psi}(x, p)$ соответствует функция $\psi(x, t)$, определяемая формулой

$$\psi(x, t) = x + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \sin(\pi n x) e^{-\pi^2 n^2 t}, \quad (20)$$

а функция $u(x, t)$ будет определена соотношением

$$u(x, t) = \frac{d}{dt} \int_0^t \varphi(\tau) \psi(t - \tau) d\tau. \quad (21)$$

Используя (20), (21), получим, что решение задачи (19) имеет вид

$$u(x, t) = x \varphi(t) + \frac{2}{\pi} \frac{d}{dt} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \sin(\pi n x) e^{-\pi^2 n^2 t} \int_0^t \varphi(\tau) e^{\pi^2 n^2 \tau} d\tau. \quad (22)$$

Используя свойство сходящихся рядов и раскрывая оператор $\frac{d}{dt}$ в соотношении (22), имеем, что при $x \neq 1$ функция $u(x, t)$ определяется соотношением

$$u(x, t) = 2\pi \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n n \sin(\pi n x) e^{-\pi^2 n^2 t} \int_0^t \varphi(\tau) e^{\pi^2 n^2 \tau} d\tau.$$

Тогда для функции $u'(0, t) = g(t)$ будет выполнено

$$g(t) = u'_x(0, t) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \pi^2 n^2 e^{-\pi^2 n^2 t} \int_0^t \varphi(\tau) e^{\pi^2 n^2 \tau} d\tau.$$

С другой стороны, функция $g(t)$ нам известна и мы получаем операторное уравнение первого рода, определяемое соотношением

$$A\varphi = 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \pi^2 n^2 e^{-\pi^2 n^2 t} \int_0^t \varphi(\tau) e^{\pi^2 n^2 \tau} d\tau = g(t). \quad (23)$$

Для полученного уравнения (23) решаем обратную задачу относительно неизвестной функции $\varphi(t) = u(1, t)$, используя метод проекционной регуляризации. Сначала ортогонализуем по Шмидту систему функций $\{e^{-k^2 \pi^2 t}\}_1^{\infty}$ для каждого $t \geq 0$. Обозначим через $\{c_k e^{-k^2 \pi^2 t}\}_1^{\infty}$ полученную ортогонализованную систему функций и найдем разложение функции $g_{\delta}(t)$ по системе $\{c_k e^{-k^2 \pi^2 t}\}_1^{\infty}$ по следующему правилу:

$$g_k(t) = c_k \int_0^t g(\tau) e^{-k^2 \pi^2 \tau} d\tau. \quad (24)$$

Тогда

$$g(t) = \sum_{k=1}^{\infty} g_k(t) e^{-k^2 \pi^2 t} = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \left(\int_0^t g(\tau) e^{-k^2 \pi^2 \tau} d\tau \right) e^{-k^2 \pi^2 t}. \quad (25)$$

Учитывая соотношение (24)–(25) получим, что параметр регуляризации, определяемый формулой (4), будет являться решением уравнения

$$\|A\varphi(t) - g_{\delta}(t)\|^2 = \left\| \sum_{k=1}^N g_{\delta k} e^{-\pi^2 k^2 t} - g_{\delta}(t) \right\|^2 \leq 9\delta^2. \quad (26)$$

Метод проекционной регуляризации заключается в том, что приближенное решение задачи (19) находится в виде частичной суммы ряда (23) и параметр регуляризации, определяемый в (26), зависит от количества слагаемых в этой сумме.

Литература

- 1 Иванов, В К О применении метода Пикара к решению интегральных уравнений первого рода / В К Иванов // *Bull Inst Politech Iasi* – 1968 – Т 14, № 314 – С 71–78
- 2 Идентификация математических моделей теплопереноса в разлагающихся материалах / О М Алифанов, С А Будник, А В Ненарокомов, А В Нетелев // *Тепловые процессы в технике* – 2011 – № 8 – С 338–347
- 3 Cialkowski, M J Trefftz method in solving the inverse problems / M J Cialkowski, K Grysa // *J Inv Ill-Posed Problems* – 2010 – Vol 18 – pp 595–616
- 4 Короткий, А И Реконструкция граничных режимов в обратной задаче тепловой конвекции высоковязкой жидкости / А И Короткий, Д А Ковтунов // *Труды ИММ УрО РАН* – 2006 – Т 12, № 2 – С 88–97
- 5 Солодуша, С В Приложение нелинейных уравнений Вольтера I рода к задаче управления динамикой теплообмена / С В Солодуша // *Автоматика и телемеханика* – 2011 – № 6 – С 133–140
- 6 Танана, В П Об оптимальном по порядку методе решения условно-корректных задач / В П Танана, Н М Япарова // *Сиб ЖВМ* – 2006 – Т 9, № 4 – С 353–368
- 7 Танана, В П Об оптимальном по порядку методе решения одной обратной задачи для параболического уравнения / В П Танана // *ДАН* – 2006 – Т 407, № 3 – С 316–318
- 8 Танана, В П Об оптимальности по порядку метода проекционной регуляризации / В П Танана // *Сиб ЖВМ* – 2004 – Т 7, № 17 – С 117–132
- 9 Деч, Г Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования / Г Деч – М Наука – 1971 – 291 с

Поступила в редакцию 7 мая 2012 г.

DIFFERENT APPROACHES TO SOLVE INVERSE BOUNDARY VALUE PROBLEMS OF THERMAL DIAGNOSTICS

N M. Yaparova¹

The projective regularization method is applied to some problems of thermal diagnostics. This problem is reduced to the generalized one. Numerical algorithm to solve this problem is obtained. The results are approved by model examples.

Keywords: method for the solution of operator equations, regularization method, projective regularization method, heat conduction equation, inverse problems of a thermal conduction.

References

- 1 Ivanov V K *Bull Inst Politech Iasi* 1968 Vol 14, no 314 pp 71–78
- 2 Alifanov O M, Budnik S A, Nenarokomov A V, Netelev A V *Teplovye protsessy v tekhnike* 2011 no 8 pp 338–347 (in Russ.)
- 3 Cialkowski M J, Grysa K Trefftz method in solving the inverse problems *J Inv Ill Posed Problems* 2010 Vol 18 pp 595–616
- 4 Korotkiy A I, Kovtunov D A *Trudy IMM UrO RAN* 2006 Vol 12, no 2 pp 88–97 (in Russ.)
- 5 Solodusha S V *Automation and Remote Control* 2011 Vol 72 no 6 pp 1264–1270
- 6 Tanana V P, Yaparova N M *Siberian J of Numer Mathematics* 2006 Vol 9, no 4 pp 353–368 (in Russ.)
- 7 Tanana V P *DAN* 2006 Vol 407, no 3 pp 316–318 (in Russ.)
- 8 Tanana V P *Siberian J of Numer Mathematics* 2004 Vol 7, no 17 pp 117–132 (in Russ.)
- 9 Doetsch G *Rukovodstvo k prakticheskomu primeneniui preobrazovaniia Laplasa i Z-preobrazovaniia* (Guide to the Practical Application of the Laplace transform and Z-transform) Moscow Nauka, 1971 288 p (in Russ.) [Von Gustav Doetsch *Anleitung zum praktischen gebrauch der Laplace-Transformation und der Z-Transformation* R Oldenbourg, 1961 256 p.]

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕОЛОГИИ СУСПЕНЗИЙ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОГО ДИСПЕРГИРОВАНИЯ МНОГОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ЭПОКСИДНОЙ СМОЛЕ

Р.Р. Абдрахимов¹, С.Б. Сапожников², В.В. Сеницин³

Рассмотрены проблемы диспергирования высоковязких суспензий эпоксидных смол с углеродными нанотрубками, проведен анализ вязкости суспензий в зависимости от массового содержания углеродных нанотрубок, скорости сдвига и температуры. Разработан оригинальный валковый диспергатор.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, эпоксидная смола, агломераты, вязкость, диспергатор.

Введение

Полимерные композиты на основе углеродных нанотрубок (УНТ) все чаще рассматриваются в качестве реальной альтернативы традиционным пластикам, в основном благодаря повышенной жесткости и прочности, а также электропроводности при малом объемном содержании [1]. В последнее время большой интерес вызывает создание сенсоров давления, температуры и влажности из композиционных полимерных материалов на основе УНТ.

Следует заметить, что создание сенсоров на основе одиночных УНТ остается весьма популярным у физиков [2], но о практических результатах говорить пока рано. Возрастает актуальность использования в сенсорах неориентированных матов (агломератов) многостенных УНТ [3], однако служебные характеристики таких сенсоров отличаются большой нестабильностью характеристик, зависящей от количества контактов между УНТ внутри агломерата.

Сенсоры на основе полимерного композита и УНТ могут иметь стабильные свойства, если агломераты УНТ в них хорошо диспергированы [1]. Вообще говоря, анализ литературных данных по упругим, прочностным, реологическим, электрическим свойствам композитов с УНТ показал, что невнимание к качеству диспергирования порождает большое рассеяние служебных свойств. Важнейшими факторами в этом процессе являются напряжения сдвига и время их действия. Однако далеко не всегда можно определить амплитудно-временные характеристики сдвига: в промышленности и лабораторной практике диспергирование порошков в вязких средах осуществляют с помощью мельниц различных типов: шаровых, вибрационных, планетарных, дезинтеграторных, струйных и др.; для диспергирования жидкостей применяют гомогенизаторы, коллоидные мельницы, смесители инжекционного типа и форсунки, работающие по принципу действия струйного насоса, высокоскоростные мешалки турбинного, пропеллерного и других типов; диспергирование также осуществляют с помощью акустических и электрических устройств: ультразвуковые свистки и сирены, магнитострикционные преобразователи для получения суспензий, волновые концентраторы (в виде распылительной насадки) для генерирования аэрозолей [4, 5]. Отсюда следует, что в тех конструкциях, где невозможно определить с достаточной точностью амплитудно-временные характеристики сдвига, невозможно назначить технологические параметры и доказать качество диспергирования.

В данной работе будут рассмотрены схемы валковых диспергаторов, позволяющие регулировать требуемые технологические параметры. На рынке диспергаторов марка ЕХАКТ (каландр с межвалковой зоной сдвига, см. [6, раздел 3]) известна, как хорошо зарекомендовавшая себя при производстве наносуспензий.

¹ Абдрахимов Руслан Рамильевич – студент, лаборант-исследователь, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

² Сапожников Сергей Борисович – доктор технических наук, профессор, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: ssb@usu.ac.ru

³ Сеницин Владимир Владимирович – аспирант, кафедра информационной измерительной техники, Южно-Уральский государственный университет.

По данным [7] разорвать спутанные клубки УНТ в эпоксидной смоле можно, приложив напряжение сдвига, которое должно быть не менее 1 МПа (время не указывается).

В научной литературе авторы не приводят данные по размеру агломератов, средней длине и размерам одиночной УНТ в агломерате, поэтому сложно определить временные параметры процесса диспергирования. В данной работе этот пробел будет восполнен на примере суспензии УНТ марки ТАУНИТ-МД (производство ООО «НаноТехЦентр», г. Тамбов) в эпоксидной смоле ЭД-20 [8].

Поскольку твердая частица (агломерат) не деформируется вместе со слоями окружающей жидкости, то частица будет препятствовать течению жидкости и повышать ее вязкость. Понятно, что с увеличением концентрации наполнителя влияние этих факторов увеличивается и вязкость растет. Но этот рост может быть не пропорционален содержанию наполнителя.

Уравнение Эйнштейна [9] теоретически описывает поведение суспензий в зависимости от объемной доли твердых частиц

$$\eta(T, \varphi_2) = \eta_1(T)(1 + k_E \varphi_2), \quad (1)$$

где η , η_1 – вязкости суспензии и жидкой фазы; k_E – коэффициент Эйнштейна (~2,5 для сферических частиц), φ_2 – объемная доля твердых частиц, T – температура.

Из этого уравнения следует, что зависимость вязкости суспензии от количества наполнителя имеет линейный характер, а наклон определяется коэффициентом k_E . Уравнение Эйнштейна удовлетворительно описывает только дисперсии с низкой концентрацией сферических твердых частиц. Для суспензии из агломератов оно должно работать, для хорошо диспергированной суспензии – нарушаться. Заметим, что формула (1) справедлива и для массовой доли, в этом случае коэффициент пропорциональности не будет равен 2,5.

Таким образом, при проектировании технологического процесса диспергирования УНТ в вязкой среде с помощью валковых систем необходимо для заданного объемного содержания нанонаполнителя φ и температуры T определить связи параметров диспергатора: диаметр вала d , скорость вращения ω , межвалковый зазор δ и время процесса. Важно также знать средние размеры и длину УНТ.

Валковые диспергаторы

Будем считать известным диаметр D УНТ в свернутом виде (в агломерате) и ее длину в растянутом виде L ($L = kD$). Здесь помогает просвечивающая электронная микроскопия; ниже будет показано, что $k = 2-5$. Для распутывания нитей в агломерате его следует растянуть. Поскольку применяем чистый сдвиг вязкой среды, это приводит к ее растяжению вдоль одного направления и сужению в перпендикулярном направлении. Можно показать, что при больших сдвигах деформации растяжения ε и сдвига γ связаны соотношением $\varepsilon \approx 0,7\gamma$. Например, если УНТ в агломерате имеет вид полуокружности $k \approx 2$ и $\varepsilon \approx 2$, то требуемая величина деформации сдвига, которую должен создать диспергатор, равна $\gamma \approx 3$.

При использовании валков (рис. 1): схема (а) – каландр ЕХАКТ [6] с внешним зацеплением, схема (б) – новая конструкция, с внутренним зацеплением, предлагаемая в данной работе, у которой нет ограничений на угловую скорость вращения вала из-за сил инерции, отрывающих суспензию от поверхности в схеме (а).

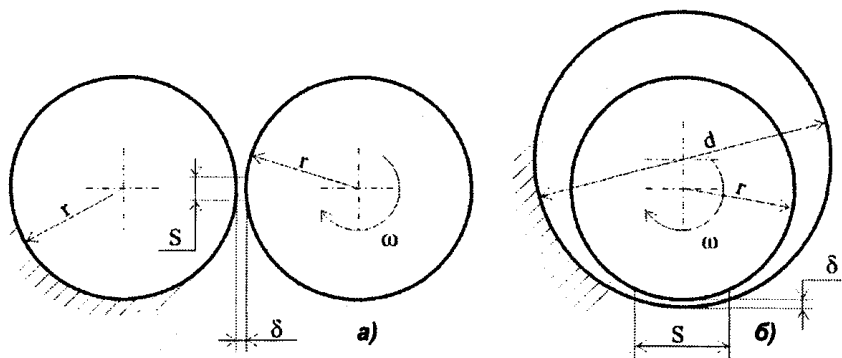


Рис. 1. Схемы диспергатора ЕХАКТ (а) и диспергатора, предложенного в этой работе (б)

Для достижения требуемого качества диспергирования необходимо обеспечить нужный уровень разрушающих напряжений сдвига τ_p в течение определенного отрезка времени Δt :

$$\tau = \eta \dot{\gamma} = \eta \frac{\omega r}{\delta} \geq \tau_p, \quad \gamma = \dot{\gamma} \Delta t, \quad (2)$$

где η – вязкость суспензии при данной скорости сдвига, ω – угловая скорость вращения вала, r – радиус вала, δ – зазор между валами, γ – деформация сдвига.

Для примера при высоких скоростях сдвига суспензии эпоксидной смолы с УНТ имеют вязкость порядка $\eta = 10$ Па·с (комнатная температура), необходимо, чтобы при $\tau_p = 1$ МПа скорость сдвига была больше, чем τ_p/η :

$$\dot{\gamma} = \frac{\omega r}{\delta} \geq 1 \cdot 10^5. \quad (3)$$

Время, в течение которого будет достигнута нужная деформация агломерата и уровень напряжений сдвига в зазоре будет равен необходимому значению, определяется следующим выражением:

$$\Delta t = \frac{S}{\omega r}, \quad (4)$$

где S – длина области минимального зазора между валами (с погрешностью до 5 %).

Например, из (2)–(4), при минимальном зазоре $\delta = 10$ мкм и скорости вращения вала $\omega = 2500$ об/мин ($41,67$ с⁻¹) получаем, что необходимый радиус вала равен $r = 24$ мм.

При этом для схемы диспергатора на рис. 1, а деформация растяжения составит $\varepsilon = 7$, что может оказаться недостаточным для полного вытягивания нанотрубок, поэтому придется диспергировать одну и ту же суспензию несколько раз. А для схемы на рис. 1, б ($d \approx 1,2$ 2r) длина области минимального зазора между валами S почти в 10 раз больше, поэтому деформация растяжения возрастает до $\varepsilon = 74$, что вполне достаточно для разрушения любых агломератов УНТ.

Исследуемый материал

В данной работе был использован материал Таунит-МД, который представляет собой нитевидные образования поликристаллического графита в виде сыпучего порошка из агломератов черного цвета. Агломераты микрометрических размеров имеют структуру спутанных пучков многостенных трубок [10].

Контроль параметров Таунита-МД проведен использованием просвечивающего электронного микроскопа JEOLJEM 2100 (рис. 2). Анализ изображений показывает, что размер одиночных УНТ в свернутом виде в 2–5 раз меньше длины расправленной УНТ.

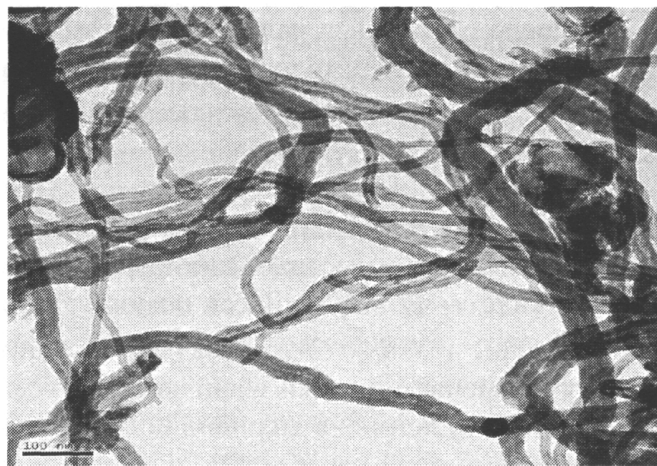


Рис. 2. УНТ Таунит-МД в просвечивающем электронном микроскопе JEOL (25 000х)

Таблица 1

Общая характеристика УНМ «Таунит-МД» по данным [10]

Параметры	«Таунит-МД»
Наружный диаметр, нм	8–15
Внутренний диаметр, нм	4–8
Длина, мкм	2 и более
Общий объем примесей, % (после очистки)	До 5 (до 1)
Насыпная плотность, г/см ³	0,03–0,05
Удельная геометрическая поверхность, м ² /г	300–320 и более
Термостабильность, °С	До 600

По данным электронной микроскопии величина наружного диаметра УНТ составляет от 10 до 50 нм, внутреннего диаметра от 3 до 8 нм, длина более 2 мкм.

Полимерная матрица была изготовлена на основе эпоксидно-диановой смолы ЭД-20 и отвердителя изометилтетрагидрофталисового ангидрида (изо-МТГФА). Эта матрица имеет температуру полимеризации 170 °С, что позволяет использовать изготовленный из него нанокомпозит при температурах до 120 °С.

Диспергирование

Диспергатор немецкой фирмы ЕХАКТ [6] (рис. 3) состоит из трех параллельных цилиндров одинакового диаметра (80 мм), установленных с регулируемыми зазорами 500...10 мкм и вращающихся с разной скоростью (скорость $\omega < 100$ об/мин) в попарно противоположных направлениях, с соотношением скоростей 9:3:1 и скребок для снятия готового продукта. Ингредиенты суспензии наносят на первый цилиндр, далее они попадают сначала в зазор между первым и вторым цилиндром и затем в зазор между вторым и третьим. В двух этих зазорах происходит разрушение агломератов за счёт сдвигового воздействия. Недостаток описанного выше диспергатора заключается в том, что сдвиговое воздействие происходит только в двух точках и длится короткий промежуток времени. Этого, как правило, недостаточно для полного разрушения агломератов, поэтому цикл приходится повторять несколько раз.

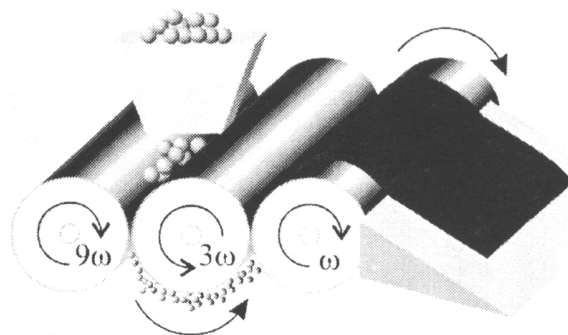


Рис. 3. Принцип действия диспергатора ЕХАКТ

В данной работе для смешивания УНТ в эпоксидной смоле первоначально был использован планетарный миксер KURABO Mazerustar kk250. Процесс длился 5 мин в режиме «9-9» – дегазация и смешивание (рис. 4).

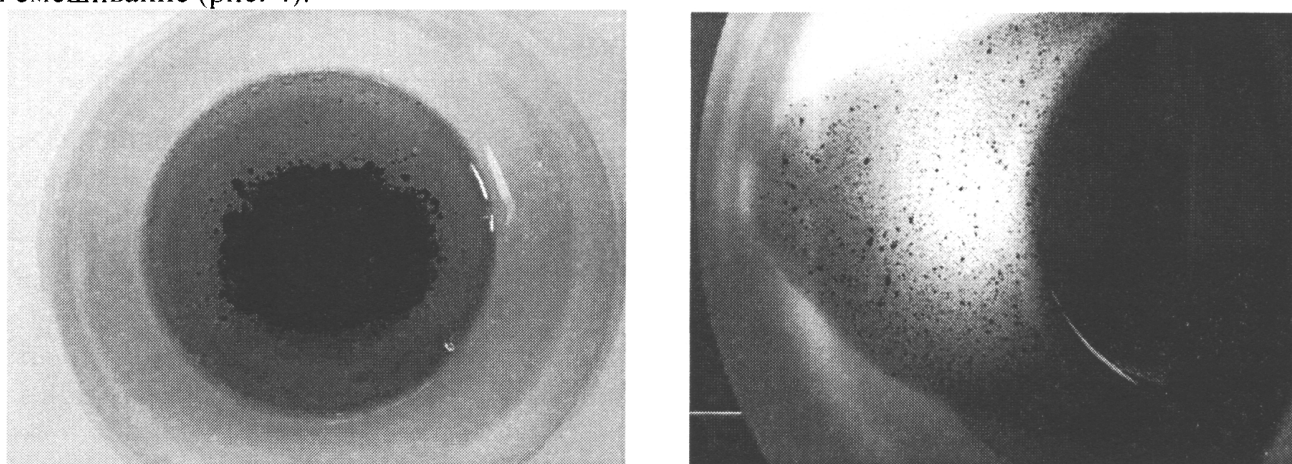


Рис. 4. Слева – до диспергирования, справа – после (~150–200 мкм)

Агломераты УНТ полностью не разрушены, так как за счёт трения смолы о стенки сосуда произошел разогрев, её вязкость снизилась, и сдвиговое воздействие со стороны стенок сосуда стало слабым. Поэтому был разработан оригинальный валковый диспергатор (см. рис. 1, б) с вертикальным расположением ротора и статора. Статор выполнен в виде толстостенного стакана со съёмной крышкой, расположенной на нижнем торце, имеет внутренний диаметр 32 мм. Ротор – цилиндр диаметром 30 мм. В качестве привода был использован электродвигатель с возможностью регулировки скорости вращения от 500 до 2500 об/мин; подвижный стол позволил обеспечить необходимый зазор. Согласно равенству (3) при отмеченных размерах необходимый зазор равен $\delta = 6,3$ мкм и деформация растяжения при этом составит $\epsilon = 33$, что вполне достаточно для разрушения агломерата и вытягивания нанотрубок.

Смесь УНТ со смолой заливается в промежуток между статором и ротором, во время вращения ротора смесь втягивается в зазор и в нём за счёт сдвигового воздействия развиваются напряжения до 1 МПа, достаточные [7] для разрушения агломератов УНТ. В процессе диспергирования при большой скорости вращения ротора и небольшом зазоре происходит саморазогрев суспензии, что понижает вязкость смолы и уменьшает напряжения сдвига. Для предотвращения перегрева части диспергатора периодически охлаждали.

На рис. 5 приведён вид суспензии до и после обработки в диспергаторе в течение 5 мин, агломераты исчезли.

Исследование вязкости смолы и суспензии с УНТ

Измерение вязкости было проведено на вискозиметре типа «конус-плита» Brookfield CAP 2000+ при скоростях сдвига от 17 до 1000 с⁻¹ при температурах от 27 °С до 100 °С.

На рис. 6, а представлены зависимости вязкости суспензии от скорости сдвига и массовой доли УНТ при температуре 27 °С.

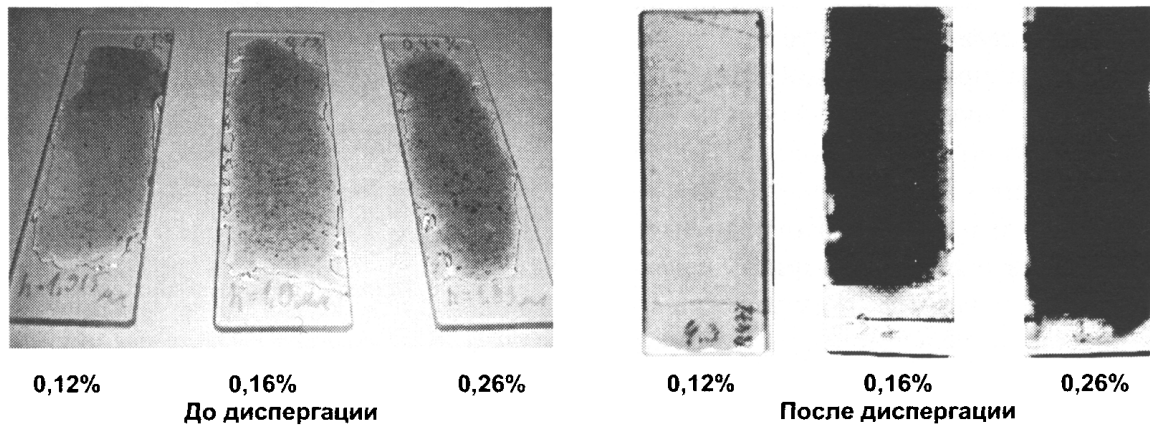


Рис. 5. Сравнение суспензии до (~150–200 мкм) и после диспергирования. Цифрами отмечены массовые доли УНТ

Для минимальной скорости сдвига $16,6 \text{ с}^{-1}$ построена зависимость вязкости от массового содержания УНТ. Следовательно, модификация формулы Эйнштейна (1) для массовой доли данной суспензии будет выглядеть следующим образом:

$$\eta(T, \mu_2) = \eta_1(T)(1 + 4\mu_2), \quad (5)$$

где μ_2 – массовое содержание наполнителя в суспензии.

Зависимость вязкости от массового содержания нанотрубок существенно нелинейна, поэтому формула (5) может применяться лишь в области $\varphi < 1 \%$ с погрешностью не более 10 % (рис. 6, б).

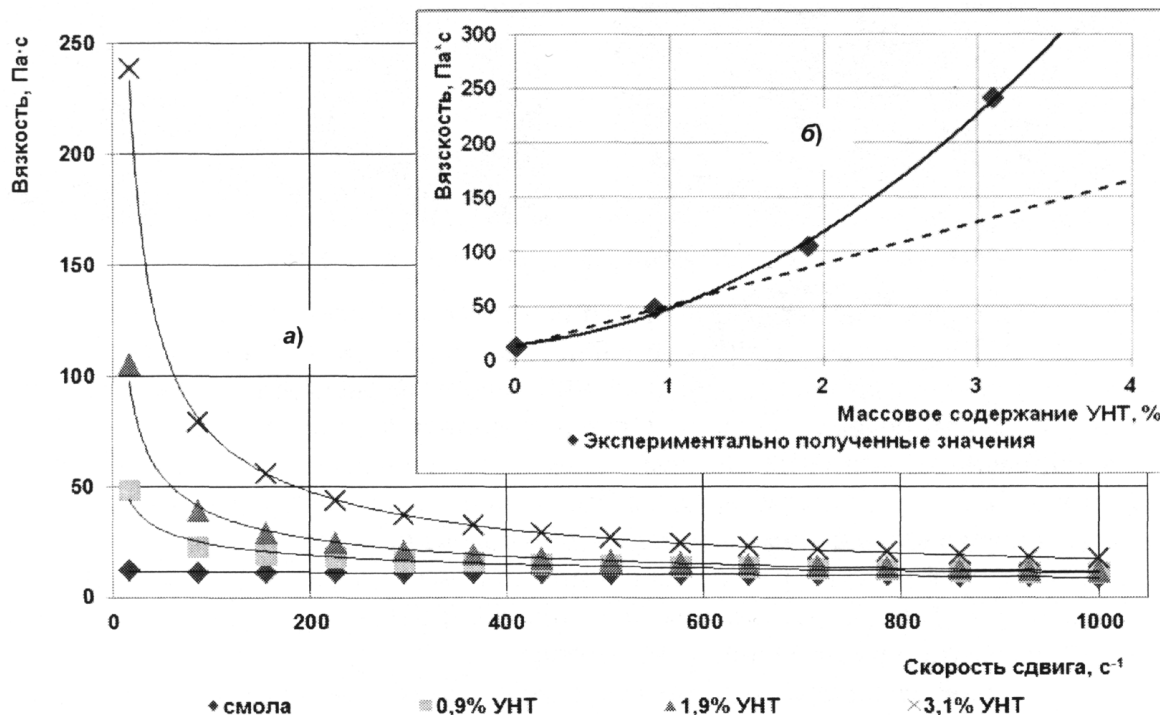


Рис. 6. Зависимости вязкости смолы и суспензии с УНТ от скорости сдвига (а) и от массового содержания УНТ (б). Пунктир – формула Эйнштейна

На рис. 7 представлены графики зависимости сдвиговых напряжений от скорости сдвига для смолы и при разном массовом содержании УНТ.

Для описания полученных зависимостей хорошо подходит упрощенная модель Гершеля–Балкли [11] (табл. 2):

$$\tau = A\dot{\gamma}^n,$$

где A – мера консистенции жидкости, n – показатель степени, характеризующий меру отклонения поведения жидкости от ньютоновского ($n < 1$).

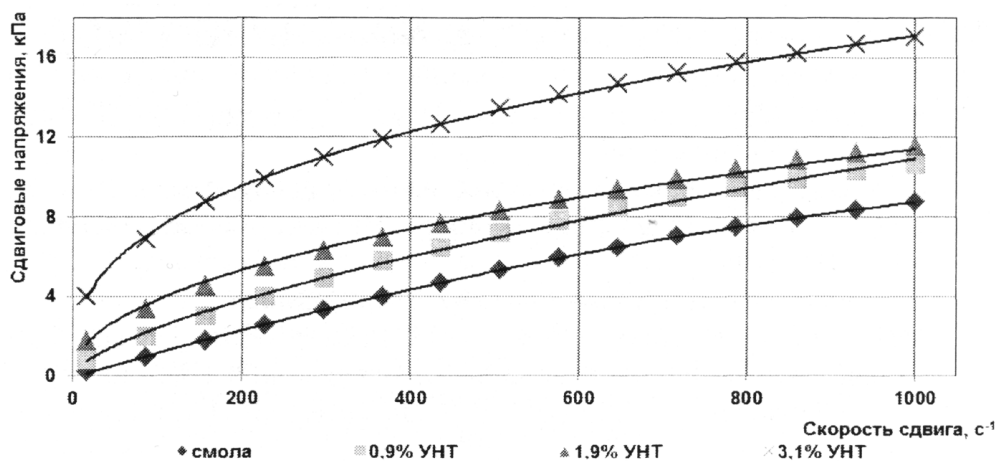


Рис. 7. Зависимости сдвиговых напряжений от скорости сдвига и массовой доли УНТ

Таблица 2

Значения коэффициентов A и n уравнения Гершеля–Балкли
для разного массового содержания УНТ в суспензии

Массовое содержание УНТ, %	0	0,9	1,9	3,1
Коэффициенты				
A , МПа/с ^{n}	15,5	115	758	1405
n	0,93	0,66	0,48	0,36

Отсюда следует, что сдвиговые напряжения монотонно увеличиваются при увеличении скорости сдвига, следовательно, для улучшения качества диспергирования, увеличения сдвиговых напряжений необходимо увеличивать скорость сдвига, при этом следует охлаждать суспензию для того, чтобы она оставалась более вязкой.

На рис. 8 представлены графики зависимости вязкости от температуры для суспензий при разном массовом содержании УНТ.

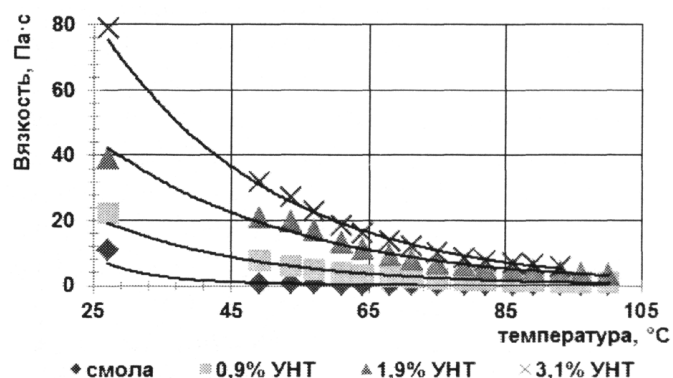


Рис. 8. Зависимости вязкости суспензий от температуры и массового содержания УНТ

Выводы

В работе рассмотрены проблемы диспергирования высоковязких суспензий эпоксидных смол с углеродными нанотрубками. Существующие в промышленности диспергаторы не обладают необходимым качеством диспергирования, поэтому был разработан валковый диспергатор типа «ротатор-стакан», создающий необходимое сдвиговое усилие для разрыва агломератов углеродных нанотрубок, подана заявка на патент. Проведен анализ вязкости эпоксидной смолы и суспензии с УНТ в зависимости от массового содержания углеродных нанотрубок, скорости сдвига и температуры, полученные зависимости описываются экспоненциальными функциями, константы которых определяются температурой и массовым содержанием УНТ. Добавление к эпоксидной смоле УНТ в количестве до 3 мас. % увеличивает вязкость в 15 раз; разогрев с 30 °C до 100 °C снижает вязкость в 10 раз. Для достижения требуемого качества диспергирования следует охлаждать суспензию и не допускать её разогрева выше 30 °C в процессе обработки.

Литература

1. Investigation on sensitivity of a polymer/carbon nanotube composite strain sensor/ N. Hu, Y. Karube, M. Arai, T. Watanabe и др. // Carbon. – 2010. – № 48. – P. 680–687.
2. Li, C. Sensors and actuators based on carbon nanotubes and their composites: A review/ C. Li, E.T. Thostenson, T.-W. Chou // Composites Science and Technology. – 2008. – № 68. – P. 1227–1249.
3. <http://sci-lib.com/article297.html>

4. Ребиндер, П.А. Поверхностные явления в дисперсных системах. Физико-химическая механика. Избр. труды / П.А. Ребиндер. – М.: Наука, 1979. – 368 с.
5. Аввакумов, Е.Г. Механические методы активации химических процессов / Е.Г. Аввакумов. – Новосибирск: Наука, 1989. – 306 с.
6. <http://www.exakt.de/Produkte.6.0.html>
7. Wichmann, M. Electrically conductive polymer nanocomposite matrix system with load and health monitoring capabilities: Doctor-Ingenieur genehmigte Dissertation / M. Wichmann. – Hamburg, 2009.
8. ГОСТ 10587-84. Смолы эпоксидно-диановые неотвержденные.
9. Рейнер, М. Десять лекций по теории реологии / М. Рейнер. – Гостехиздат, 1947. – 135 с.
10. http://nanotc.ru/index.php?option=com_content&task=view&id=8&Itemid=34
11. Виноградов, Г.В. Реология полимеров / Г.В. Виноградов, А.Я. Малкин. – М.: Химия, 1997. – 440 с.

Поступила в редакцию 23 июля 2012 г.

ANALYSIS OF SUSPENSION RHEOLOGY FOR EFFECTIVE DISPERSION OF MWCNT IN EPOXY RESIN

R.R. Abdrakhimov¹, S.B. Sapozhnikov², V.V. Sinitsin³

Problems of high-viscous suspensions of epoxy resins with multiwall carbon nanotubes are discussed in the article. Analysis of the viscosity of suspensions depending on the mass content of carbon nanotubes as well as shear rate and temperature is provided. An original roll-type disperser is developed.

Keywords: carbon nanotubes, epoxy resin, agglomerates, viscosity, disperser.

References

1. Hu N., Karube Y., Arai M., Watanabe T., Yan C., Li Y., Liu Y., Fukunaga H. Investigation on sensitivity of a polymer/carbon nanotube composite strain sensor. *Carbon*. 2010. no. 48. pp. 680–687.
2. Li C., Thostenson E.T., Chou T.-W. Sensors and actuators based on carbon nanotubes and their composites: A review. *Composites Science and Technology*. 2008. no 68. pp. 1227–1249.
3. <http://sci-lib.com/article297.html>
4. Rebinder P.A. *Poverkhnostnye javlenija v dispersnykh sistemakh. Fiziko-khimicheskaja mekhanika. Izbr. trudy* (Surface phenomena in disperse systems. Physical and chemical mechanics. Selected Papers). Moscow: Nauka, 1979. 368 p. (in Russ.).
5. Avvakumov E.G. *Mekhanicheskie metody aktivacii khimicheskikh processov* (Mechanical methods of chemical processes activation). Novosibirsk: Nauka, 1989. 306 p. (in Russ.).
6. <http://www.exakt.de/Produkte.6.0.html>
7. Wichmann M. Electrically conductive polymer nanocomposite matrix system with load and health monitoring capabilities: Doctor-Ingenieur genehmigte Dissertation. Hamburg, 2009.
8. GOST 10587-84: *Smoly ehpoksidno-dianovye neotverzhdennye* (Uncured epoxy diane resin) (in Russ.).
9. Rejner M. *Desjat' lekcij po teorii reologii* (Ten lectures in rheology theory). Gostekhizdat, 1947. 135 p. (in Russ.).
10. http://nanotc.ru/index.php?option=com_content&task=view&id=8&Itemid=34
11. Vinogradov G.V., Malkin A.Ya. *Reologija polimerov* (Rheology of polymers). Moscow: Khimija, 1997. 440 p. (in Russ.).

¹ Abdrakhimov Ruslan Ramilievich is Undergraduate Student, Laboratory Assistant, Dynamics and Strength of Machines department, South Ural State University.

² Sapozhnikov Sergei Borisovich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines department, South Ural State University.

E-mail: ssb@usu.ac.ru

³ Sinitsin Vladimir Vladimirovich is Post-graduate Student, Information Measuring Technology Department, South Ural State University.

К ОЦЕНКЕ ДОЛГОВЕЧНОСТИ ДЛИННОМЕРНЫХ ГИБКИХ ТРУБ

А.В. Брылкин¹, В.Б. Буксбаум², К.И. Колесников³, В.Б. Порошин⁴, М.В. Усова⁵

Рассмотрена методика ускоренных ресурсных (эквивалентных) испытаний длинномерных гибких труб, использующая модель накопления повреждения кинетического типа. Отмечается, что для обеспечения адекватности предлагаемого подхода деформационные и прочностные свойства материала необходимо получать в условиях циклического нагружения. Применительно к технологии колтюбинга выполнен прогноз долговечности для модельного технологического цикла по результатам стендовых испытаний на установке ОАО «Уралтрубмаш».

Ключевые слова: колтюбинг, длинномерная гибкая труба, циклические характеристики прочности и пластичности, накопление повреждения, эквивалентные ресурсные испытания, прогнозирование долговечности для произвольного технологического цикла.

Надежность и безопасность технологических работ с использованием гибких труб (колтюбинг (*coiled tubing*)) – технология и готовое изделие – намотанная на барабан труба) играют важнейшую роль как в процессе бурения скважин, так и при проведении геофизических исследований, ремонтных и других работ. Возможные при этом аварии сопряжены с большими экономическими и материальными потерями, таким образом, минимизация риска ставит перед производителями гибких труб актуальную и весьма непростую задачу. В этой ситуации оценка числа рабочих циклов, которое может выдержать гибкая труба до разрушения, чрезвычайно важна как для производителя – при назначении гарантийного срока службы изделия – так и для потребителя колтюбинга, в целях успешного и безопасного проведения работ на скважине.

Сложные условия эксплуатации и высокие нагрузки на гибкие насосно-компрессорные трубы в процессе работы предъявляют весьма жесткие требования к их механическим характеристикам. Ситуация осложняется тем, что для выполнения задач, возложенных на колтюбинг, материал одновременно должен обладать двумя противоречивыми свойствами – прочностью и пластичностью.

В течение одного типового технологического цикла (спускоподъемной операции – СПО) отдельные области трубы несколько раз подвергается неупругому знакопеременному деформированию: во время спуска – при размотке трубы с барабана, изгибе на направляющей дуге, выпрямлении в инжекторе и далее при погружении в скважину и подаче давления; во время подъема – при прохождении через направляющую, выпрямлении после направляющей и, наконец, при намотке на барабан. При этом в опасном сечении трубы в разные моменты вре-

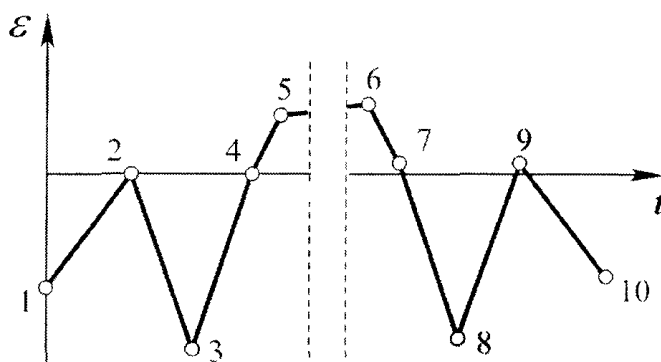


Рис 1. Схема деформирования материала в опасной точке опасного сечения трубы в типичном технологическом цикле:

1-2 – размотка с барабана; 2-3 – изгиб на направляющей; 3-4 – выпрямление после направляющей; 4-5 – приложение эксплуатационных нагрузок; 5-6 – технологический процесс; 6-7 – снятие нагрузок; 7-8 – изгиб на направляющей; 8-9 – выпрямление после направляющей; 9-10 – намотка на барабан

¹ Брылкин Андрей Владиславович – коммерческий директор ОАО «Уралтрубмаш», г. Челябинск.
E-mail: abrylkin@utbm.ru

² Буксбаум Виктор Борисович – кандидат технических наук, начальник технического отдела ОАО «Уралтрубмаш», г. Челябинск.
E-mail: vbuksbaum@utbm.ru

³ Колесников Константин Иванович – зам. коммерческого директора ОАО «Уралтрубмаш», г. Челябинск.
E-mail: kkolesnikov@utbm.ru

⁴ Порошин Вадим Борисович – доцент, кандидат технических наук, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: poroshin2816@mail.ru

⁵ Усова Мария Викторовна – инженер-технолог ОАО «Уралтрубмаш», г. Челябинск.
E-mail: usova-rabochiy@yandex.ru

мени реализуется как «жесткое» (ограниченное по деформации), так и «мягкое» (ограниченное по напряжению) нагружение. История изменения деформации в одной из точек такого сечения для одного технологического цикла показана на рис. 1.

Расчетный метод оценки ресурса реализован в ряде зарубежных программных продуктов, таких как *Cerberus*, *FACT*, *Pegasus*, *CTLIFE* и ряде других. Применяемые в этих пакетах расчетные схемы основаны на анализе большого объема статистических данных и представляют собой эмпирические зависимости, относящиеся к конкретному типоразмеру и классу прочности колтюбинга. Заметим, что во всех названных пакетах в качестве механических характеристик материала используются показатели прочности и пластичности, отвечающие *однократному статическому* нагружению, причем в детерминированном виде; ими же определяется класс прочности трубы.

Недостатком таких программных пакетов является также недостаточно корректный учет технологии конкретного производства: влияния остаточных напряжений в зоне сварных швов (продольных и поперечных), вида поперечных швов, особенностей термообработки, начального упрочнения (наклепа) и других технологических факторов. Игнорируется характер поведения металла при циклическом нагружении: как известно, циклически упрочняющиеся и разупрочняющиеся материалы нецелесообразно использовать для изготовления колтюбинга, так как в этом случае вряд ли удастся обеспечить приемлемое количество циклов до момента разрушения – образования макротрещины. В этих условиях единственным приемлемым вариантом являются циклически стабильные и циклически стабилизирующиеся стали. Характер стабилизации (в сторону упрочнения или разупрочнения) также оказывает заметное влияние на поля напряжений и деформаций в представительных точках трубы в процессе ее работы.

К сожалению, держатели таких пакетов неохотно раскрывают их содержание. Не исключено, что некоторыми из них предусматривается эмпирического типа коррекция указанных обстоятельств, опирающаяся на полученные в ходе многочисленных испытаний на специальных стендах опытные данные [1]. Однако в ходе подобной коррекции необходимо иметь в виду, что в полноразмерном трубчатом образце при изгибе на стенде реализуется *неоднородное* напряженное состояние, поэтому для перехода от усилия, прикладываемого к объекту, и перемещения (или его кривизны) к напряжению и деформации в выбранной точке необходима соответствующая математическая модель конструкции, учитывающая неупругий характер работы материала, влияние градиента напряжений и т.д. В то же время на специальной машине, предназначенной для проведения механических испытаний в условиях растяжения–сжатия, стандартный образец работает в условиях *однородного* напряженного состояния, таким образом, в результате получают непосредственно свойства *материала* – как деформационные, так и прочностные.

Со всей очевидностью напрашивается вывод, что экспериментальный метод оценки долговечности объекта является наиболее адекватным, однако реализация его непосредственно на скважине вряд ли возможна.

Как следует из рис. 1, основную часть программы нагружения в СПО составляют циклы повторного изгиба. С учетом этого обстоятельства целесообразно проведение стендовых *эквивалентных* ресурсных испытаний в условиях, например, знакопеременного поперечного изгиба с последующим пересчетом экспериментально полученного числа циклов до разрушения на долговечность реального изделия в условиях реальной эксплуатации по критерию равенства накопленного повреждения. Такой подход практикуется в передовых отраслях машиностроения – таких, как авиация, ракетно-космическая техника, производство ядерных реакторов и некоторых других [2].

В настоящей работе представлена разработанная на кафедре «Динамика и прочность машин» Южно-Уральского государственного университета методика оценки ресурса, базирующаяся на использовании циклических деформационных и прочностных характеристик материала, расчете кинетики напряженно-деформированного состояния объекта в представительных точках и модели накопления повреждения кинетического типа [3, 4].

Количество спускоподъемных операций, представляющее количественную меру ресурса, находили, как уже было сказано, путем подсчета повреждения – скалярной неубывающей величины ω_{Σ} , характеризующей степень дефектности (поврежденности) материала в данный момент времени. Достижение параметром ω_{Σ} критической величины ω_c соответствует моменту разрушения

(образованию макротрещины). Согласно гипотезе линейного суммирования повреждения в деформационной трактовке

$$\omega_{\Sigma} = \omega + \omega = \omega$$

предполагается, что усталостное повреждение ω связано со знакопеременным пластическим течением материала [4]:

$$\Delta\omega = \int_0^{\Delta\varepsilon_p} D_p^+ \varepsilon_{p*}^m d\varepsilon_{p*} + \int_0^{\Delta\varepsilon_p} D_p^- \varepsilon_{p*}^m d\varepsilon_{p*},$$

где ε_p – пластическая деформация; $\Delta\varepsilon_p$ – размах пластической деформации в цикле; ε_{p*} – изменение пластической деформации с момента последнего реверса процесса деформирования (изменения знака скорости деформации); m , D_p^+ , D_p^- – постоянные материала.

В рассматриваемых условиях последнее выражение сводится к известной формуле Мэнсона–Кофина, если принять $\omega_0 = 1$. Квазистатическое повреждение ω определяется односторонне накопленной деформацией:

$$\omega_0 = \frac{\varepsilon_p^{\text{пик}}}{\varepsilon_f},$$

где ε_f – ресурс пластичности материала.

Таким образом, исходными данными для расчета текущего повреждения и в итоге оценки долговечности являются результаты расчета кинетики напряженно-деформированного состояния в ряде представительных (обычно, наиболее нагруженных) точек. Последний производили с привлечением обобщенного принципа подобия [3].

Модельный технологический цикл (СПО_М) включал три полных знакопостоянных (отнулевых) цикла изгиба в режиме жесткого нагружения (один – с кривизной, соответствующей радиусу барабана, остальные два – радиусу направляющей дуги). Расчеты показывают, что стабилизация процесса деформирования в рамках принятой модели материала происходит уже во втором технологическом цикле. Таким образом, повреждение в опасных точках, накопленное к моменту разрушения, составит

$$\omega_{\Sigma} = \omega_0 + N_f^{\text{СПО}} \Delta\omega,$$

где ω_0 – повреждение в первом нестабильном технологическом цикле; $\Delta\omega$ – повреждение во всех остальных СПО_М; $N_f^{\text{СПО}}$ – долговечность, выраженная в циклах СПО_М.

При нагружении по такой программе квазистатическое повреждение ω отсутствует, поскольку одностороннего накопления деформации не происходит.

В стендовых испытаниях на установке ОАО «Уралтрубмаш» (рис. 2) было реализовано жесткое знакопеременное симметричное нагружение отрезка трубы достаточной длины по следующей программе: изгиб до максимально допустимой установкой деформации, распрямление в исходное положение, изгиб в противоположном направлении до равной по модулю деформации обратного знака, распрямление. Следует отметить, что данная схема нагружения является более жесткой (в смысле повреждения), чем в случае модельного СПО_М.

Для расчета накопленного повреждения необходимо располагать циклическими деформационными (параметры кривой циклического деформирования и циклической кривой, циклический предел пропорциональности) и прочностными (предел текучести, временное сопротивление, истинное сопротивление разрыву, а также параметры кривой малоциклового усталости) характеристиками стали, которые получают экспериментально.

В связи с отсутствием необходимых опытных данных требуемые величины были определены приближенно – по характеристикам статической прочности и пластичности. Для описания кривой усталости использовали «уравнение универсальных наклонов» Мэнсона–Лэнджера, аппроксимацию кривой статического деформирования производили по Рамбергу–Осгуду степенной зависимостью вида

$$\bar{\sigma} = K e_p^n,$$

где $\bar{\sigma} = \sigma \exp(e)$ – истинное напряжение; e , e_p – полная и пластическая логарифмическая деформации; $e = \ln(1 + \varepsilon)$, $e_p = \ln(1 + \varepsilon_p)$, при $\varepsilon_p \leq 10\%$ можно считать, что $e_p = \varepsilon_p$ (максимальное отличие

не превышает 0,5 %); K и n – коэффициент прочности и показатель упрочнения (константы материала в данных условиях, порядок их определения изложен в учебном пособии [5]).

Полная деформация трубы при изгибе её по некоторому радиусу $\left(\frac{D_b}{2}\right)$ определяется известными соотношениями:

$$\varepsilon = \frac{y}{\rho}, \quad y = \frac{1}{2}D, \quad \rho = \frac{D_b}{2} + \frac{D+d}{4}.$$

Здесь D и d – наружный и внутренний диаметры трубы; D_b – диаметр элемента, задающего кривизну (диаметр барабана или направляющей дуги); ρ – радиус кривизны нейтральной линии; ε – полная деформация трубы.

Таким образом, зная параметры функции, описывающей статическую кривую,

решением уравнения $\frac{K\varepsilon_p^n}{E} + \varepsilon_p = \varepsilon$ можно найти неупругую составляющую полной деформации.

При повторном нагружении кривая циклического деформирования – кривая деформирования в цикле – в соответствии с принципом Мазинга представляет «удвоенную» начальную кривую:

$$\bar{\sigma} = 2K\left(\frac{\varepsilon_p}{2}\right)^n, \quad \text{соответственно } \varepsilon = 2\frac{K}{E}\left(\frac{\varepsilon_p}{2}\right)^n + \varepsilon_p.$$

В условиях сложного напряженного состояния, например, во время подачи технологического раствора или воздуха под давлением следует использовать так называемую обобщенную кривую деформирования $\sigma_{ii} = K'\varepsilon_{pi}^{n'}$, записанную в интенсивностях соответствующих величин [5]. Подбором коэффициентов в выражениях для интенсивности напряжения и неупругой деформации можно добиться совпадения констант K и K' , n и n' .

Исследованию был подвергнут бунт № 257 с размером трубы 38,1×3,4 мм. Механические свойства стали соответствуют минимальным величинам для класса прочности СТ80 согласно ТУ на ГНКТ (гибкие насосно-компрессорные трубы) производства ОАО «Уралтрубмаш»: $\sigma_{0.2} = 607$ МПа, $\sigma_b = 550$ МПа и $\delta_5 = 28$ %. Относительное сужение после разрыва измерялось в процессе контроля механических свойств бунта ($\psi = 61$ %).

Сопоставление расчетных и полученных в результате испытаний на стенде при ряде значений давления чисел циклов до разрушения представлено на рис. 3. Как видно, в диапазоне давлений от 10 МПа и выше наблюдается вполне удовлетворительное соответствие результатов. При давлении свыше 13 МПа – область наиболее актуальных значений – долговечность определяется с ошибкой «в запас». При относительно небольших величинах давления (до 13 МПа) модель на основе приближенных деформационных и прочностных характеристик даст завышенный прогноз, при этом погрешность нарастает с уменьшением давления.

Пересчет по критерию равенства накопленного повреждения числа циклов до разрушения трубы-образца класса прочности СТ80, зафиксированного в ходе стендовых испытаний, позволил сделать прогноз в отношении ресурса трубы при её эксплуатации в условиях принятого технологического цикла (рис. 4). Как видно, по мере увеличения давления от нуля до 30 МПа число циклов СПО_М снижается более чем вдвое (от 330 до 150).

Сопоставлением числа СПО_М – $N_f^{СПО}$, которое гибкая труба отработает в условиях модельного технологического цикла, и количества циклов знакопеременного изгиба (N_f), полученных на испытательной установке, была установлена корреляция этих параметров, позволяющая давать обоснованную оценку эксплуатационных качеств гибкой трубы по данным стендовых испытаний

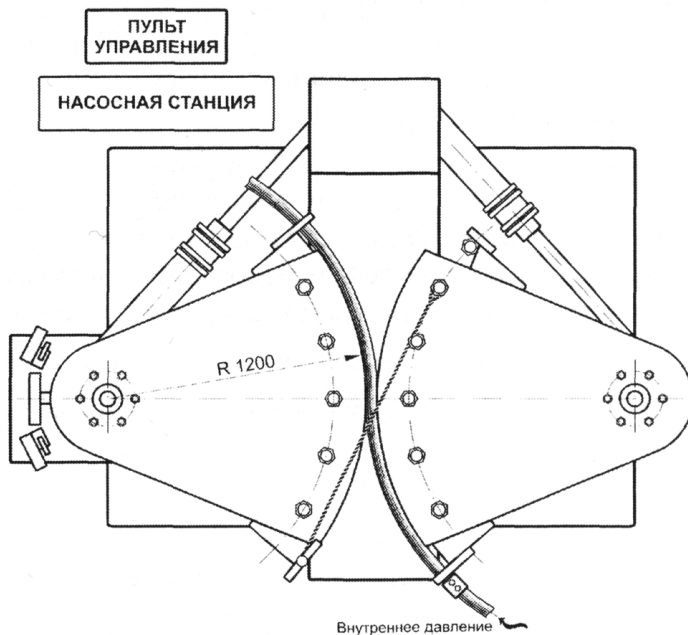


Рис. 2. Схема испытательного стенда ОАО «Уралтрубмаш», реализующего циклический знакопеременный изгиб трубчатого образца, вырезанного из исследуемой трубы

(рис. 5). Полученную зависимость с учетом объективного разброса результатов допустимо аппроксимировать линейной функцией вида

$$N_f^{СПО} = 0,66 N_f + 113.$$

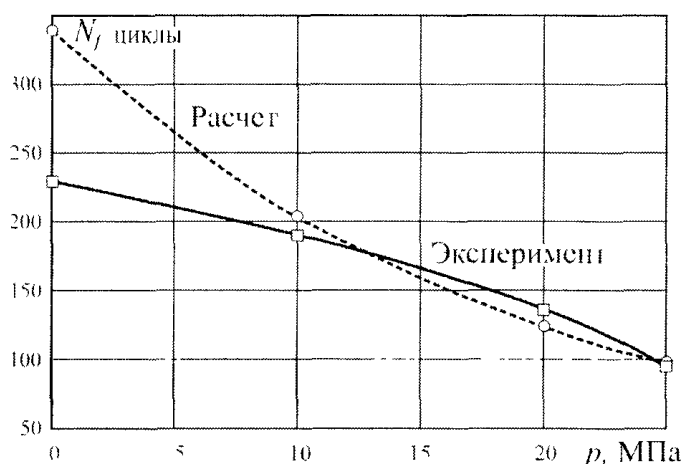


Рис. 3. Значения расчетной и полученной в результате стендовых испытаний долговечности в зависимости от величины внутреннего давления

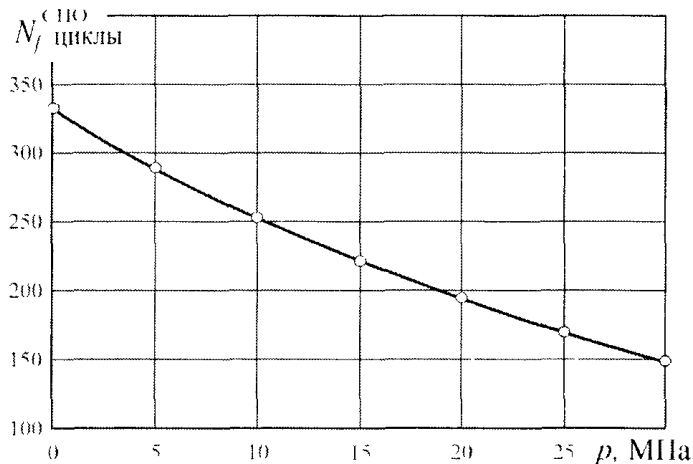


Рис. 4. Зависимость количества модельных технологических циклов (СПО_м) от величины внутреннего давления

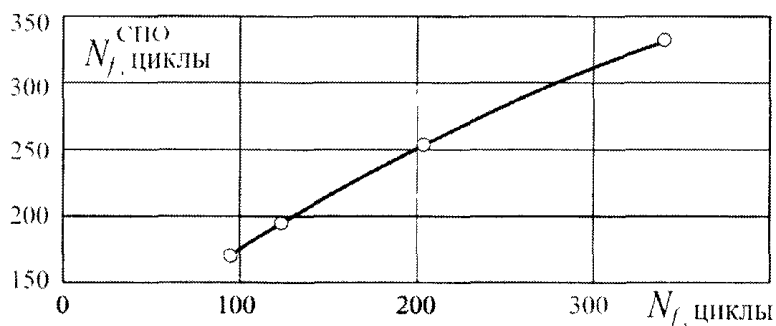


Рис. 5. Связь числа модельных технологических циклов (СПО_м) и долговечности трубы-образца в стендовых испытаниях

Авторы отдают себе отчет в том, что даже такой, основанный на эквивалентных испытаниях реального объекта подход к оценке ресурса колтюбинга носит приближенный характер, поскольку учесть всевозможные случайные повреждения поверхности гибкой трубы в процессе эксплуатации: ее искривление или застревание в скважине и тому подобные обстоятельства, практически невозможно. Поэтому неотъемлемым элементом обеспечения надежности гибких длинномерных насосно-компрессорных труб является систематический мониторинг состояния колтюбинга.

Литература

1. Recommended Practice for CT Fatigue Testing, 2009. – <http://www.mycommittees.api.org>.
2. Кузнецов, Н.Д. Эквивалентные испытания газотурбинных двигателей / Н.Д. Кузнецов, В.И. Цейтлин. – М.: Машиностроение, 1976. – 214 с.
3. Гохфельд, Д.А. Пластичность и ползучесть элементов конструкций при повторных нагружениях / Д.А. Гохфельд, О.С. Садаков. – М.: Машиностроение, 1984. – 256 с.
4. Порошин, В.Б. Влияние формы цикла деформирования на накопление повреждения при различных типах малоциклового нагружения с выдержками / В.Б. Порошин // Проблемы прочности. – 1988. – № 1. – С. 38–43.
5. Кононов, К.М. Критерии прочности материалов при статическом нагружении: учебное пособие / К.М. Кононов, В.Б. Порошин. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2011. – 31 с.

Поступила в редакцию 14 сентября 2012 г.

ESTIMATION OF LONG COILED TUBING DURABILITY

A.V. Brylkin¹, V.B. Buksbaum², K.I. Kolesnikov³, V.B. Poroshin⁴, M.V. Usova⁵

The technique of accelerated resource (equivalent) testing for long coiled tubes is considered. It is based on the kinetic model of damage accumulation. It is noted that to ensure the adequacy of the proposed approach, deformation and strength properties of the material must be obtained under cyclic loading conditions. Relating to the technology of coiled tubing, life prediction is made for the model technological cycle based on the results of bench tests on the JSC «Uraltrubmash» equipment.

Keywords: coiled tubing, long coiled tube, cyclic deformation and strength material properties, damage accumulation, accelerated resource (equivalent) tests, durability prediction for any technological cycle.

References

1. Recommended Practice for CT Fatigue Testing, 2009. <http://www.mycommittees.api.org>.
2. Kuznetsov N.D., Cejltlin V.I. *Ehkivalentnye ispytaniya gazoturbinnnykh dvigatelej* (Equivalent testing for gas-turbine engine). Moscow: Mashinostroenie, 1976. 214 p. (in Russ.).
3. Gokhfel'd D.A., Sadakov O.S. *Plastichnost' i polzuchest' ehlementov konstrukcij pri povtornykh nagruzhenijakh* (Plasticity and creep of the structural components under repeated loading). Moscow: Mashinostroenie, 1984. 256 p. (in Russ.).
4. Poroshin V.B. *Problemy prochnosti*. 1988. no. 1. pp. 38–43. (in Russ.).
5. Kononov K.M., Poroshin V.B. *Kriterii prochnosti materialov pri staticheskom nagruzhении: uchebnoe posobie* (Criteria for strength of materials at static loading: training manual). Cheljabinsk: Izd-vo YuUrGU, 2011. 31 p. (in Russ.).

¹ Brylkin Andrey Vladislavovich is Commercial Director of JSC «Uraltrubmash», Chelyabinsk.
E-mail: abrylkin@utbm.ru

² Buksbaum Victor Borisovich is Cand. Sc. (Engineering), Chief of Technical Department of JSC «Uraltrubmash», Chelyabinsk.
E-mail: vbuksbaum@utbm.ru

³ Kolesnikov Konstantin Ivanovich is Deputy of Commercial Director of JSC «Uraltrubmash», Chelyabinsk.
E-mail: kkolesnikov@utbm.ru

⁴ Poroshin Vadim Borisovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South Ural State University.
E-mail: poroshin2816@mail.ru

⁵ Usova Maria Viktorovna is Industrial engineer of JSC «Uraltrubmash», Chelyabinsk.
E-mail: usova-rabochiy@yandex.ru

К ВОПРОСУ О ДВИЖЕНИИ АТОМОВ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СРЕДАХ

А.Г. Воронцов¹

Методом молекулярной динамики изучены автокорреляционные функции скоростей в системе твердых сфер и системе Леннард-Джонса. Основное внимание уделено особенностям движения атомов в жидкостях низкой плотности и сверхкритических флюидах. Обсуждается вопрос о разделении неупорядоченных систем на плотные и рыхлые.

Ключевые слова: жидкое и флюидное состояние, движение атомов.

Введение

Вопрос о структуре жидкостей и ее изменении при нагреве от тройной точки до критической точки остается дискуссионным до сих пор. Ученые, занимавшиеся свойствами жидкостей, конденсированных из газа, находили жидкость похожей на плотный газ (Ван-дер-Ваальс [1], Стюарт [2]). В то же время исследования жидкостей, полученных при плавлении материалов, например жидкой ртути, дало основание считать жидкость разупорядоченным кристаллом. Этой точки зрения придерживались Дебай [3] и Френкель [4], подтверждая ее сходными свойствами кристалла и жидкости: плотности, электро- и теплопроводности и т.д., а также сходными структурными характеристиками, например структурным фактором. На сегодняшний день исследователи простых жидкостей, к которым в первую очередь относят расплавы металлов, склоняются к точке зрения Дебая–Френкеля, однако признают, что при высоких температурах в расплавах происходят изменения, суммарное действие которых таково, что такая жидкость не может сравниваться с кристаллом. Под простой жидкостью понимаются жидкости взаимодействия атомов, в которых ненаправленное насыщение и может быть описано в терминах парных взаимодействий.

На сегодняшний день не существует единой теории, описывающей неупорядоченное состояние вещества (плотные газы, жидкости, сверхкритических флюиды), так как приближения, которые используются для некоторой области состояний, оказываются неприменимы для других областей. Ситуация усугубляется тем, что нет четкого ответа на вопросы о существовании границ, разделяющих состояния неупорядоченной системы в однофазной области при движении вокруг критической точки, об их расположении на фазовой диаграмме и природе изменений, происходящих на них. Из общих соображений статистической физики понятно, что переходы, если они существуют, должны сопровождаться изменением свойств фазового пространства системы. Т.е. неупорядоченные системы могут отличаться друг от друга по степени порядка, а возникновение более сильных корреляций можно классифицировать по уменьшению объема фазового пространства системы, которое появляется за счет наложения каких-либо ограничений на фазовые переменные при изменении плотности или температуры. Например, абсолютно некоррелированные фазовые переменные (координаты и скорости частиц) у идеального газа постепенно переходят в коррелированное состояние при увеличении плотности системы, образуя жидкое состояние.

Простейшей моделью конденсированного состояния, в которой появляются корреляции фазовых переменных, является модель Ван-дер-Ваальса [1]. Учет объема молекул и некоторого притяжения между ними приводит к появлению газовой и жидкостной области на фазовой диаграмме, т.е. физически корректному (качественно) изменению фазового пространства при изменении плотности / температуры системы. Модификации модели Ван-дер-Ваальса привели к появлению модели твердых сфер, в рамках которой могут быть описаны кристаллизация и аморфизация системы [5]. В системе твердых сфер неупорядоченная область состояний при плотностях упаковки (доля объема, заполненная сферами) менее плотности кристаллизации является однофазным неупорядоченным состоянием – флюидом. При плотности упаковки менее 0,49 не найдено особенностей ни на кривой сжимаемости [5], ни в поведении параметров ориентационного и

¹ Воронцов Александр Геннадьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: sas@physics.susu.ac.ru

трансляционного порядка [6]. Это говорит о том, что координатная часть фазового пространства в области флюидного состояния изменяется монотонно, без резкого появления корреляций. Про импульсную часть фазового пространства такого, по-видимому, сказать нельзя.

Импульсная часть фазового пространства может быть изучена через автокорреляционную функцию скоростей: $C_v(t) = \langle (\bar{v}_i(0) \cdot \bar{v}_i(t)) \rangle / \langle v_i^2(0) \rangle$, где угловые скобки означают усреднение по ансамблю. Случаю некоррелированного движения частиц отвечает экспоненциальное спадание $C_v(t)$, которое соответствует броуновскому движению частиц (модель Эйнштейна) или модели движения тела (молекулы) в вязкой среде с силой трения пропорциональной скорости (модель Стокса). Однако было установлено [7], что автокорреляционные функции скоростей в молекулярных моделях затухают экспоненциально только в пределе малой плотности. При отличных от нуля плотностях автокорреляционная функция скорости для больших времен спадает по степенному закону, который был объяснен Олдером и Вайнрайтом [8] на основе гидродинамической модели вязкой среды. Они нашли, что из-за возникновения вихревых течений автокорреляционная функция скорости спадает в данной модели по степенному закону с показателем $-3/2$ (для 3-мерного случая), что и было подтверждено моделированием. Кроме того, отклонение от экспоненциального закона имело немонотонный характер. Максимальное интегральное отклонение, найденное по разнице теоретического и модельного коэффициентов диффузии, наблюдалось для плотности упаковки порядка 0,3 [7]. При плотностях упаковки более 0,3 корреляционная функция изменяла свой вид, приобретая минимум, который при плотностях более 0,4 переходил в область отрицательных значений [7]. В этом случае результат столкновения перестает быть случайным и скорее соответствует «рассеянию назад», впервые рассмотренного в работе [9]. Рассеяние назад – это начальное проявление так называемого «эффекта клетки», когда окружение атома становится достаточно плотным и атом «запирается» в некоторой области пространства. По-видимому, перечисленные изменения вызваны появлением корреляций в импульсной части фазового пространства, т.е. изменением характера индивидуальных движений частиц и появлением коллективных движений (гидродинамических течений).

Работы по изучению автокорреляционных функций системы твердых сфер и систем с модельными потенциалами не прекращаются более сорока лет (см. например [10–12]), однако они сосредоточены на обсуждении плотных жидкостей, вблизи перехода жидкость – твердое тело. В нашей работе внимание уделено области промежуточных состояний и обсуждается возможность разделения неупорядоченных систем на плотные и разряженные. Целью данной работы было исследование изменения в характере движения частиц простой жидкости при низких плотностях на моделях, представляющих: флюидное состояние системы твердых сфер, жидкое и флюидное состояние системы с потенциалом Леннарда-Джонса.

Модель твердых сфер

Для получения $C_v(t)$ в модели твердых сфер была использована система из 4000 частиц, которая исследовалась с шагом 0,025–0,05 на протяжении 500–5000 временных единиц. Единица времени при моделировании – это диаметр сферы, отнесенный к средней скорости теплового движения. За время моделирования в системе происходило 10^6 – 10^8 столкновений между атомами. Разная длительность моделирования и шаг записи данных выбирались для исследования систем с разной плотностью упаковки. Из полученных данных выбирались участки в 5–15 временных единиц, для которых вычислялась автокорреляционная функция, затем проводилось усреднение. Было усреднено порядка 20 000 автокорреляционных функций. Полученные результаты представлены на рис. 1.

Исследования начальных участков автокорреляционных функций показало, что они имеют экспоненциальную зависимость с характерным временем релаксации пропорциональным времени свободного пробега для данной плотности упаковки. После нормировки времени на $\tau = \sqrt{3} \tau_{free}$, где τ_{free} – среднее время свободного пробега, полученное при моделировании для данной плотности, все графики имеют совпадающие начальные участки (рис. 2, 3). Это показывает, что первоначальное экспоненциальное уменьшение автокорреляционных функций происходит за счёт случайных столкновений и определяется их частотой.

На рис. 2 масштабированные графики автокорреляционных функций приведены в логарифмическом масштабе, который позволяет увидеть их отклонения от прямой, показывающей закон экспоненциального затухания. Можно отметить, что отклонение от экспоненциального закона при больших временах растут для плотностей упаковки от 0 до 0,3, достигая при 0,3 своего максимального значения. При увеличении плотности выше 0,3 автокорреляционные функции, не изменяя своего асимптотического поведения при больших временах, приближаются к экспоненциальному закону при малых временах. При плотности упаковки выше 0,4 на рис. 2 хорошо видна область отрицательных значений функций (области разрывов), которая соответствует движению частицы в противоположном направлении после одного или нескольких столкновений. Впервые этот результат был получен Олдером и Вайнрайтом [8] и детально исследован в недавней работе Вильямса и др. [12]. При данных плотностях, по-видимому, становится оправданной модель плотной жидкости, предложенная Френкелем [4], в которой разделены собственные движения атома около положения равновесия и смещение точки этого равновесия при течении жидкости.

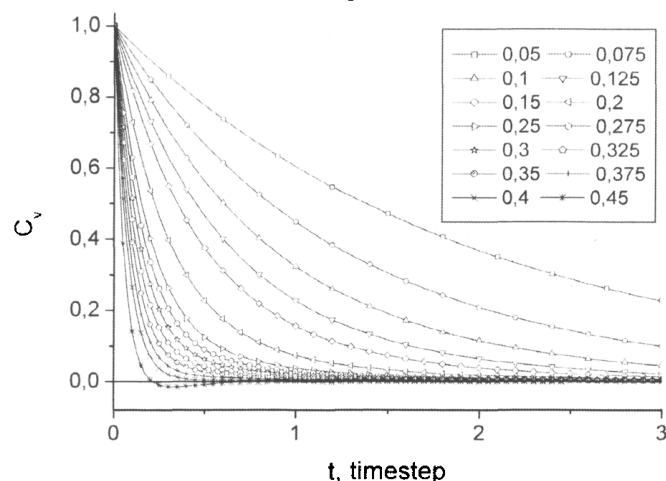


Рис. 1. Автокорреляционные функции скоростей частиц в системе твердых сфер для разных плотностей упаковки. Время измерено в единицах времени модели

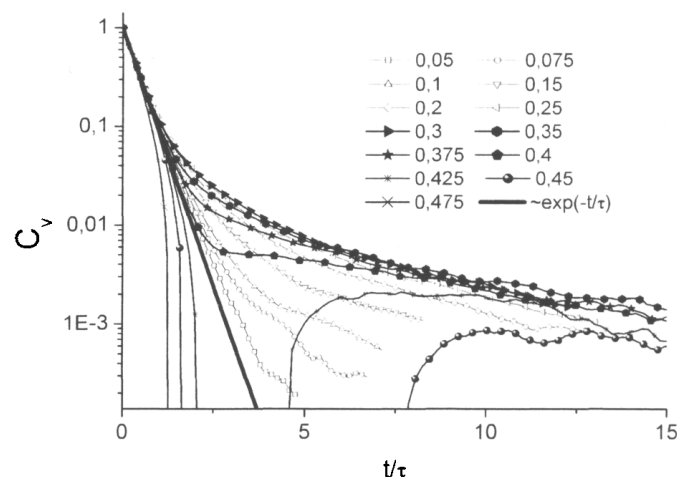


Рис. 2. Зависимость автокорреляционных функций скоростей частиц в системе твердых сфер для разных плотностей упаковки от приведенного времени. Жирная линия — экспоненциальный закон затухания

На рис. 3 представлены масштабированные автокорреляционные функции скоростей в двойных логарифмических координатах. В данном масштабе степенные зависимости имеют вид прямых, что удобно при изучении автокорреляционных функций при больших временах. Можно заметить, что все функции в пределе больших времен выходят на степенную зависимость с показателем $-3/2$, однако для низких плотностей это происходит при чрезвычайно малых значениях корреляционных функций, около 10^{-3} – 10^{-4} относительно начального их значения. Наблюдение малых значений автокорреляционных функций при больших t требует значительного увеличения статистики. Например, для получения данных при плотности упаковки 0,05 с точностью, показанной на рис. 3, потребовалось усреднение по $5 \cdot 10^8$ функциям. Наиболее быстро появление степенной зависимости у автокорреляционной функции, т.е. гидродинамического течения, описанного Олдером [8], происходит при плотности упаковки 0,3. Вид функций при плотностях менее 0,3 может быть описан в рамках простой модели, включающей 2 фактора: случайные столкновения (диффузионный механизм) и гидродинамическое течение (см. например [13]). При больших плотностях выпуклость вниз, появляющаяся на графиках может объясняться только дополнительным предположением о появлении корреляций, связанных с неизотропностью рассеяния частиц при столкновениях. Неизотропность рассеяния показывает наличие сильных тройных корреляций, так как два последовательных столкновения некоторой частицы происходят с частицами уже коррелированными друг с другом, что даст неслучайный результат. Несмотря на это при плотностях 0,3–0,4 гидродинамическая составляющая движения частиц остается высокой и все графики имеют единую асимптотику.

Модель с потенциалом Леннард-Джонса

Для модельной системы с потенциалом Леннард-Джонса автокорреляционные функции скорости при разных плотностях были изучены в многочисленных работах, из которых стоит выделить пионерскую работу Рамана [10] и наиболее точную недавнюю работу Мейсера и др. [11]. Мы

провели дополнительное исследование в области жидкости низкой плотности и сверхкритического флюида, так как существование максимума отклонения автокорреляционной функции от экспоненциального закона и возрастающая роль тройных флуктуаций представляется весьма интересными. Для системы с потенциалом Леннарда-Джонса автокорреляционные функции скорости при разных плотностях были построены для температур 1,3 и 3 (в единицах Леннарда-Джонса). Форма кривых соответствовала результатам работ Рамана [10] и Мейера и др. [11] и была сходна с кривыми для системы твердых сфер за исключением начального участка, который не являлся экспоненциальным. Мы уделили внимание точкам, в которых автокорреляционные функции начинают приобретать минимум в двойных логарифмических координатах, что соответствует появлению корреляций в движении частиц, отличного от традиционного диффузионного и гидродинамического механизмов (см. рис. 3 для системы твердых сфер). Методика проведения расчетов и оценки данных совпадала с таковой для системы твердых сфер. На рис. 4 показана фазовая диаграмма системы Леннарда-Джонса и конечный результат моделирования – положение найденных точек появления корреляций (звезды) вместе с интервалами ошибок. Для системы с потенциалом Леннарда-Джонса положение перехода зависит от температуры и образует линию на фазовой диаграмме (сплошная линия). В связи с трудоемкостью расчетов, положение данной линии было оценено всего по двум значениям. Сопоставляя результаты системы Леннарда-Джонса с результатами для системы твердых сфер, можно предположить, что данная линия соответствует эффективной плотности упаковки около 0,3, а ее наклон определяет изменение эффективного радиуса атомов при изменении температуры.

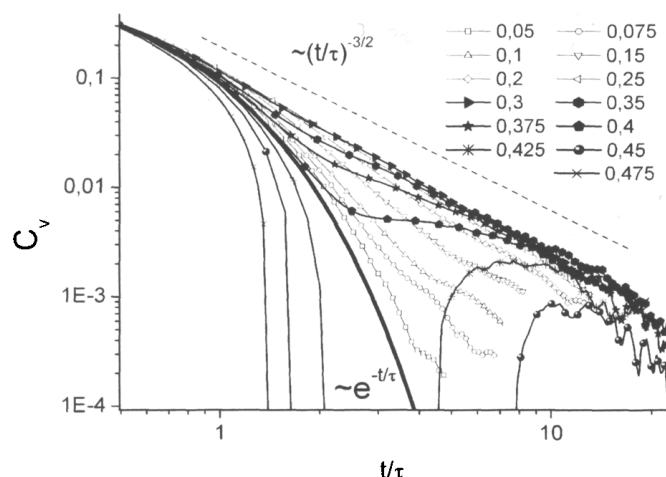


Рис. 3. Зависимость автокорреляционных функций скоростей частиц в системе твердых сфер для разных плотностей упаковки от приведенного времени. Жирная линия – экспоненциальный закон затухания, пунктирная линия – наклон прямых, соответствующих затуханию со степенью – 3/2

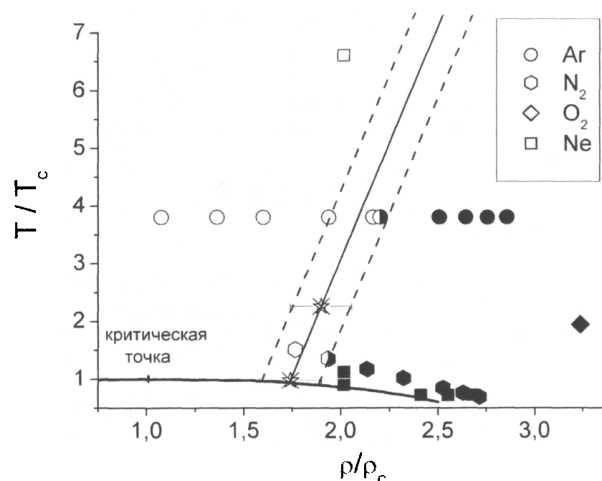


Рис. 4. Кривая сосуществования жидкость–пар и данные по аномальной дисперсии звука в неметаллических системах из работ [14, 15] и ссылок в них. Закрашенные знаки – состояния с аномальной дисперсией звука, не закрашенные знаки – состояния с нормальной дисперсией звука. Звездочки – данные моделирования. Сплошная линия – граница изменения режима движения атома, пунктирные линии – область ошибки

В работах [14, 15] приведены систематизированные экспериментальные данные по распространению звука в системах, описываемых потенциалом Леннарда-Джонса. Найдено, что характерным признаком плотной системы (жидкости, плотного сверхкритического флюида) является наличие аномальной положительной дисперсии звука. В разреженных системах газов, сверхкритическом флюиде малой плотности) данное явление не наблюдается. Это дало основание говорить [15], что наличие / отсутствие аномальной положительной дисперсии является критерием разделения жидкоподобного и газоподобного флюида. Авторы работы [15] полагают, что линия разделения является линией Видома, выходящей из критической точки. Однако результаты, показанные на рис. 3 дают основание считать, что наличие / отсутствие положительной аномальной дисперсии звука, скорее разделяет область плотной жидкости и рыхлой жидкости (плотного флюида и рыхлого флюида) и не связано с переходом жидкость–пар. На рис. 4 приведены данные по аномальной положительной дисперсии звука из работ [14, 15] и ссылок в них. Состояния системы определялись по базе данных NIST [16]. Из рис. 4 видно наличие хорошего совпадения между аномальной положительной дисперсией звука и появлением в системе тройных корреляций.

Появление тройных корреляций наблюдается как для системы Леннарда-Джонса, так и для твердых сфер, т.е. скорее эффект появления аномальной положительной дисперсии звука связан с уплотнением системы и определяется движением остовов атомов. Таким образом, тип движения атомов и дисперсия звука позволяют указать область, разделяющую плотные жидкости (вблизи температуры плавления), и рыхлые жидкости, существующие в предкритической области. Повидимому поведение системы в области плотных жидкостей определяется отталкивательной частью потенциала, что позволяет использовать модели твердых сфер при описании этих состояний. В области рыхлой жидкости начинает существенно влиять притягивательная часть потенциала, что позволяет для систем с одинаковым типом притягивательного потенциала использовать закон соответственных состояний.

Выводы

На основе анализа автокорреляционных функции скорости найдено, что в системе твердых сфер при плотностях упаковки более 0,3 возникают временные корреляции в движении атомов, связанные с возрастающей ролью тройных корреляций в системе. Для системы Леннарда-Джонса появление таких корреляций соответствует области жидкой фазы и флюидного состояния и может считаться границей, разделяющей плотные и рыхлые неупорядоченные системы.

Литература

1. Ван-дер-Ваальс, И.Д. Курс термостатики / И.Д. Ван-дер-Ваальс, Ф. Констамм. – М.:ОНТИ, 1936. – 452 с.
2. Stewart, G.W. X-Ray Diffraction in Liquids / G.W. Stewart // *Rev. Mod. Phys.* – 1930. – Vol. 2. – P. 116–122.
3. Дебай, П. Квазикристаллическая структура жидкостей / П. Дебай // *Успехи физических наук.* – 1939. – Т. 21, № 2. – С. 120–129.
4. Френкель, Я.И. Кинетическая теория жидкостей: Собр. избр. тр. / Я.И. Френкель – М.: Изд-во АН СССР, 1959. – Т. 3. – 460 с.
5. Speedy, R. Hard-sphere fluid equation of state / R. Speedy // *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2.* – 1979. – Vol. 75. – P. 1643–1647.
6. Torquato, S. Is random close packing of spheres well defined? / S. Torquato, T. Truskett, P. Debenedetti // *Physical Review Letters.* – 2000. – V. 84, № 10. – P. 2064–2067.
7. Alder, B.J. Velocity autocorrelations for hard spheres / B.J. Alder, T.E. Wainwright // *Physical review letters.* – 1967. – V. 18. – P. 988–990.
8. Alder, B.J. Decay of the velocity autocorrelation function / B.J. Alder, T.E. Wainwright // *Physical review A.* – 1970. – V. 1. – P. 18.
9. Dymond, J. Van der Waals theory of transport in dense fluids / J. Dymond, B. Alder // *The Journal of Chemical Physics.* – 1966. – V. 45. – P. 2061–2068.
10. Rahman, A. Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon / A. Rahman // *Phys. Rev. A.* – 1964. – V. 136. – P. 405–411.
11. Meier, K. Transport coefficients of the Lennard-Jones model fluid. II Self-diffusion. / K. Meier, A. Laesecke, S. Kabelac // *The Journal of chemical physics.* – 2004. – V. 121. – P. 9526.
12. Velocity autocorrelation functions of hard-sphere fluids: long-time tails upon undercooling / S.R. Williams, G. Bryant, I.K. Snook, W. van Meegen // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – V. 96. – P. 087801.
13. On the nonclassical diffusion of molecules of liquid and dense gases / V.Y. Rudyak, A.A. Belkin, D.A. Ivanov, V.V. Egorov // *Doklady Physics.* – 2007. – V. 52, № 2. – P. 115–118.
14. Liquidlike behavior of supercritical fluids / F. Gorelli, M. Santoro, T. Scopigno *et al.* // *Physical Review Letters.* – 2006. – V. 97. – P. 245702.
15. The Widom line as the crossover between liquid-like and gas-like behaviour in supercritical fluids / G. Simoni, T. Bryk, F. Gorelli *et al.* // *Nature Physics.* – 2010. – V. 6, № 7. – P. 503–507.
16. NIST chemistry webbook // <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

Поступила в редакцию 22 сентября 2012 г.

ON THE ATOMIC MOVEMENT IN DISORDERED MATTER

A.G. Vorontsov¹

Velocity autocorrelation functions of hard sphere fluid and Lennard-Jones liquid were studied by molecular dynamic simulation. Different types of atomic movement in liquid and fluid are investigated. The question of separation of dense and loose disordered systems was discussed.

Keywords: liquid and fluid, atomic movement.

References

1. Van-der-Vaal's I. D., Konstamm F. *Kurs termostatiki* (Course of Thermostatistics). Moscow: ONTI, 1936. 452 p. (in Russ.).
2. Stewart G.W. X-Ray Diffraction in Liquids. *Rev. Mod. Phys.* 1930. Vol. 2. pp. 116–122.
3. Debai P. Kvazikristallicheskaia struktura zhidkosti (Quasicrystalline structure of liquids). *Uspekhi fizicheskikh nauk*. 1939. Vol. 21. no. 2. pp. 120–129. (in Russ.).
4. Frenkel' Ya.I. *Kineticheskaya teoriya zhidkosti: Sobr. izbr. tr.* (Kinetic Theory of Liquids: A coll. of works) Moscow: Izd-vo AN SSSR, 1959. Vol. 3. 460 p.
5. Speedy R. Hard-sphere fluid equation of state. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2*. 1979. Vol. 75. pp. 1643–1647. DOI: 10.1039/F29797501643
6. Torquato S., Truskett T., Debenedetti P. Is random close packing of spheres well defined? *Physical Review Letters*. 2000. Vol. 84, no. 10. pp. 2064–2067.
7. Alder B.J., Wainwright T.E. Velocity autocorrelations for hard spheres. *Physical review letters*. 1967. Vol. 18. pp. 988–990.
8. Alder B.J., Wainwright T.E. Decay of the velocity autocorrelation function. *Physical review A*. 1970. Vol. 1. p. 18.
9. Dymond J., Alder B. Van der Waals theory of transport in dense fluids. *The Journal of Chemical Physics*. 1966. Vol. 45. pp. 2061–2068.
10. Rahman A. Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon. *Phys. Rev. A*. 1964. Vol. 136. pp. 405–411.
11. Meier K., Laesecke A., Kabelac S. Transport coefficients of the Lennard-Jones model fluid. II Self-diffusion. *The Journal of chemical physics*. 2004. Vol. 121. p. 9526.
12. Williams S.R., Bryant G., Snook I.K., van Megen W. Velocity autocorrelation functions of hard-sphere fluids: long-time tails upon undercooling. *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 96. p. 087801.
13. Rudyak V.Y., Belkin A.A., Ivanov D.A., Egorov V.V. On the nonclassical diffusion of molecules of liquid and dense gases. *Doklady: a journal of the Russian Academy of Sciences. Physics*. 2007. Vol. 52., no. 2. pp. 115–118.
14. Gorelli F., Santoro M., Scopigno T., Krisch M., Ruocco G. Liquidlike behavior of supercritical fluids. *Physical Review Letters*. 2006. Vol. 97. pp. 245702.
15. Simeoni G., Bryk T., Gorelli F., Krisch M., Ruocco G., Santoro M., Scopigno T. The Widom line as the crossover between liquid-like and gas-like behaviour in supercritical fluids. *Nature Physics*. 2010. Vol. 6, no. 7. pp. 503–507.
16. NIST chemistry webbook // <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

¹ Vorontsov Alexander Gennadevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University
E-mail: sas@physics.susu.ac.ru

СПОСОБЫ УПРОЧНЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2\text{Nd}^{3+}$ Д.Е. Живулин¹, А.Н. Брызгалов², П.В. Волков³, В.М. Акимова⁴, Э.Н. Рыбина⁵

Рассмотрены два метода упрочнения кристаллов калий-гадолиниевого вольфрамата с примесью неодима $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2\text{Nd}^{3+}$. Один метод проявляется при малой концентрации примеси и основан на дислокационном механизме, другой – связан с образованием пластинчатой субструктуры и проявляется в кристаллах с большим содержанием примеси. Исследовано изменение твердости кристаллов в зависимости от концентрации примеси.

Ключевые слова: кристалл КГВ (калий-гадолиниевый вольфрамат), упрочнение, дефекты, примесь, субструктура, твердость.

Введение

На сегодняшний день важнейшей задачей квантовой электроники является расширение спектрального диапазона частот источников лазерного излучения. Кристаллы калий-гадолиниевого вольфрамата (КГВ) с примесью редкоземельных элементов широко используются в лазерной технике.

На исследуемых нами кристаллах, легированных примесью Nd^{3+} , получают эффекты вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) и спонтанного комбинационного рассеяния (СКР), в результате которого возникает когерентное излучение с частотой, сдвинутой относительно частоты основного излучения на величину, равную или кратную частоте молекулярного колебания вещества.

Указанные свойства зависят не только от совершенства кристаллов и распределения активной примеси, рассмотренных в работе [1], но и от механической прочности.

Структура вольфрамата на молекулярном уровне составлена ионами кислорода с гексагональной упаковкой в плоскости (010), в октаэдрических пустотах которых рядами располагаются через свободный ряд в направлении [001] ионы гадолиния, калия и вольфрама (рис. 1). Затем следует второй слой, в котором заполненные ряды октаэдров смещены на один ряд, а в третьем слое наблюдается структура первого слоя. Образуется трехслойный пакет, ограниченный плоскостями (100), (010) и (001), в состав которого входят три формульных единицы ионов: K-4, Gd-4, W-8, O-32.

Во время роста формируется кристалл с плоскостями (001), (100) и (010). Плоскость (010) является плоскостью спайности, а нарастание по ней происходит с максимальной скоростью.

Под действием упругих сил может происходить смещение октаэдров вдоль рядов по плоскости (100) в направлении [001]. В результате этого появляется лишняя полуплоскость (001) и образуется красная дислокация с вектором Бюргерса в направлении [001], линией дислокации в направлении [010] и плоскостью скольжения (100).

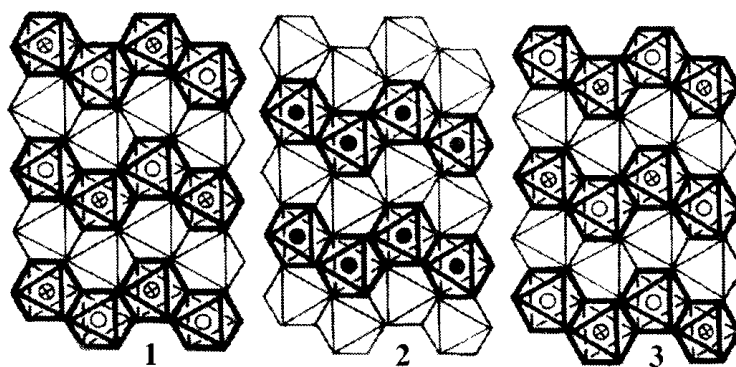


Рис. 1. Структура кристалла $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$ в послойном (1, 2, 3) представлении [4]

¹ Живулин Дмитрий Евгеньевич – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

E-mail: zhivulin-74@mail.ru

² Брызгалов Александр Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

E-mail: brizgalovan@cspsu.ru

³ Волков Петр Вячеславович – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

E-mail: peter-007@mail.ru

⁴ Акимова Вера Михайловна – кандидат физико-математических наук, сотрудник ООО «УСЭЖ».

E-mail: nehestno@mail.ru

⁵ Рыбина Эльвира Нафизовна – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

E-mail: elvirarybina@mail.ru

Исследование кристаллов

Для исследования использовались плоскопараллельные пластины КГВ размером 15х5х2 мм среза (010), выращенных раствор-расплавным методом, с различной концентрацией (1, 2, 3, 5 %) неодима в расплаве. Образцы подвергались гидротермальному травлению. В качестве травителя был использован 5 %-ный раствор КОН при давлении $p = 20$ атм и температуре $t = 200$ °С.

Поверхность образцов исследовалась при помощи интерференционного микроскопа МИИ-4 с увеличением х375.

Упрочнение кристаллов без примеси неодима основано на дислокационном механизме, где распространение слоев пластической деформации происходит по плоскости (010) в направлении [100]. Из (рис. 2) следует, что пластическая деформация зависит от величины приложенного напряжения.

На первом участке происходит образование и смещение слоя деформации, на втором линейном участке представлено распространение деформационного слоя с постоянной скоростью, на третьем – проявляется процесс торможения слоев деформации.

В основу механизма упрочнения положена теория Орована [2, 3], согласно которой фронт слоя деформации образован винтовыми дислокациями с вектором Бюргерса и линией дислокации одного направления (рис. 3).

Скорость перемещения относительной деформации можно оценить исходя из формулы $\dot{\epsilon} = b\rho v$, где $\dot{\epsilon}$ – скорость относительной деформации, ρ и v – плотность и скорость перемещения дислокации, b – вектор Бюргерса.

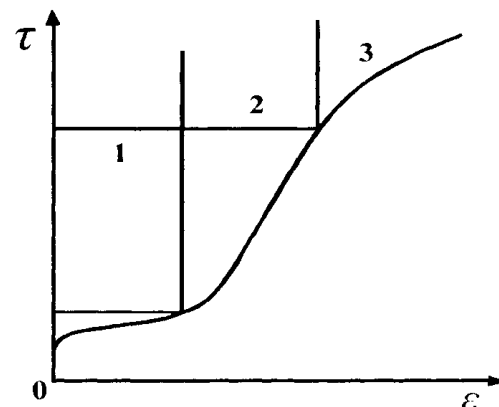


Рис. 2. Типичная кривая упрочнения кристаллов (схема). τ – напряжение сдвига, ϵ – сдвиговая деформация [3]

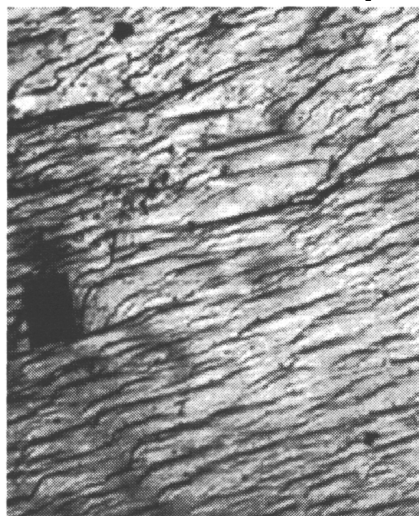


Рис. 3. Слои деформации плотностью $(5-8) \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}$, образованные совокупностью винтовых дислокаций. х375

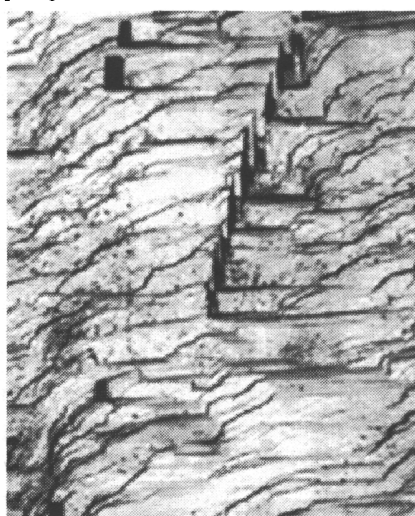


Рис. 4. Взаимодействие слоев деформации с отдельными краевыми дислокациями и стенкой дислокации. х375

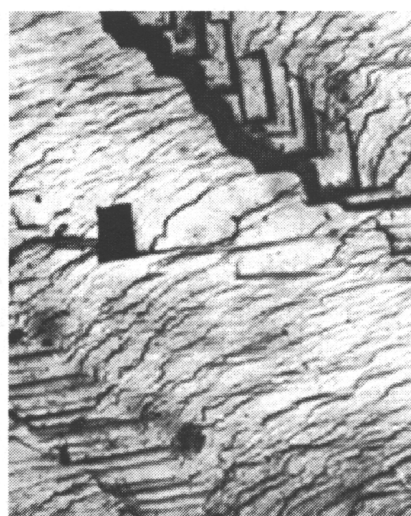


Рис. 5. Торможение слоев деформации на участках нарушенной поверхности. х375

Механические параметры кристаллов $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2\text{Nd}^{3+}$

Направление	[100]	[010]	[001]
Параметры элементарной ячейки, Å	8,098	10,417	7,583
Модуль Юнга G для пластинчатой структуры, ГПа	115,8	152,5	92,4

Напряжение, необходимое для образования слоев деформации, можно оценить по формуле (1) $\tau \approx 0,3 \text{ Н/м}^2$:

$$\tau = \frac{Gb}{2\pi r}, \quad (1)$$

Торможение слоев деформации происходит за счет взаимодействия с одиночными дефектами, такими как краевые дислокации и макроскопические включения, которые играют роль «стопоров». Их упругое напряжение рассчитывается, исходя из формулы (2) $\tau \approx 0,85 \text{ Н/м}^2$:

$$\tau = \frac{Gb}{D}, \quad (2)$$

где G – модуль Юнга, D – расстояние до дефекта или между смежными дефектами (точечными). Согласно Оровану [3], при достижении критического напряжения дислокационный сегмент расширяется и проходит мимо «стопора» (рис. 4).

Сила взаимодействия $F = b\tau D$. Радиус прогиба при прохождении между дефектами:

$$R = \frac{Gb}{2\tau}. \quad (3)$$

Две красвые дислокации с вектором Бюргерса одного знака при больших расстояниях между ними r взаимно отталкиваются. Однако, если $r \leq \sqrt{2}h$, они притягиваются, и положение их стабильно, когда они находятся в плоскости, перпендикулярной плоскости скольжения, где h – расстояние между плоскостями скольжения. Если знаки дислокаций разные, то они притягиваются при $r \geq \sqrt{2}h$ и отталкиваются при $r \leq \sqrt{2}h$. Пару дислокаций противоположного знака принято называть дислокационным диполем, и для его разрушения требуется приложить дополнительное напряжение:

$$\tau = \frac{Gb}{8\pi(1-\nu)h}. \quad (4)$$

Первый механизм упрочнения кристалла происходит за счет взаимодействия винтовой дислокации напряжением (1) с красвой $\tau = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}$ или с группой дислокаций $\tau = \frac{GbN}{8\pi(1-\nu)h}$. Дли-

на пути перемещения винтовой дислокации $\lambda = \sqrt{2} \frac{h}{b\pi}$. При взаимодействии с дефектами слои деформации резко меняют направление или тормозятся (рис. 5). Также среди отдельных дефектов встречается «лес» дислокаций – группы, у которых линии дислокаций пересекают плоскость (010) под разными углами.

При включении ионов примеси неодима Nd^{3+} увеличивается плотность красвых дислокаций и макроскопических включений, при этом границы деформации преобразуются в границы слоев роста и носят прямолинейный характер параллельно плоскости (100). На участках выхода красвых дислокаций и макроскопических примесей наблюдается смещение слоев (рис. 6).

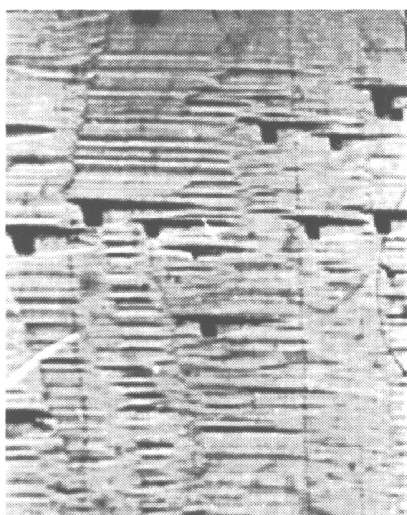


Рис. 6. Взаимодействие макровключений и краевых дислокаций со слоями роста на поверхности плоскости (010)

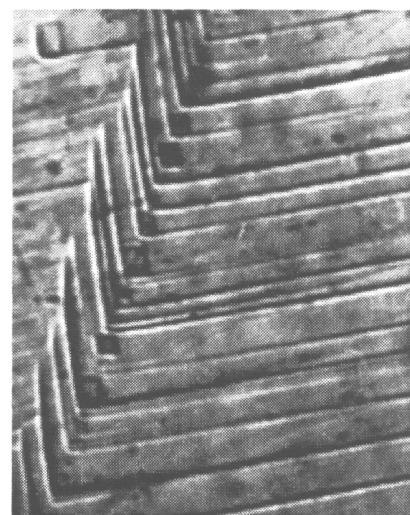
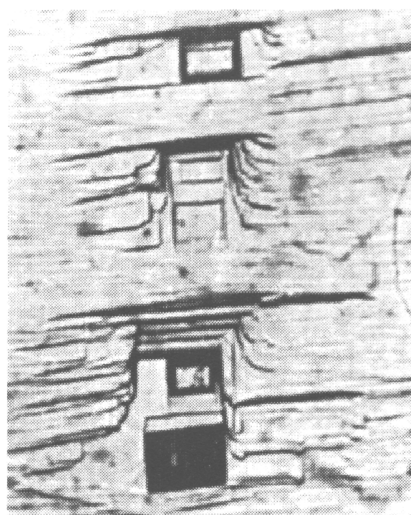


Рис. 7. Граница блока образованная стенками краевых дислокаций $\times 375$, угол разориентировки составляет $3 \cdot 10^{-3}$ рад

На рис. 7 проявляется блочная структура с границами, образованными стенками красвых дислокаций. Угол разориентировки для прямолинейных простых границ можно оценить по формуле $Q = b/d$, где d – расстояние между дислокациями, b – вектор Бюргерса.

Под слоями роста обнаруживается пластинчатая субструктура (рис. 8).

Пластинчатость сохраняется и на дефектных участках повреждения поверхности механическим способом. Ямки травления на участках макровключений имеют плоское дно, а на дислока-

циях – острое, но контуры ямок сохраняют геометрическую форму согласно симметрии исследуемой поверхности (010), форма пластинок и дефектных ямок травления имеют симметрию грани (010) и молекулярного трехслойного пакета.

Вторым способом упрочнения кристаллов является пластинчатая субструктура. Она является следствием распределения тепловой энергии в открытой термодинамической системе. При выращивании кристаллов излучение энергии при охлаждении происходит с поверхности, преимущественно рассеиваясь в окружающую среду и на дефектах кристаллов. Благодаря низкой

теплопроводности кристалла часть энергии сохраняется внутри, распределяется по ячейкам, в данном случае пластинчатой формы в соответствии с симметрией решетки кристалла.

Дислокационный стопорный механизм и пластинчатость являются следствием процесса самоорганизации кристаллов.

На (рис. 9) представлена зависимость твердости кристалла от концентрации неодима. Испытания на твердость проводились на микротвердомере ПМТ-3 по методу Кнуппа. Из графика видно, что с увеличением концентрации неодима твердость кристаллов возрастает

Обсуждение результатов

Представлено два механизма упрочнения кристаллов КГВ с примесью неодима.

Первый механизм связан с взаимодействием слоев деформации, образованных винтовыми дислокациями с красными дислокациями и макроскопическими включениями, которые являются «стопорами» для деформационных слоев.

Образование пластинчатой субструктуры является еще одним механизмом упрочнения кристаллов.

Пластинчатая субструктура возникает за счет перераспределения тепловой энергии в открытой термодинамической системе. В результате низкой теплопроводности часть тепловой энергии рассеивается на дефектах и в окружающую среду, а другая – сохраняется и распределяется внутри кристалла, образуя пластинки. Данный механизм согласуется с теорией самоорганизации И.Р. Пригожина.

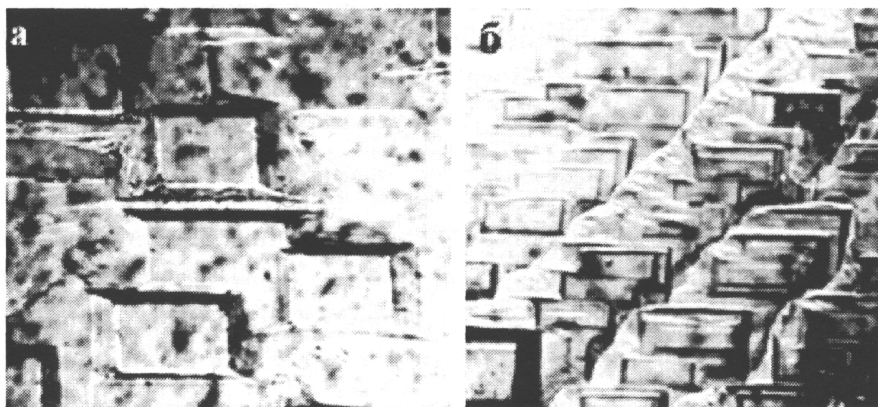


Рис. 8. а) бездефектная поверхность $\times 375$; б) участки, поврежденные абразивным материалом в процессе обработки $\times 200$

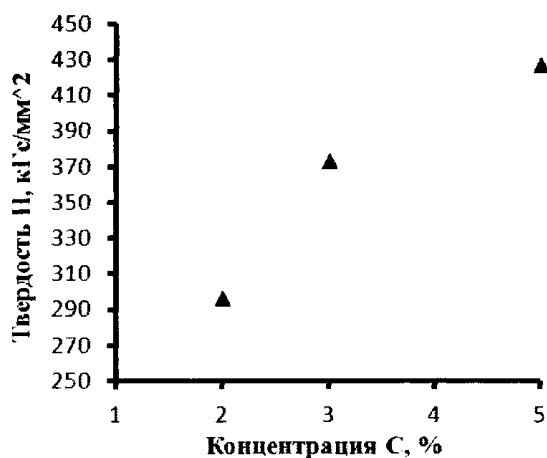


Рис. 9. Зависимость упрочнения монокристаллов КГВ в зависимости от процентного содержания неодима

Литература

1. Акимов, В.М. Определение оптимальной концентрации активной примеси неодима кристаллов калий-гадолиниевый вольфрамат / В.М. Акимов, А.Н. Брызгалов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2008. – Вып. 11. – № 22(122). – С. 19–22.
2. Orowan, E. Problems of plastic gliding / E. Orowan // Proc. Phys. Soc. – 1940. – Vol. 52, № 1. – P. 8–22.
3. Смирнов, Б.И. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов / Б.И. Смирнов. – Л.: Наука, 1981. – 236 с.
4. Трунов, В.Н. Кристаллохимия и свойства двойных молибдатов и вольфраматов / В.Н. Трунов, В.А. Ефремов, Ю.А. Великодный. – Л.: Наука, 1986. – 172 с.

5. Басиев, Т.Т. Генерационные свойства ВКР-активных кристаллов молибдатов и вольфрамов, активированных ионами Nd^{3+} при селективной оптической накачке / Т.Т. Басиев // Квантовая электроника. – 2006. – Т. 36. – Вып. 8. – С. 720–726.

6. Сторошук, О.Б. Высокоэффективный неохлаждаемый импульсно-периодический лазер на активном элементе из кристалла $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2:\text{Nd}^{3+}$ с повышенной частотой следования импульсов излучения / О.Б. Сторошук // Электронный журнал «Исследовано в России». – 2002. – № 62. – С. 671–681.

Поступила в редакцию 24 апреля 2012 г.

METHODS OF MONOCRYSTALS $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2:\text{Nd}^{3+}$ REINFORCEMENT

D.E. Zhivulin¹, A.N. Bryzgalov², P.V. Volkov³, V.M. Akimova⁴, E.N. Rybina⁵

Two methods of crystals of potassium-gadolinium tungstate doped with neodymium $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2:\text{Nd}^{3+}$ reinforcement are considered. One method is shown at a low concentration of impurities and is based on the dislocation mechanism, another one is associated with the formation of lamellar substructure and is shown in crystals with high concentration of impurities. The change in hardness of crystals, depending on the concentration of impurities, is investigated.

Keywords: PGT crystal (Potassium-Gadolinium Tungstate), reinforcement, defects, impurity, substructure, hardness.

References

1. Akimova V.M., Bryzgalov A.N. Opredelenie optimal'noi kontsentratsii aktivnoi primesi neodima kristallov kali-gadolinievogo vol'framata (Optimal percentage evaluation of the active impurity of the neodymium crystals of the kalium gadolinium wolframate). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika, fizika, khimiia»*. 2008. Issue 11. no. 22(122). pp. 19–22. (in Russ.).
2. Orowan E. Problems of plastic gliding. *Proc. Phys. Soc.* 1940. Vol. 52, no 1. pp. 8–22.
3. Smirnov B.I. *Dislokatsionnaia struktura i uprochnenie kristallov* (Dislocation pattern and crystals reinforcement). Leningrad: Nauka, 1981. 236 p. (in Russ.).
4. Trunov V.N., Efremov V.A., Velikodnyi Yu.A. *Kristallokhimiia i svoistva dvoynykh molibdatov i vol'framatov* (Crystal chemistry and properties of double molybdates and wolframates). Leningrad: Nauka, 1986. 172 p. (in Russ.).
5. Basicv T.T. *Kvantovaiia elektronika*. 2006. Vol. 36. Issue 8. pp. 720–726. (in Russ.).
6. Storoshchuk O.B. *Issledovano v Rossii*. 2002. no. 62. pp. 671–681. (in Russ.).

¹ Zhivulin Dmitry Evgenievich is Post-Graduate Student, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

E-mail: zhivulin-74@mail.ru

² Bryzgalov Aleksandr Nikolaevich is Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

E-mail: brizgalovan@cspsu.ru

³ Volkov Petr Vyacheslavovich is Post-Graduate Student, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

E-mail: peter-007@mail.ru

⁴ Akimova Vera Mikhailovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), associate «USFC».

E-mail: nchestno@mail.ru

⁵ Rybina Elvira Nafizovna is Post-Graduate Student, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

E-mail: elvirarybina@mail.ru

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ЛЕЖАЩЕЙ КАПЛИ НА НАГРЕТОЙ ПЛОСКОСТИ¹

А.Е. Коренченко², А.Ж. Илимбаева³, В.П. Бескачко⁴

Проведено математическое моделирование поведения капли вязкой жидкости, лежащей на нагретой поверхности в атмосфере нейтрального газа. Рассмотрен динамический режим с постоянным контактным углом. Поверхность предполагается гладкой, химически инертной и изотермической, газ – идеальным и неконденсирующимся. Жидкая капля описана в приближении несжимаемой жидкости с учетом конвекции Марангони и гравитационных эффектов, в газе модель учитывает гравитационную конвекцию. Проведено исследование течений в капле и окружающей газовой среде и проанализированы движения поверхности капли.

Ключевые слова: поверхностное натяжение, лежащая капля, численное моделирование.

Введение

Исследования динамического поведения лежащей капли в настоящее время вызывают большой интерес. Это связано с важной ролью, которую этот объект играет в технологических процессах, например, при распылении чернил в струйных принтерах, капельном охлаждении поверхностей, росте биологических кристаллов, в тепло-массообменных аппаратах. Математическое описание капли осуществить сложно уже потому, что межфазная поверхность жидкость–газ может свободно двигаться, что подразумевает перестройку вычислительной области на каждом временном шаге. Задача еще более усложняется, если учесть возможность испарения с поверхности жидкости и температурную неоднородность, связанную с поглощением теплоты парообразования на границе жидкость–газ.

В работах по визуализации испаряющейся лежащей капли докладывают о существовании внутренних течений в капле [1], наличии гидротермических волн [2]. В [3] обнаружено уплощение капли в сравнении с равновесной формой при уменьшении объема жидкости из-за испарения. Эксперименты подтверждают факт, что лежащая капля находится в неравновесном состоянии даже в атмосфере своего насыщенного пара, так как из-за кривизны поверхности давление насыщенного пара на ней немного превышает таковое в объеме.

Поверхность испаряющейся капли может перемещаться не только за счет фазового перехода, но также из-за присутствия внутренних течений. Обычно в вычислительных работах неравновесностью формы испаряющейся капли пренебрегают. Профиль капли считается равновесным и сферическим (линзоподобным), либо рассчитывается на каждом временном шаге с помощью уравнения Лапласа. Как показывает сравнение результатов численных расчетов с экспериментальными данными, на скорость испарения эти допущения влияют мало, причем как для режима испарения с постоянным радиусом пятна смачивания, так и с постоянным контактным углом [4–6]. Но существует еще метрологический аспект задачи об испарении лежащей капли. Он связан с тем, что движение неравновесной из-за испарения границы раздела может повлиять на точность измерения поверхностного натяжения методом лежащей капли.

Глобальная цель проводимых авторами исследований – анализ отклонения формы испаряющейся капли от равновесной. Авторы проводят работы поэтапно. В [7] было проведено исследование свободных колебаний лежащей капли, выведенной из положения механического равновесия, и рассчитаны параметры колебаний для капель различных жидкостей. Цель настоящей работы состоит в выяснении влияния температурной неоднородности (нагретая подложка) на движение границы раздела жидкость–газ.

¹ Работа поддержана грантом РФФИ № 10-03-00719-а.

² Коренченко Анна Евгеньевна – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ИМЕТ УрО РАН
E-mail: korenchenko@physics.susu.ac.ru

³ Илимбаева Айгуль Жепсенаевна – студентка, физический факультет, Южно-Уральский государственный университет

⁴ Бескачко Валерий Петрович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет

Схема численного эксперимента приведена на рис. 1. Капля жидкости объемом $V = \frac{4}{3}\pi R^3$, R – радиус равновеликой сферической капли, находится на твердой подложке и окружена неконденсирующимся газом. Границы вычислительной области являются удаленными, т.е. $R_k, H_k \gg R$. Приняты следующие приближения: температура подложки постоянна; отсутствует испарение; предполагается осевая симметрия формы капли, распределения давления и течений в капле и газе; граница считается бесконечно тонкой и безинерционной; жидкость является несжимаемой средой; газопаровая смесь описывается приближением идеального газа; коэффициенты переноса являются постоянными в обеих средах; краевой угол является постоянным.

В работе приняты следующие обозначения: ρ_l – плотность жидкости, ρ_g – плотность газа на удаленных границах, ν_l, ν_g – коэффициенты кинематической вязкости, η_l, η_g – коэффициенты динамической вязкости, κ_l, κ_g – коэффициенты теплопроводности, c_l, c_g – удельные теплосмкости, M_l, M_g – молярные массы, β_l – коэффициент объемного расширения жидкости, $\sigma_{lg}, \sigma_{gs}, \sigma_{ls}$ – коэффициенты поверхностного натяжения на границах жидкость–газ, газ–подложка и жидкость–подложка соответственно. Значения коэффициентов переноса считаются постоянными. Здесь и далее индексами l, g и s отмечаются величины, относящиеся к жидкости, газу и материалу подложки.

Математическая модель представляет собой систему дифференциальных уравнений сохранения и сопутствующих граничных условий. Система уравнений, описывающих течения в жидкости, содержит уравнения Навье–Стокса, неразрывности и конвективной теплопроводности

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = -\frac{1}{\rho_l} \nabla P + \nu_l \nabla^2 \vec{V} - \vec{g} \beta_l (T - T_s), \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla(\vec{V}T) = \frac{\kappa_l}{\rho_l c_l} \nabla^2 T. \quad (3)$$

В (1)–(3) использованы следующие обозначения: $\vec{V} = \{v, u\}$ – вектор скорости, P – давление сверх гидростатического, T – температура, g – ускорение свободного падения. В (1) гравитационные температурные эффекты описаны в приближении Буссинеска.

Система уравнений для газовой среды запишется как

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\eta_g}{\rho} \nabla^2 \vec{V} - \vec{g}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{V}) = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla(\vec{V}T) = \frac{\kappa_g}{\rho_g c_g} \nabla^2 T, \quad (6)$$

$$p = \frac{\rho RT}{M}. \quad (7)$$

Здесь буквами p и ρ обозначены давление и плотность газовой среды.

В модели приняты следующие граничные условия:

на оси

$$r = 0: \quad \frac{\partial u}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial P}{\partial r} = \frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\partial \rho}{\partial r} = 0, \quad v = 0, \quad (8)$$

на твердой границе

$$z = 0: \quad v = u = 0, \quad T = \begin{cases} T_s, & r < 3R, \\ T_s - (T_s - T_g)/(R_k - 3R) \cdot (r - 3R), & 3R \leq r \leq R_k, \end{cases} \quad (9)$$

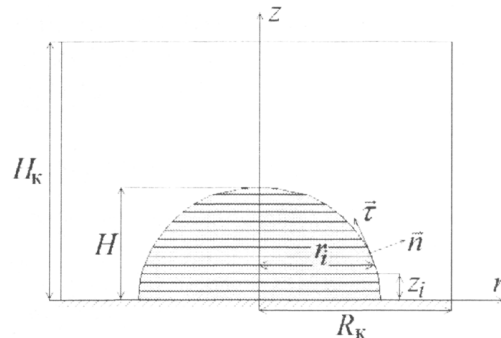


Рис. 1. Схема эксперимента. Капля находится на плоской поверхности в окружении газа

на удаленных границах в газовой среде

$$z = H_k \text{ or } r = R_k: \quad v = u = 0, \quad T = T_g, \quad p = p_g, \quad \rho = \rho_g. \quad (10)$$

Здесь T_g, p_g, ρ_g – есть невозмущенные значения температуры, давления и плотности газа на удаленных границах, T – температура подложки, а условие (9) для температуры выбрано для того, чтобы избежать скачка температуры при $z = 0, r = R_k$.

На границе жидкость–газ выполнены следующие условия [8]:

1) скорости непрерывны

$$v_l = v_g, \quad u_l = u_g; \quad (11)$$

2) нормальные напряжения испытывают скачок, определяемый формулой Лапласа

$$\vec{n} \mathbf{T} \vec{n}|_l - \rho_l (\vec{V}_l \cdot \vec{n} - V_{S_{lg}})^2 - \left(\vec{n} \mathbf{T} \vec{n}|_g - \rho (\vec{V}_g \cdot \vec{n} - V_{S_{lg}})^2 \right) = \sigma_{lg} K, \quad (12)$$

где $\mathbf{T}_l$ – тензор напряжений, $V_{S_{lg}}$ – скорость перемещения границы раздела фаз;

3) скачок касательных напряжений равен касательной составляющей градиента поверхностного натяжения

$$\vec{n} \mathbf{T} \vec{\tau}|_l - \rho_l \vec{V}_l \cdot \vec{\tau} (\vec{V}_l \cdot \vec{n} - V_{S_{lg}}) - \left(\vec{n} \mathbf{T} \vec{\tau}|_g - \rho \vec{V}_g \cdot \vec{\tau} (\vec{V}_g \cdot \vec{n} - V_{S_{lg}}) \right) = -\sigma_T (\nabla T)_\tau. \quad (13)$$

В (13) температурная зависимость поверхностного натяжения описывается формулой

$$\sigma = \sigma_0 - \sigma_T (T - T_0), \quad \sigma_T = \left| \frac{d\sigma}{dT} \right|;$$

4) температура непрерывна

$$T_g = T_l; \quad (14)$$

5) поток тепла в отсутствие испарения непрерывен

$$-k_l \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_l + \rho_l c_l T_l \cdot (\vec{V}_l \cdot \vec{n} - V_{S_{lg}}) - \left(-k_g \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_g + \rho c_g T_g \cdot (\vec{V}_g \cdot \vec{n} - V_{S_{lg}}) \right) = 0. \quad (15)$$

Уравнения (12), (13), (15) записаны в системе отсчета, связанной с границей раздела фаз.

Численный метод решения

Для решения системы (1)–(15) использовалась разностная схема, построенная на основе неравномерной пространственной сетки. Уравнения (1), (3) для жидкой фазы записывались в форме законов сохранения, дискретизировались и линеаризовывались. Система полученных алгебраических разностных уравнений решалась методом исключения Гаусса. Система уравнений (4)–(6), описывающая газовую среду, решалась методом прогонки.

В численном решении задачи можно выделить несколько этапов:

- минимизацией выражения для механической энергии [9] определяется форма равновесной капли, т.е. набор радиусов $\{r_i\}$ и высота H (рис. 1). Определяются равновесные значения кривизны поверхности капли $K_0(z_i)$. В отсутствие испарения капля имеет постоянный объем, поэтому вычисление $\{K_0(z_i)\}$ проводится только один раз;

- определяются давление и скорости в капле путем решения системы уравнений (1, 2, 12, 13). Форма капли, а также скорости и плотность в газе считаются неизменными на этой стадии и берутся из предыдущего временного шага. Система разностных уравнений решается методом исключения Гаусса;

- определяется новая форма капли по формулам:

$$r_i^{t+\Delta t} = r_i^t + v|_{S_{lg}} \cdot \Delta t, \quad i = 2, m, \quad z_i^{t+\Delta t} = z_i^t + u|_{S_{lg}} \cdot \Delta t, \quad i = 2, m+1.$$

Радиус пятна смачивания определяется из условия, что краской угол не зависит от того, происходит натекание или отток жидкости на подложке, и равен равновесному углу, определяемому уравнением Юнга;

- распределение скоростей в газе определяется последовательным решением уравнений (4) с граничными условиями (11);

- распределение плотности в газе определяется с помощью решения уравнения (5). Вблизи поверхности жидкости значения плотности газовой среды интерполируются;
- распределение температуры в жидкости определяется посредством решения уравнения (3) с граничным условием (15);
- вычисляется распределение температуры в газе с помощью решения уравнения (6) с граничными условиями (14);
- сетка перестраивается в соответствии с изменениями в форме капли.

Таким образом, использованный численный метод является одним из методов расщепления по физическим процессам [10]. Программный продукт, реализующий указанную схему, был написан на языке Fortran90 и распараллелен с использованием библиотеки MPI. Расчеты проводились на суперкомпьютере «СКИФ-Аврора ЮУрГУ».

Вычисления проводились для следующего набора параметров: $R = 0,5$ мм, жидкость – вода с $\sigma_{ls} - \sigma_{gs} = 0 \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}$, $\sigma_{lg} = 7,3 \cdot 10^{-2} \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}$, $\rho_l = 1000 \text{ кг/м}^{-3}$, $\nu_l = 1,0 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, $k_l = 0,55 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $\beta_l = 1,27 \cdot 10^{-3} \text{ К}^{-1}$, $C_l = 4200 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$, $\sigma_T = 1,7 \cdot 10^{-4} \text{ Н/(м} \cdot \text{К)}$, $R_k = H_k = 5 \text{ см}$. Газ – воздух, температура и давление на удаленном расстоянии от подложки $T_g = 293 \text{ К}$, $p_g = 10^3 \text{ Па}$, коэффициенты переноса в газе определяются по формулам, полученным из распределения Максвелла. Температура подложки $T_s = 308 \text{ К}$. В момент $t = 0$ температура жидкости и газа одинакова и равна T_g , температура подложки – T_s , скорости равны нулю.

Обсуждение результатов

Разность температур между подложкой и газовой средой приводит к неоднородному распределению температур на поверхности капли. Связанный с температурой градиент поверхностного натяжения является движущей силой конвекции Марангони. Это явление существенно для небольших капель, так как в малых объемах гравитационные эффекты пренебрежимо малы. Обычно в численных расчетах конвективный поток тепла от поверхности жидкости описывается посредством числа Био (Biot). Однако в [11] было показано, что это приближение может существенно повлиять на результат из-за неточностей определения самого числа Био. В настоящей работе тепловой поток от поверхности описывается уравнениями (3), (6), что даст возможность получить более точное описание процесса теплообмена. Кроме того, в численных исследованиях динамики капли предполагают, что конвекция Марангони не изменяет форму капли, т.е. профиль капли остается равновесным, какие бы течения в жидкости не возникали [4–6]. Вопрос о возможных перемещениях межфазной границы, насколько нам известно, никем не поднимался, хотя это кажется важным, например, для измерений поверхностного натяжения методом большой лежащей капли.

Как показали расчеты, гравитационная конвекция в жидкости в рассмотренных условиях не развивается. Это связано с малой разностью температур между подложкой и вершиной капли – в указанных выше условиях она составляет $\sim 0,2 \text{ К}$. Однако этой разницы температур достаточно для развития конвекции Марангони.

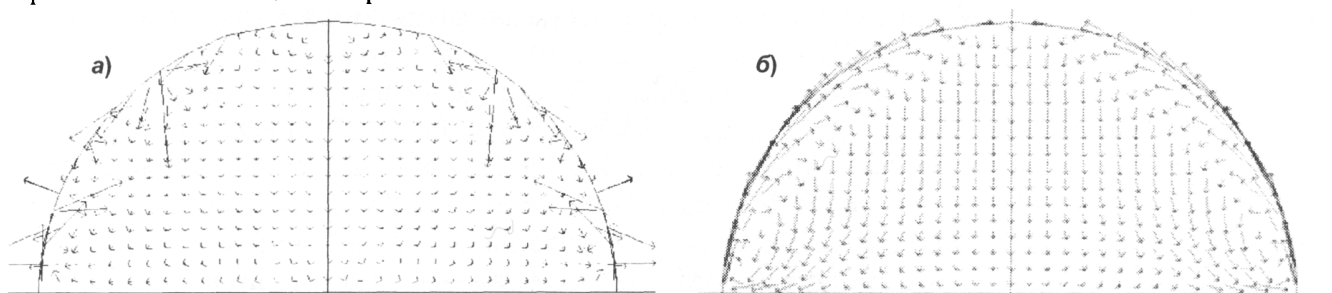


Рис. 2. Конвекция Марангони в осевом сечении капли: а) начальная стадия; б) установивший вихрь

В поведении жидкости и газа можно выделить две стадии.

1) В жидкости вблизи поверхности образуется несколько малых вихрей. Формирование первого такого вихря начинается вблизи подложки и затем охватывает всю приповерхностную область (рис. 2, а). Скорости в жидкости при этом меняются быстро как по величине, так и по направлению. В это время в газе формируется течение, направленное вниз, в горячую область с малой плотностью, из-за чего плотность в нижней части повышается и появляется обратное тече-

нис. Возникают быстро затухающие течения воздуха, в которых скорости направлены то вверх, то вниз всюду, кроме области, где они огибают каплю.

2) Течения в газе затухают, причем установившееся давление имеет распределение Больцмана вдоль оси z . Вихри в капле сливаются в один большой вихрь, жидкость в котором движется вдоль поверхности капли вверх и вниз вдоль оси в объеме (рис. 2, б). В отсутствие испарения такой вихрь существует все время, пока поддерживается постоянная разность температур между подложкой и газовой средой. Такое же поведение жидкости в капле наблюдалось в [6].

Как выяснилось из расчетов, интенсивное движение внутри капли может нарушить ее равновесную форму. На рис. 3 показана временная зависимость отклонения высоты капли от равновесной. Как видно из рисунка, эта зависимость представляет собой затухающие колебания, причем сравнение с результатами [7] указывает на возбуждение основной моды колебаний лежащей капли. Таким образом, поверхность лежащей капли при нарушении термодинамического равновесия совершает затухающие механические колебания. Амплитуда колебаний зависит от разности температур подложка–газ и может составлять несколько микронов. Колебания быстро затухают, и уже по истечении 0,1 с после начала процесса форму каплю можно считать равновесной.

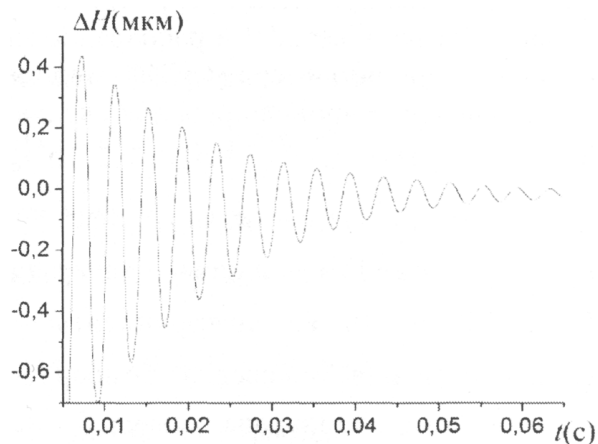


Рис. 3. Временная зависимость отклонения высоты капли от ее значения в равновесии

Заключение

Таким образом, в работе проведено численное исследование динамики поведения лежащей капли и проанализирована эволюция формы капли при нарушении термодинамического равновесия в системе подложка–капля–газ. Неравновесное состояние таково, что температура подложки поддерживается большей температуры газа в удалении от капли. Внутри капли, лежащей на нагретой подложке, возникает вихрь конвекции Марангони, скорости в котором направлены вверх в узкой области вдоль поверхности и вниз во всем остальном объеме.

Численные расчеты показали, что на начальной стадии процесса возникают свободные колебания поверхности капли, частота которых совпадает с частотой основной моды. После затухания колебаний профиль капли остается равновесным, определяемым уравнением Лапласа. Длительность переходного интервала зависит от вязкости жидкости и для капли воды массой 0,525 мг составляет 0,1 с. Интервал установления равновесного профиля этой капли, таким образом, мал, и не может повлиять на точность измерения поверхностного натяжения методом лежащей капли.

Литература

1. Hu H. Evaporation of a sessile droplet on a substrate / H. Hu, R.G. Larson // J. Phys.Chem. B. – 2002. – Vol. 106. – P. 1334–1344.
2. Sefiane K. On hydrothermal waves observed during evaporation of sessile droplets / K. Sefiane, A. Steinchen, R. Moffat // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2010. V. 365. – P. 95–108.
3. Analysis of evaporating droplets using ellipsoidal cap geometry / H.Y. Erbil, G. McHale, S.M. Rowan, V.I. Newton // J. Adhes. Sci. Technol. – 1999. – Vol. 13. – P. 1375–1380.
4. A mathematical model for the evaporation of a thin sessile liquid droplet: Comparison between experiment and theory / G.J. Dunn, S.K. Wilson, B.R. Duffy *et al.* // Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects. – 2008. – V. 323. – Issues 1–3. – P. 50–55.
5. Experimental and numerical investigation of the evaporation into air of a drop on a heated surface / R. Mollaret, K. Sefiane, J.R.E. Christy, D. Veyret // Chem. Eng. Res. Des. – 2004. – V. 82(A4). – P. 471–480.
6. Evaporation and fluid dynamics of a sessile drop of capillary size / Yu. Barash, T.P. Bigioni, V.M. Vinokur, L.N. Shchur // Phys. Rev. E. – 2009. – V. 79. – P. 046301.
7. Коренченко А.Е. Численное исследование свободных колебаний лежащей капли / А.Е. Коренченко, А.Ж. Илимбаева, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – Вып. 4. – № 10(227). – С. 72–76.

8. Лабунцов, Д.А. Механика двухфазных систем / Д.А. Лабунцов, В.В. Ягов. – М.: Изд. МЭИ, 2000. – 374 с.
9. Korenchenko A.E. Numerical simulation of oscillations of a drop, bounded by two rigid planes / Korenchenko A.E., Beskachko V.P. // *Meas. Sci. Technol.* – 2007. – V. 18. – P. 3359–3364.
10. Белоцерковский О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред / О.М. Белоцерковский. – М.: Физматлит, 1994. – 448 с.
11. Murisic N. Modeling evaporation of sessile drops with moving contact lines / N. Murisic, L. Kondic // *Phys. Rev. E.* – 2008. – V. 78. – P. 065301(R).

Поступила в редакцию 13 октября 2012 г.

NUMERICAL STUDY OF A SESSILE DROP ON A HEATED SUBSTRATE

A.E. Korenchenko¹, A.J. Ilimbaeva², V.P. Beskachko³

The dynamic behavior of a system consisting of sessile drop, heated substrate and gas is investigated by numerical methods. The mode with constant contact angle is considered. The solid surface is assumed to be planar, chemically inert and isothermal. The gas is considered to be a non-condensing ideal gas. The thermal and solutal buoyancy effects in gas are taken into account. Buoyancy and Marangoni convection are considered in the liquid phase. The movement of liquid-gas interface is analyzed in terms of its impact on the accuracy of sessile drop method.

Keywords: surface tension, sessile droplet, computer simulation.

References

1. Hu H., Larson R.G. Evaporation of a sessile droplet on a substrate. *J. Phys.Chem. B.* 2002. Vol. 106. pp. 1334–1344.
2. Sefiane K., Steinchen A., Moffat R. On hydrothermal waves observed during evaporation of sessile droplets. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects.* 2010. Vol. 365. pp. 95–108.
3. Erbil H.Y., McHale G., Rowan S.M., Newton V.I. Analysis of evaporating droplets using ellipsoidal cap geometry. *J. Adhes. Sci. Technol.* 1999. Vol. 13. pp. 1375–1380.
4. Dunn G.J., Wilson S.K., Duffy B.R., David S., Sefiane K. A mathematical model for the evaporation of a thin sessile liquid droplet: Comparison between experiment and theory. *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects.* 2008. Vol. 323. Issues 1–3. pp. 50–55. <http://dx.doi.org/10.1016/j.colsurfa.2007.09.031>
5. Mollaret R., Sefiane K., Christy J.R.E., Veyret D. Experimental and numerical investigation of the evaporation into air of a drop on a heated surface. *Chem. Eng. Res. Des.* 2004. Vol. 82 (A4). pp. 471–480.
6. Barash Yu., Bigioni T.P., Vinokur V.M., Shchur L.N. Evaporation and fluid dynamics of a sessile drop of capillary size. *Phys. Rev. E.* 2009. Vol. 79. pp. 046301.
7. Korenchenko A.E., Ilimbaeva A.Zh., Beskachko V.P. Численное исследование свободных колебаний лежащей капли (Numerical study of free vibrations of a sessile drop). *Vestnik YuUrGU. serya «Matematika. Mekhanika. Fizika».* 2011. Issue 4. no. 10(227). pp. 72–76. (in Russ.).
8. Labuntsov D.A., Iagov V.V. *Mekhanika dvukhfaznykh sistem* (Mechanics of two-phase systems). Moscow: Izd. MEI, 2000. 374 p. (in Russ.).
9. Korenchenko A.E., Beskachko V.P. Numerical simulation of oscillations of a drop, bounded by two rigid planes. *Meas. Sci. Technol.* 2007. Vol. 18. pp. 3359–3364.
10. Belotserkovskii O.M. *Chislennoe modelirovanie v mekhanike sploshnykh sred* (Numerical modeling in continuum mechanics). Moscow: Fizmatlit, 1994. 448 p.
11. Murisic N., Kondic L. Modeling evaporation of sessile drops with moving contact lines. *Phys. Rev. E.* 2008. Vol.78. p. 065301(R).

¹ Korenchenko Anna Evgenievna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), senior researcher, Institute of Metallurgy of the Ural Branch of Russian Academy of Sciences.

E-mail: korenchenko@physics.susu.ac.ru

² Ilimbaeva Aigul Jepsaevna is Student, Physics Department, South Ural State University.

³ Beskachko Valeriy Petrovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

О МЕХАНИЗМЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ γ - И δ -FeOON ПРИ ТЕРМООБРАБОТКЕ В РАСТВОРАХ MeOH (Me – Na, K): МОДЕЛЬ КРИСТАЛЛООБРАЗУЮЩИХ КОМПЛЕКСОВ

В.Ш. Мирасов¹, Р.Р. Клещева², В.А. Герман³, Д.Г. Клещев⁴, Ю.И. Рябков⁵

Методами РФА, растровой и трансмиссионной электронной микроскопии, термогравиметрии, масс-спектропии и рентгенофлуоресцентного анализа исследованы превращения нанодисперсных оксигидроксидов железа(III) γ - и δ - модификаций при термообработке на воздухе (интервал температур 25–900 °C), а также при гидротермальной обработке (175–220 °C) в воде и водных растворах MeOH (Me – Na, K) с концентрацией $1 \leq C_{\text{MeOH}} \leq 5$ моль/дм³. Уточнены области образования фаз α -FeOON и α -Fe₂O₃. Рассмотрены возможный состав кристаллообразующих комплексов, формирующихся в растворах, и реакции, протекающие при их встраивании в различные атомно-гладкие грани α -FeOON и α -Fe₂O₃. В рамках модели кристаллообразующих комплексов интерпретируются экспериментально установленные зависимости габитуса кристаллов, а также фазового и дисперсного состава формирующихся продуктов от параметров гидротермальной обработки.

Ключевые слова: гидротермальная обработка, оксигидроксиды железа(III), фазовые превращения, водный раствор MeOH.

Введение

Нанодисперсные оксигидроксиды железа (III) γ -, δ - и β -модификаций, образующиеся при окислении водных растворов солей железа(II) и (или) суспензий гидроксида железа(II) в условиях высоких пересыщений, обладают избытком поверхностной энергии и поэтому при последующей термообработке в растворах могут испытывать фазовые превращения (ФП) в равновесные фазы α -FeOON [1–3] или α -Fe₂O₃ [3–10]. Известно [3, 7–9, 11], что кинетика ФП, средний размер и морфология кристаллов формирующихся фаз в значительной мере зависят от температуры термообработки, ионного состава раствора, концентрации FeOON в суспензии и др. В частности, при гидротермальной обработке рентгеноаморфного Fe(OH)₃ [12] или γ - и δ -FeOON [3, 13, 14] в концентрированных растворах NaOH формируется оксид железа(III) α -модификации с таблитчатым габитусом кристаллов, который нашел широкое применение в качестве пигмента в антикоррозионных термостойких покрытиях для металлических конструкций [14]. Известно [15], что функциональные свойства покрытий существенно зависят от размера и габитуса кристаллов пигментов. Цель данной работы – выяснение причин, приводящих к многопараметрической зависимости фазового состава и габитуса кристаллов продуктов, образующихся при гидротермальной обработке (ГТО) γ - и δ -FeOON в водных растворах MeOH, уточнение механизма образования и роста кристаллов при фазовых превращениях.

Экспериментальная часть

Однофазные по данным рентгенографии и электронной микроскопии образцы γ - и δ -FeOON получали по методике, изложенной в [3]. Параметры синтеза и характеристики образцов сведены в таблицу. Образовавшиеся осадки отделяли на воронке Бюхнера от маточного раствора, отмывали водой до отсутствия в фильтрате сульфат-ионов и репульпировали в дистиллированной воде

¹ Мирасов Вадим Шафикович – аспирант, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: mirasov@yandex.ru

² Клещева Регина Раисовна – научный сотрудник, ООО «Научно-исследовательский институт Пигментные материалы».

³ Герман Валентина Андреевна – научный сотрудник, ООО «Научно-исследовательский институт Пигментные материалы».

⁴ Клещев Дмитрий Георгиевич – доктор химических наук, профессор, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет

⁵ Рябков Юрий Иванович – доктор химических наук, профессор, Институт химии Коми Научного центра УрО РАН.

E-mail: ryab2007@rambler.ru

и водных растворах MeOH (Me – Na, K) с концентрацией (C_{MeOH}) от 1 до 5 моль/дм³. Концентрация FeOOH в суспензии во всех опытах составляла $0,50 \pm 0,05$ моль/дм³.

Гидротермальную обработку суспензий FeOOH проводили в автоклавах емкостью 0,07 дм³ (коэффициент заполнения $k = 0,8$) при температурах 175, 200, 220 (γ-FeOOH) и 175, 220 °С (δ-FeOOH) в течение 2,0 ч. Время нагрева автоклавов до заданной температуры не превышало 0,5 ч, точность поддержания температуры – ± 5 °С. Полученные образцы тщательно отмывали водой от щелочи, высушивали до постоянного веса при 100 °С и измельчали в агатовой ступке.

Фазовый состав образцов определяли методом рентгенофазового анализа (РФА; рентгеновский аппарат ДРОН-3М с приставкой для цифровой регистрации данных; фильтрованное $\text{CoK}\alpha$ излучение; использовали электронную базу данных порошковой дифрактометрии ICDD). Массовую долю фаз в неоднородных образцах оценивали из соотношения интегральных интенсивностей аналитических рефлексов¹ согласно рекомендациям [16]. Исходные и подвергнутые ГТО образцы FeOOH исследовали также на элементный (метод рентгенофлуоресцентного спектрального анализа – РСА; случайная погрешность не превышала 5 %) и дисперсный (метод растровой электронной микроскопии – РЭМ) составы на растровом электронном микроскопе JEOL JSM-7001F с энергодисперсионным рентгенофлуоресцентным спектрометром Oxford INCA X-max 80, а также методами термогравиметрии и термоанализа (синхронный анализатор Netzsch STA 449C Jupiter, совмещенный с масс-спектрометром Netzsch QMS 403C Acolos для анализа выделяющихся газов; съемку термограмм проводили в интервале температур 20–900 °С при скорости нагрева 10 К/мин в токе воздуха 20 мл/мин).

Условия получения, химический и дисперсный состав образцов FeOOH

Параметры синтеза, характеристики образцов FeOOH	γ-FeOOH	δ-FeOOH
pH реакционной среды	$7,3 \pm 0,5$	$11,0 \pm 0,5$
Концентрация FeOOH в окисленной суспензии, моль/дм ³	0,3	0,5
Окисляющий агент	Кислород воздуха	Раствор H_2O_2
Щелочной агент	NaOH	KOH
Средняя скорость окисления ионов железа(II), ммоль/(дм ³ ·мин)	9 ± 1	15 ± 1
Морфология кристаллов FeOOH	Пластинчатая	Эллипсоидальная
Средний размер кристаллов FeOOH, нм	60×20×5	10×7,5×7,5
Эмпирический состав воздушно-сухих образцов FeOOH	$\text{FeOOH} \cdot 0,25\text{H}_2\text{O} \cdot 0,024\text{SO}_3$	$\text{FeOOH} \cdot 0,23\text{H}_2\text{O}$

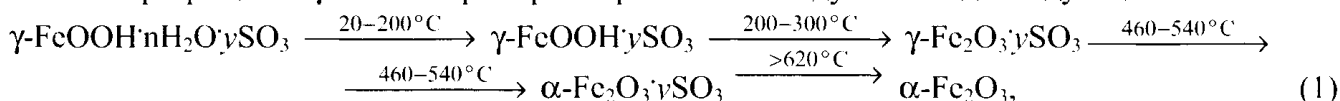
Результаты исследования

Превращения FeOOH при термообработке на воздухе. По данным ТГ относительное изменение массы² воздушно-сухого образца γ-FeOOH в интервале 20 – 900 °С составляет 0,205. На кривой дифференциального термического анализа (ДТА) фиксируются три эндозффекта с максимумами при температурах 100, 260 и 750 °С, сопровождающиеся относительным уменьшением массы 0,075; 0,100 и 0,030 соответственно. Кроме того на кривой ДТА присутствует экзозффект в интервале температур 460–540 °С, при котором масса образца значительных изменений не претерпевает. Масс-спектрометрические исследования состава газовой фазы показали, что первый и второй эндозффект обусловлен дегидратацией, а третий – процессом разложения сульфат-ионов. По данным РФА, образец γ-FeOOH при прокалке в интервале температур 300–460 °С испытывает превращение в фазу γ-Fe₂O₃, а при температурах выше 460 °С фаза γ-Fe₂O₃ превращается в α-Fe₂O₃. Из сопоставления полученных данных с литературными [17], можно заключить, что при первом и втором эндозффектах из образца удаляется физически адсорбированная и конституционная вода.

¹ В качестве аналитических выбраны не накладывающиеся рефлексы фаз с кристаллографическими индексами (hkl). α-FeOOH (110); α-Fe₂O₃ (012).

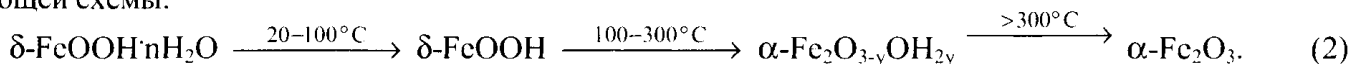
² Под относительным изменением массы $\mu_{\text{ГТ}}$ образца понимается безразмерная величина, равная отношению изменения массы $\Delta m_{\text{ГТ}}$ в данном температурном интервале ΔT к массе исходного воздушно-сухого образца m_0 , $\mu_{\text{ГТ}} = \Delta m_{\text{ГТ}} / m_0$.

Тогда эмпирическую структурную формулу $\gamma\text{-FeOOH}$ можно представить в виде $\text{FeOOH} \cdot n\text{H}_2\text{O} \cdot y\text{SO}_3$, а термические превращения $\gamma\text{-FeOOH}$ при термообработке на воздухе – в виде следующей схемы:



где n и y – содержание в образце адсорбированной воды и сульфат-ионов, в пересчете на FeOOH . Из данных ТГ по изменению массы образца $\gamma\text{-FeOOH}$ на каждой стадии термического превращения рассчитаны величины n и y . Эмпирический состав образца $\gamma\text{-FeOOH}$ приведен в таблице.

Термограмма воздушно-сухого образца $\delta\text{-FeOOH}$ отличается от ранее описанной. В частности, относительное изменение массы этого образца в интервале $20 - 900^\circ\text{C}$ составляет 0,141. На кривой ДТА фиксируются три накладывающиеся друг на друга эндозффекта с максимумами при температурах $100, 140$ и 240°C , сопровождающиеся относительным изменением массы 0,040; 0,055 и 0,032 % соответственно. По данным масс-спектроскопических исследований эти эндозффекты обусловлены процессом дегидратации. Кроме того, в интервале $300 - 900^\circ\text{C}$ наблюдается монотонное с ростом температуры уменьшение массы образца ($\mu_{300-900} = 0,014$). По данным РФА, образец $\delta\text{-FeOOH}$, подвергнутый прокалке на воздухе при температурах выше 300°C , испытывает превращение в фазу $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, причем с ростом температуры наблюдается сужение рефлексов $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, свидетельствующих об увеличении размера кристаллов. Можно предположить, что при первом эндозффекте из образца удаляется физически адсорбированная, а при втором и третьем – конституционная вода из кристаллической структуры. Изменение массы образца в интервале $300 - 900^\circ\text{C}$ скорее всего обусловлено удалением ОН-групп, локализованных на поверхности кристаллов $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, причем этот процесс активизирует рост кристаллов $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ [9, 10]. С учетом вышеизложенного эмпирическую структурную формулу $\delta\text{-FeOOH}$ можно представить в виде $\text{FeOOH} \cdot n\text{H}_2\text{O}$, а термические превращения этой фазы при термообработке на воздухе – в виде следующей схемы:



Из данных ТГ по изменению массы образца $\delta\text{-FeOOH}$ на различных стадиях термического превращения рассчитаны величины n и y . Эмпирический состав образца $\delta\text{-FeOOH}$ приведен в таблице.

Превращения FeOOH при ГТО¹. Установлено, что в процессе ГТО фазы γ - и $\delta\text{-FeOOH}$ в зависимости от концентрации C_{MeOH} в водном растворе и температуры термообработки могут испытывать ФП как в фазу $\alpha\text{-FeOOH}$, так и $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, причем эти ФП могут протекать параллельно (рис. 1). Из рис. 1 следует: а) при фиксированной концентрации MeOH в растворе ($C_{\text{MeOH}} \neq 0$) ФП $\gamma(\delta)\text{-FeOOH} \rightarrow \alpha\text{-FeOOH}$ по сравнению с ФП $\gamma(\delta)\text{-FeOOH} \rightarrow \alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ реализуется при более низких температурах; б) при $t = \text{const}$ ФП $\gamma(\delta)\text{-FeOOH} \rightarrow \alpha\text{-FeOOH}$ и ФП $\gamma(\delta)\text{-FeOOH} \rightarrow \alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ протекают параллельно в области концентраций щелочи $1 \text{ моль/дм}^3 \leq C_{\text{MeOH}} \leq 3 \text{ моль/дм}^3$, а при $C_{\text{MeOH}} = 0$ и $C_{\text{MeOH}} \geq 3 \text{ моль/дм}^3$ FeOOH испытывают ФП в $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$; в) по сравнению с $\gamma\text{-FeOOH}$ фаза $\delta\text{-FeOOH}$ испытывает ФП в $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ при более низких температурах ГТО.

От параметров термообработки зависят также средний размер и габитус кристаллов образующихся фаз. В частности, фаза $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, формирующаяся при ГТО γ - и $\delta\text{-FeOOH}$ в дистиллированной воде, характеризуется изометрической формой кристаллов (рис. 2, а). С ростом концентрации MeOH в растворе проявляются тенденции к увеличению линейных размеров кристаллов $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, появлению у них огранки в виде октаэдри-

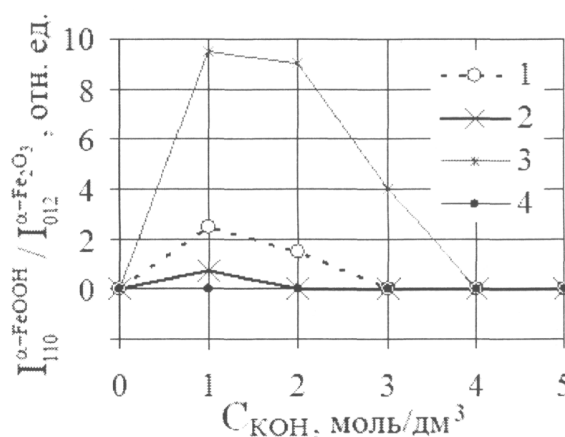


Рис. 1. Зависимости отношения интегральных интенсивностей рефлексов (110) $\alpha\text{-FeOOH}$ и (012) $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ от C_{MeOH} в образцах γ - и $\delta\text{-FeOOH}$, подвергнутых ГТО: 1 и 2 – $\gamma\text{-FeOOH}$ (температуры 200 и 220°C , соответственно); 3 и 4 – $\delta\text{-FeOOH}$ (температуры 175 и 220°C соответственно)

¹ Из экспериментальных данных следует, что закономерности превращений FeOOH при ГТО в растворах КОН аналогичны таковым, наблюдающимся для растворов NaOH, поэтому в дальнейшем не будем конкретизировать конкретную природу щелочного агента.

ческих или кубических форм в интервале концентраций $1 \text{ моль/дм}^3 \leq C_{\text{MeOH}} < 3 \text{ моль/дм}^3$, причем при $C_{\text{MeOH}} > 3 \text{ моль/дм}^3$ изометрический габитус кристаллов сменяется пластинчатым (рис. 2, б–г). Установлено: а) с ростом температуры или концентрации MeOH в растворе при фиксированном значении другого параметра происходит монотонное увеличение среднего размера кристаллов α -FeOOH и α -Fe₂O₃ в направлениях их преимущественного роста; б) при прочих одинаковых параметрах ГТО линейные размеры кристаллов фаз, формирующихся из δ -FeOOH, в 4–6 раз меньше, чем при ФП из γ -FeOOH.

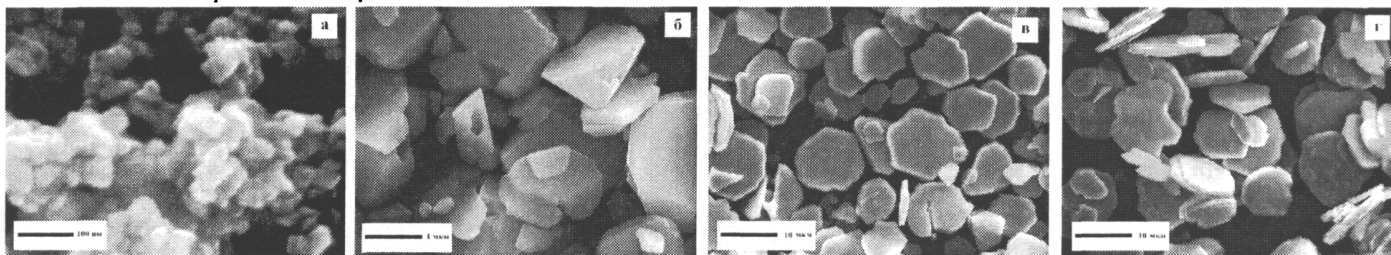


Рис. 2. Зависимость роста кристаллов от величины pH при ГТО: а – pH = 0, б – pH = 2, в – pH = 3, г – pH = 5

Обсуждение результатов

Механизм ФП γ и δ -FeOOH. Существенные изменения габитуса и среднего размера кристаллов исходной (γ (δ)-FeOOH) и образующихся при гидро-термальной обработке (α -Fe₂O₃ и α -FeOOH) фаз свидетельствуют о том, что ФП и ХП метастабильных FeOOH в щелочных средах, так же как в слабокислых растворах, реализуются по механизму «растворения–осаждения» (РОМ) [14,18], который в качестве элементарных включает стадии растворения кристаллов метастабильной фазы, образования в растворе кристаллообразующих комплексов (КОК), переноса через раствор и встраивания КОК в образовавшиеся кристаллы равновесной для данных термодинамических условий фазы. Общепринято [19], что лимитирующей стадией послойного механизма роста кристаллов является образование на атомно-гладкой грани двумерных зародышей. Поскольку для труднорастворимых соединений, в том числе для α -FeOOH и α -Fe₂O₃, размер двумерного зародыша сопоставим с размером КОК, присутствующих в растворе [20], то проблема его зарождения сводится к вопросу встраивания КОК в поверхностный слой этих кристаллов. Обратимся к рассмотрению структуры граней α -FeOOH и α -Fe₂O₃, состава и конфигурации КОК в различных по составу растворах.

Модель кристаллообразующих комплексов. В условиях пренебрежимо малого взаимодействия поверхности кристаллов с дисперсионной средой, что справедливо для нейтральных растворов, в том числе для дистиллированной воды, у α -FeOOH атомно-гладкая грань (001) состоит из чередующихся рядов из молекул воды (слой I) и гидроксильных групп (слой II), а грани (100) и (010) – из трех и двух смежных рядов гидроксильных групп соответственно, разделенных одним вакантным рядом (рис. 3, а); у α -Fe₂O₃ грань (100) включает чередующиеся ряды из молекул воды (слой I) и анионов кислорода (слой II), а грань (001) – только гидроксильные группы, формирующие на ней гексагональную сетку (рис. 3, б). По данным [20] кристаллообразующий комплекс, существующий в указанных растворах, состоит из двух, сочлененных по ребру основания бипирамиды, октаэдров (рис. 3, в) и имеет состав $[\text{Fe}_2(\text{OH})_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}]$. При встраивании КОК в кри-

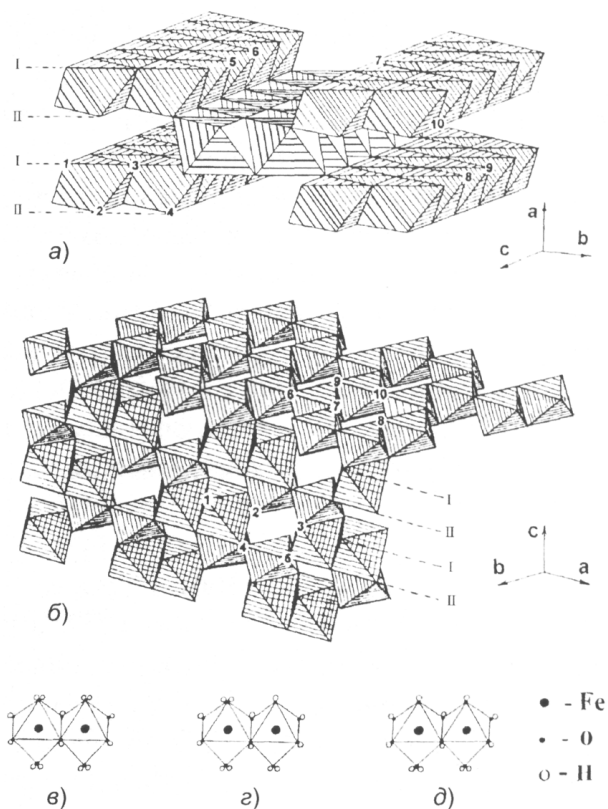
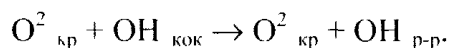


Рис. 3. Фрагменты структур фаз α -FeOOH (а) и α -Fe₂O₃ (б) в полиэдрической интерпретации и структура кристаллообразующих комплексов $[\text{Fe}_2(\text{OH})_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}]$ (в), $[\text{Fe}_2(\text{OH})_7 \cdot 3\text{H}_2\text{O}]^+$ (г) и $[\text{Fe}_2(\text{OH})_8 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]^{2-}$ (д)

сталлы $\alpha\text{-FeOOH}$ на атомно-гладкой грани (001) в точках 1–4 протекает реакция оляции; на грани (100) в точках 5, 7 – реакция оксоляции, а в точке 6 – реакция оляции; на грани (010) в точках 8, 10 – реакция оксоляции и в точке 9 – реакция оляции. У $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ на грани (100) в точках 1–3 имеет место реакция оляции и в точках 4, 5 – реакция дегидратации, а на грани (001) в точках 6–8 – реакция оксоляции и в точках 9, 10 – реакция оляции.

В щелочных растворах, особенно в области высоких температур термообработки, гидроксид натрия может вступать в реакцию с лигандами как расположенными на поверхности кристаллов, так и входящими в состав кристаллообразующих комплексов. Поэтому, во-первых, в низконцентрированных растворах NaOH следует ожидать протекания на гранях (001) у $\alpha\text{-FeOOH}$ и (100) у $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ реакции замещения (полного или частичного) молекул воды на гидроксильные группы, а в высококонцентрированных растворах, наряду с этим, – реакции оксоляции между гидроксильными группами NaOH и поверхностного слоя граней (001), (010) и (100) у $\alpha\text{-FeOOH}$, либо грани (001) у $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. В результате этих взаимодействий вышеуказанные грани приобретают отрицательный заряд, который компенсируется ионами Me^+ , находящимися в адсорбционном слое вблизи кристалла. Этим, по-видимому, объясняется возрастание растворимости оксидных соединений железа(III) в щелочных растворах по сравнению с нейтральными и слабокислыми средами, проявляющееся в увеличении равновесной концентрации гидроксоаквакомплексов (ГАК) железа(III) [21]. Во-вторых, по данным [22] в результате взаимодействия щелочи с электронейтральными ГАК $[\text{Fe}(\text{OH})_3]_{\text{aq}}$ в щелочных растворах образуются и отрицательно заряженные ГАК $[\text{Fe}(\text{OH})_3]_{\text{aq}}^-$, концентрация которых симбатно изменяется с ростом C_{NaOH} . Поэтому можно допустить, что в растворах MeOH наряду с КОК состава $[\text{Fe}_2(\text{OH})_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}]$ могут присутствовать и отрицательно заряженные комплексы $[\text{Fe}_2(\text{OH})_7 \cdot 3\text{H}_2\text{O}]^-$ (КОК', рис. 3, в) и $[\text{Fe}_2(\text{OH})_8 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]^{2-}$ (КОК'', рис. 3, д), причем максимальная концентрация первого из них достигается в низко-, а второго – в высококонцентрированных растворах MeOH.

В связи с этим по сравнению с нейтральными в щелочных средах изменяется тип реакций, протекающих при встраивании кристаллообразующих комплексов в поверхностный слой кристаллов. В частности, в низконцентрированных растворах NaOH при встраивании КОК' в структуру $\alpha\text{-FeOOH}$ на грани (001) в точках 1–3 протекает реакция оляции и в точке 4 – реакция оксоляции, а на гранях (100) и (010) соответственно в точках 5, 7 и 8, 10 – реакция оксоляции и в точках 6 и 9 – реакция дегидроксилирования, в результате которой OH-группы КОК' переходят в раствор:



У $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ на грани (100) в точках 1–3 имеет место реакция оксоляции и в точках 4, 5 – реакция дегидратации, а на грани (001) в точках 6–8 – реакция оксоляции и в точках 9, 10 – реакция оляции. В высококонцентрированных растворах NaOH при встраивании комплекса КОК'' у $\alpha\text{-FeOOH}$ на грани (001) в точке 1 протекает реакция оляции, в точках 2 и 3 – реакция дегидроксилирования и в точке 4 – реакция оксоляции, а на гранях (100) и (010) во всех точках 5–10 – реакция дегидроксилирования; у $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ на грани (100) тип протекающих реакций не изменяется, а на грани (001) в точках 6–8 – имеют место реакция дегидроксилирования и в точках 9, 10 – реакция дегидратации.

Таким образом, встраивание кристаллообразующих комплексов в кристаллы $\alpha\text{-FeOOH}$ и $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ в зависимости от концентрации NaOH в растворе может сопровождаться следующими конкурирующими реакциями: дегидратации, оляции, оксоляции и дегидроксилирования. С термодинамической точки зрения наиболее выгодными являются первые две реакции, при которых вместо слабых ван-дер-ваальсовых ($\text{Fe}(\text{III})\text{--H}_2\text{O}$) устанавливаются прочные оловые или оксосвязи между ионами железа(III) поверхности кристалла и кристаллообразующего комплекса, что приводит к уменьшению свободной энергии F системы «кристалл–КОК». Реакция оксоляции ($\text{OH}_{\text{кр}} + \text{OH}_{\text{кок}} \rightarrow \text{O}^2_{\text{кр}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{р-р}}$), сопровождающаяся депротонизацией гидроксильной группы с прочной ковалентной связью, по сравнению с реакциями оляции и дегидратации характеризуется большей энергией активации и, как следствие, реализуется при более высоких температурах термообработки [13]. Для реакции дегидроксилирования $\Delta F \approx 0$, поскольку для ее активации необходимо затратить энергию на разрыв $\text{Fe}(\text{III})\text{--OH}$ -связи в кристаллообразующем комплексе, которая по

величине сопоставима с энергией оловых и оксосвязей в кристалле, поэтому по сравнению с выше рассмотренными эта реакция не конкурентоспособна.

Исходя из числа и типа протекающих реакций при встраивании кристаллообразующих комплексов качественно оценим вероятность образования зародышей на разных гранях кристаллов и на основании этого проанализируем экспериментальные данные. В частности, уменьшением количества связей, образующихся при встраивании КОК в грани (100) и (010) (три связи) по сравнению с гранью (001) (четыре связи), в [20] объясняется преимущественный рост кристаллов α -FeOOH в кристаллографическом направлении c , а следовательно, и их столбчатый габитус. Увеличение температуры гидротермальной обработки при $C_{\text{NaOH}} = \text{const}$ приводит к активации всех реакций, в том числе и реакций оксидации на гранях (100) и (010), что проявляется как в увеличении средней длины, так и уменьшении форм-фактора кристаллов α -FeOOH. При встраивании комплексов в грани (100) и (001) α -Fe₂O₃ образуется одинаковое число (по пять) связей, следствием чего является изометрическая форма кристаллов α -Fe₂O₃, образующихся при ФП $\gamma(\delta)$ -FeOOH в нейтральных и низкоконтрированных щелочных растворах. В сильнощелочных средах из-за реакций дегидроксилирования вероятность образования зародышей на грани (001) снижается и формируются кристаллы α -Fe₂O₃ пластинчатой формы, в которых по данным рентгенографических исследований [5,13] плоскость пластины перпендикулярна кристаллографическому направлению c . В рамках модели кристаллообразующих комплексов получают интерпретацию и данные о влиянии параметров гидротермальной обработки на тип превращения FeOOH в щелочных растворах. Поскольку при росте кристаллов α -Fe₂O₃ в среднем образуется в два раза больше оксосвязей, чем у α -FeOOH, то при $C_{\text{NaOH}} = \text{const}$ ХП $\gamma(\delta)$ -FeOOH $\rightarrow$ α -Fe₂O₃ по сравнению с ФП $\gamma(\delta)$ - $\rightarrow$ α -FeOOH реализуется при более высоких температурах. Для нейтральных, низкоконтрированных ($C_{\text{MeOH}} \approx 1$ моль/дм³) и высококонтрированных ($C_{\text{NaOH}} \geq 3$ моль/дм³) растворов MeOH тип и число реакций, протекающих при встраивании КОК, КОК' и КОК'' в грани (001) α -FeOOH и (100) α -Fe₂O₃, изменяются в последовательности: 4 реакции ояции $\rightarrow$ 3 реакции ояции + 1 реакция оксидации $\rightarrow$ 1 реакция ояции + 1 реакция дегидратации + 2 реакции дегидроксилирования и 3 реакции ояции + 2 реакции дегидратации $\rightarrow$ 3 реакции оксидации + 2 реакции дегидратации (для низко- и высококонтрированных растворов MeOH) соответственно. Поэтому при $t = \text{const}$ вероятность образования зародышей α -Fe₂O₃ по сравнению с α -FeOOH больше в нейтральных и высококонтрированных щелочных средах и меньше для растворов MeOH промежуточных концентраций, что согласуется с экспериментальными данными о фазообразовании.

Выводы

1. Исследованы закономерности превращений нанодисперсных оксигидроксидов железа(III) γ - и δ - модификаций при гидротермальной обработке в воде и растворах MeOH (Me – Na, K) с концентрацией $1 \leq C_{\text{MeOH}} \leq 5$ моль/дм³ при температурах от 175 до 220 °С. Выявлены зависимости фазового и дисперсного состава (включая морфологию кристаллов) от параметров ГТО.

2. Рассмотрен возможный механизм роста кристаллов α -FeOOH и α -Fe₂O₃ в растворах, позволяющий непротиворечиво интерпретировать экспериментальные факты.

Литература

1. Krause, A. Über Silberferrite γ -FeOOH aus Ferrocacbonat und die Umwandlung des γ -FeOOH in α -FeOOH / A. Krause, K. Moroniowna, E. Przybylski // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1934. – Bd. 219. – № 1–2. – P. 203–212.
2. Van Oosterhout G.W. The transformation of γ -FeOOH to α -FeOOH / G.W. Van Oosterhout // J. Inorg. Nucl. Chem. – 1967. – Vol. 29, № 5. – P. 1235–1238.
3. Толчев, А.В. Кристаллохимический аспект фазообразования в системе γ -FeOOH – H₂O – NaOH / А.В. Толчев, Р.Р. Багаутдинова, Д.Г. Клещев // ЖПХ. – 2001. – Т. 74, № 1. – С. 389–394.
4. Feitknecht, W. Über die Oxydation von festen Hydroxyverbindungen des Eisens in wabbrigen Lösungen / W. Feitknecht // Zs. Elektrochem. – 1959. – Bd. 63. – № 1. – P. 34–43.
5. Hiller, J.E. Phasenumwandlung im Rost / J.E. Hiller // Werkstoffe und Korrosion. – 1966. – Bd. 17. – № 11. – P. 943–951.
6. Keller, P. Vorkommen, Entstehung und Phasenumwandlung von β -FeOOH im Rost / P. Keller // Werkstoffe und Korrosion. – 1969. – Bd. 20. – № 2. – P. 102–108.

7. Datta, N.C. Chemistry of iron(III) oxides and oxyhydroxide / N.C. Datta // J. Sci. Industr. Res. – 1981. – Vol. 40, № 9. – P. 571–583.
8. Bechine, K. Transformation of synthetic γ -FeOOH (lepidocrocite) in aqueous solution of ferrous sulfate / K. Bechine, J. Subrt, T. Hanslik *et al.* // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1982. – Bd. 489. – Issue 1. – P. 186–196.
9. Толчев, А.В. Превращения микрокристаллического δ -FeOOH при термообработке на воздухе и в растворах / А.В. Толчев, Д.Г. Клещев, Н.Г. Краснобай и др. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. – 1988. – Т. 24, № 6. – С. 964–968.
10. Клещев, Д.Г. О фазовых и химических превращениях в труднорастворимых дисперсных системах / Д.Г. Клещев, Р.Н. Плетнев, Г.П. Швейкин // Докл. АН СССР. – 1990. – Т. 309, № 3. – С. 645–648.
11. Клещев, Д.Г. Получение нанокристаллических оксидов Ti, Mn, Co, Fe и Zn в водных растворах при термообработке / Д.Г. Клещев // Неорган. материалы. – 2005. – Т. 41, № 1. – С. 46–53.
12. Способ получения слюдистой α -Fe₂O₃: Пат. 3987156 (США). МКИ С 01 G49/02. // Изобретения за рубежом. – 1977. – № 4. – Вып. 23.
13. Толчев, А.В. Фазовые и химические превращения γ -FeOOH в растворах NaOH / А.В. Толчев, Р.Р. Багаутдинова, Д.Г. Клещев и др. // Неорган. материалы. – 1996. – Т. 32, № 11. – С. 1377–1380.
14. Толчев, А.В. Гидротермальный синтез антикоррозионного пигмента «железная слюдка» / А.В. Толчев, Р.Р. Багаутдинова, Д.Г. Клещев и др. // Лакокрасочные материалы и их применение. – 2001. – № 1. – С. 13–15.
15. Яковлев, А.Д. Химия и технология лакокрасочных покрытий / А.Д. Яковлев. – СПб.: ХИМИЗДАТ, 2008. – 448 с.
16. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия / Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, Л.Н. Расторгуев. – М.: Металлургия, 1982. – 632 с.
17. A kinetic study of the thermal decomposition of iron(III) hydroxide oxides. Part 1. α -FeOOH in banded iron formations / N. Koga, Sh. Takamoto, S. Okada, H. Tanaka // Thermochemica Acta. – 1995. – Vol. 254, № 1. – P. 193–206.
18. Факторы, влияющие на кинетику превращения α -FeOOH $\rightarrow$ α -Fe₂O₃ / Р.Р. Багаутдинова, Д.Г. Клещев, Р.Н. Плетнев и др. // Неорган. материалы. – 1998. – Т. 34, № 5. – С. 584–586.
19. Современная кристаллография: в 4 т. / под ред. Б. К. Вайнштейна. – М.: Наука, 1980. – Т. 3. – 408 с.
20. Распопов, Ю.Г. Влияние структуры затравочных кристаллов на рост гетита и гематита / Ю.Г. Распопов, А.И. Шейнкман, А.А. Бубнов и др. // Изв. АН СССР. Неорганические материалы. – 1983. – Т. 19, № 2. – С. 299–301.
21. Исследование процесса растворения гетита (α -FeOOH) в щелочных растворах / А.А. Камнев, Б.Б. Ежов, О.Г. Маландин, А.В. Васев // Журн. прикл химии. – 1986. – Т. 59, № 8. – С. 1689–1693.
22. Perrin, D.D. The stability of iron complexes / D.D. Perrin // J. Chem. Soc. – 1959. – № 5. – P. 1710–1719.

Поступила в редакцию 8 июля 2012 г.

MECHANISM OF PHASE TRANSFORMATIONS γ - AND δ -FeOOH DURING HEAT TREATMENT IN SOLUTIONS MeOH (Me – Na, K): MODEL OF CRYSTAL-FORMING COMPLEXES

V.Sh. Mirasov¹, R.R. Klescheva², V.A. German³, D.G. Kleshev⁴, Yu.I. Ryabkov⁵

Transformations of nanodispersed ferrum (III) oxy hydroxides of γ - and δ -modifications at heat treatment in the open air (temperature interval 25–900°C) as well as at hydrothermal treatment (175–220 °C) in water and water solutions MeOH (Me – Na, K) with concentration $1 \leq C_{\text{MeOH}} \leq 5 \text{ molc/dm}^3$ are studied by methods of X-ray phase analysis, raster and transmission electronic microscopy, thermogravimetry, masspectroscopy and X-ray fluorescence analysis. Spheres of phases α -FeOOH и α -Fe₂O₃ formation are specified. Possible structure of crystal-forming complexes formed in solutions and reactions running during their fusion in different atomically rough planes α -FeOOH and α -Fe₂O₃ is considered. In terms of a model of crystal-forming complexes experimentally stated dependencies crystal habits as well as phase and disperse structure of formed products on parameters of hydrothermal treatment are explained.

Keywords: hydrothermal treatment, ferrum (III) oxy hydroxides, phase transformations, water solution MeOH.

References

1. Krause A., Moroniowna K., Przybylski E. Uber Silberferrite γ -FeOOH aus Ferrocacarbonat und die Umwanflung des γ -FeOOH in α -FeOOH. *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1934. Bd. 219. no. 1–2. pp. 203–212.
2. Van Oosterhout G.W. The transformation of γ -FeOOH to α -FeOOH. *J. Inorg. Nucl. Chem.* 1967. Vol. 29, no. 5. pp. 1235–1238.
3. Tolchev A.V., Bagautdinova R.R., Kleshchev D.G. *ZhPKh*. 2001. Vol. 74, no. 1. pp. 389–394. (in Russ.).
4. Feitknecht, W. Uber die Oxydation von festen Hydroxyverbindungen des Eisens in wabbrigen Losungen. *Zs. Elektrochem.* 1959. Bd. 63. no. 1. pp. 34–43.
5. Hiller J.E. Phasenumwandlung im Rost. *Werkstoffe und Korrosion*. 1966. Bd. 17. no. 11. pp. 943–951.
6. Keller P. Vorkommen, Entstehung und Phasenumwandlung von β -FeOOH im Rost. *Werkstoffe und Korrosion*. 1969. Bd. 20. no. 2. pp. 102–108.
7. Datta N.C. Chemistry of iron(III) oxides and oxyhydroxide. *J. Sci. Industr. Res.* 1981. Vol. 40, no. 9. pp. 571–583.
8. Bechinê K., Šubrt J., Hanslík T., Zapletal V., Tláškal G.J., Lipka J., Sedlák B., Rotter M. Transformation of synthetic γ -FeOOH (lepidocrocite) in aqueous solution of ferrous sulfate. *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1982. Bd. 489. Issue 1. pp. 186–196. DOI: 10.1002/zaac.19824890122.
9. Tolchev A.V., Kleshchev D.G., Krasnobai N.G. *et. al. Izv. AN SSSR. Neorgan. materialy*. 1988. Vol. 24, no. 6. pp. 964–968. (in Russ.).
10. Kleshchev D.G., Pletnev R.N., Shveikin G.P. *Dokl. AN SSSR*. 1990. Vol. 309, no. 3. pp. 645–648. (in Russ.).
11. Kleshchev D.G. Poluchenie nanokristallicheskich oksidov Ti, Mn, Co, Fe i Zn v vodnykh rastvorakh pri termoobrabotke. *Neorgan. materialy*. 2005. Vol. 41, no. 1. pp. 46–53. (in Russ.).
12. Sposob polucheniia sliudistoi α -Fe₂O₃ (A method of producing mica α -Fe₂O₃): Pat. 3987156 (USA). MKI S 01 G49/02. *Izobreteniiia za rubezhom*. 1977. no. 4. Issue 23. (in Russ.).
13. Tolchev A.V., Bagautdinova R.R., Kleshchev D.G., Pletnev R.N., Koptev I.V. Chemical and Phase Transformations of γ -FeOOH in NaOH Solutions. *Inorganic Materials*. Vol. 32, no. 11. p. 1207.

¹ Mirasov Vadim Shafikovich is Post-graduate Student, General and Experimental Physics department, South Ural State University. E-mail: mirasov(a)gmail.com

² Klescheva Regina Raisovna is Researcher, Ltd. "Scientific research institute Pigmentary materials".

³ German Valentina Andreevna is Researcher, Ltd. "Scientific research institute Pigmentary materials".

⁴ Kleshev Dmitry Georgievich is Dr. Sc. (Chemistry), Professor, General and Experimental Physics Department, South Ural State University.

⁵ Ryabkov Yuri Ivanovich is Dr. Sc. (Chemistry), Institute of Chemistry, Komi Scientific Center of UB RAS.

E-mail: ryab2007(a)rambler.ru

14. Tolchev A.V., Bagautdinova R.R., Kleshchev D.G. *et al.* *Lakokrasochnye materialy i ikh primeneniye*. 2001. no. 1. pp. 13–15. (in Russ.).
15. Iakovlev A.D. *Khimiia i tekhnologiia lakokrasochnykh pokrytii* (Chemistry and paint coating technology). Sankt-Peterburg: Khimizdat, 2008. 448 p.
16. Umanskii Ya.S., Skakov Yu.A., Ivanov A.N., Rastorguev L.N. *Kristallografiia, rentgenografiia i elektronnaia mikroskopiia* (Crystallography, radiography and electronic microscopy). Moscow: Metallurgii, 1982. 632 p. (in Russ.).
17. Koga N., Takamoto Sh., Okada S., Tanaka H. A kinetic study of the thermal decomposition of iron(III) hydroxide oxides. Part 1. α -FeOOH in banded iron formations. *Thermochimica Acta*. 1995. Vol. 254, no. 1. pp. 193–206.
18. Bagautdinova R.R., Kleshchev D.G., Plotnev R.N., Tolchev A.V., Koptev I.V. Kinetics of the α -FeOOH $\rightarrow$ α -Fe₂O₃ Transformation in NaOH Solutions. *Inorganic Materials*. 1998. Vol. 34. Issue 5. p. 474.
19. Vainshteina B.K. (ed.) *Sovremennaiia kristallografiia: v 4 t.* (Modern crystallography: in 4 vol.). Moscow: Nauka, 1980. Vol. 3. 408 p. (in Russ.).
20. Raspopov Yu.G., Sheinkman A.I., Bubnov A.A. *et al.* *Izv. AN SSSR. Neorganicheskie materialy*. 1983. Vol. 19, no. 2. pp. 299–301.
21. Kamnev A.A., Ezhov B.B., Malandin O.G., Vasev A.V. *Zhurnal prikladnoi khimii*. 1986. Vol. 59, no. 8. pp. 1689–1693. (in Russ.).
22. Perrin D.D. The stability of iron complexes. *J. Chem. Soc.* 1959. no. 5. pp. 1710–1719.

ПРОБЛЕМЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЯЗКОСТИ УГЛЕВОДОРОДОВ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

С.Н. Редников¹

Рассматриваются проблемы, возникшие перед автором при проектировании и эксплуатации установки измерения вязкости углеводородов при высоких давлениях. Приведено описание конструкции экспериментальной установки. Подробно рассмотрены вопросы определения давления и температуры исследуемой среды.

Ключевые слова. давление, температура, вязкость, углеводороды.

Введение

Вязкостные характеристики углеводородов в диапазоне давлений менее 150 МПа достаточно хорошо изучены [1–3]. Исследование поведения углеводородов при давлениях более 150 МПа, а также в области фазовых переходов, где могут наблюдаться как процессы стеклования, так и кристаллизации [2], затруднено появлением фаз, сильно отличающихся по вязкости. Кроме того, при давлениях выше 200 МПа при проектировании вискозиметров необходимо принимать во внимание изменение с ростом давления свойств конструкционных материалов, параметров измерительных устройств, химической активности среды и других факторов [4].

Анализ конструкций установок, используемых при давлениях свыше 150 МПа, показывает, что преобладают модификации вискозиметра Стокса, оснащенные системой фиксации времени перемещения тела под действием силы тяжести внутри контейнера, где и создается требуемое давление [5]. Подобный подход, по мнению автора, не совсем корректен, так как возможность полного учёта начальных сдвиговых напряжений проблематична. Применение вискозиметров, использующих эффект затухающих колебаний, при исследовании вязкости углеводородов при высоких давлениях ограничено эффектами, связанными с изменением механических свойств материалов упругого подвеса при давлениях свыше 200 МПа [6]. Капиллярные и ротационные вискозиметры позволяют производить определение вязкости углеводородов при высоких давлениях с достаточной точностью.

Описание установки. Применённый для исследования вязкостных характеристик углеводородов капиллярный вискозиметр (рис. 1) оснащён капилляром диаметром $d = 0,5$ мм длиной 95 мм, выполненным из твёрдого сплава, что обеспечивает ламинарный режим движения жидкости во всём диапазоне реализуемых расходов. Перепад давлений при ламинарном движении жидкости в капилляре известной геометрии определяет вязкость вещества. Движение жидкости осуществляется путём перемещения системы плунжеров, входящих в состав мультипликаторов давлений, необходимых для получения давлений более 200 МПа. Отдельный контур используется для заполнения исследуемой жидкостью и создания предварительного давления в полости вискозиметра. Регистрация расхода жидкости, а также степени изменения объёма с ростом давления осуществляется путём отслеживания положения плунжера. Регулирование скорости движения плунжеров осуществлялось дросселем. Прохождение исследуемой жидкости через рабочую полость однократное. При работе на давлениях свыше 10^8 Па применялись лишь самоуплотняющиеся уплотнения, аналогичные применённым Циклисом [5].

Проблемы, возникшие при эксплуатации установки. Известно, что точность определения вязкости при использовании капиллярного вискозиметра определяется точностью определения перепада давления на капилляре. Для замера давления применены манганиновые манометры, имеющие рабочий диапазон от 200 МПа до 1000 МПа, но используемый в датчиках материал меняет своё электрическое сопротивление как при изменении давления, так и при изменении температуры [6]. Пробные прогоны показали наличие изменения температуры. Следовательно, ставилась под сомнение точность определения вязкости. Кроме того, представляла интерес температура жидкости и её время стабилизации.

¹ Редников Сергей Николаевич – кандидат технических наук, кафедра гидравлики и гидромеханических систем, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: srednikov@mail.ru

Классический подход предусматривает подъём давления до заданной величины и только после стабилизации температуры организация движения в капилляре. Нельзя было исключить повторный рост температуры при создании перепада давлений на капилляре.

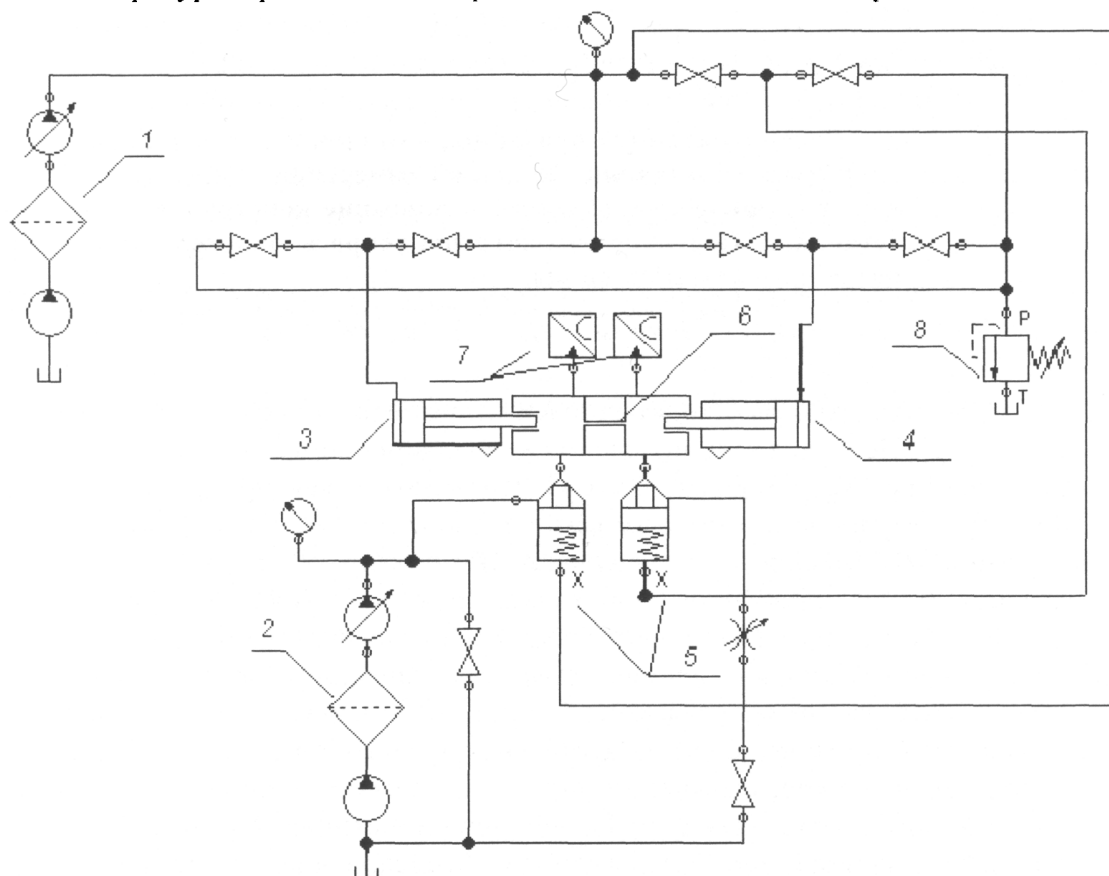


Рис. 1. Схема капиллярного вискозиметра

Подходы к решению. Поскольку отсутствие надёжной системы контроля температуры ставило под сомнение достоверность получаемых результатов, наибольшее внимание было уделено этому вопросу. Использование термопар затруднено тем, что высокое давление вызывает изменение термоэлектрической движущей силы термопары [4, 6], что существенно влияет на ее показания. Даже если пользоваться предложенной П.У. Бриджманом, Ф. Бонди и К. Свенсоном поправкой, точность исследований окажется очень низкой [6].

Было принято решение проводить расчет температуры исследуемой жидкости в камере высокого давления, опираясь на результаты замеров температурных полей наружной поверхности аппарата. Предложенная методика основана на том, что имеем дело с процессом теплообмена через многослойную стенку из материала с известной теплопроводностью при граничных условиях, характеризуемых постоянным коэффициентом теплоотдачи в окружающую среду, и изменяющейся температурой исследуемой среды внутри аппарата. Зная коэффициент теплопроводности материала корпуса его зависимость от давления [7] начальное распределение температур в установке, геометрию аппарата, можем рассчитывать значение температуры самой жидкости в любой момент времени. Такой подход позволяет достаточно легко определить время стабилизации температуры, получить значения изменения температуры жидкости на границе внутренней поверхности корпуса как после повышения давления на этапе стабилизации, так и при движении жидкости в капилляре. Кроме того, одновременно решалась задача определения количества теплоты, выделяющейся в исследуемой жидкости, и изменения теплопроводности при повышении давления. Недостатком такого подхода является высокая тепловая инерционность процесса распространения тепла в корпусе аппарата, подход требует высокой точности определения температур, не ниже десятых долей градуса, чтобы оценить температуру исследуемой среды с точностью до градуса. Определение температуры поверхности корпуса осуществлялось при помощи тепловизора с разрешающей способностью 0,08 градуса.

Была решена задача определения температуры на границе корпус–исследуемая среда двумя методами: методом прямого численного моделирования в программном пакете SolidWorks (Cos-

mos Works), а также было получено упрощённое выражение для определения температуры исследуемой среды.

Процесс теплопереноса в этих условиях описывается классическим дифференциальным уравнением теплопроводности:

$$c_p \rho \frac{\partial t}{\partial \tau} = \lambda \left(\frac{\partial^2 t}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial z^2} \right). \quad (1)$$

Стадии исследуемого процесса охватывают промежутки времени, характеризующиеся величинами критерия Фурье $Fo \leq 0,55$, где $Fo = at_0/l^2$, a – коэффициент температуропроводности, l – характерный линейный размер тела, t_0 – характерное время изменения внешних условий, ρ – плотность, c_p – теплоёмкость, λ – теплопроводность, τ – время, t – температура.

Чтобы упростить решения этого уравнения принимаются следующие допущения: потери тепла с боковой части поверхности корпуса аппарата отсутствуют; распределение температуры по объёму в начальный момент времени и в поперечном сечении для любого момента времени принимается равномерным, тепловое сопротивление контакта отсутствует, стенка аппарата цилиндрическая многослойная.

Учитывая вышеперечисленные допущения, решение дифференциального уравнения теплопроводности принимает вид:

$$t = A + Bx + C \frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{x}{\sqrt{4a\tau}}} e^{-\frac{x}{\sqrt{4a\tau}}} d\left(\frac{x}{\sqrt{4a\tau}}\right), \quad (2)$$

где A, B, C – константы интегрирования.

Постоянная интегрирования A определяется для условий $x=0$ и для начального момента времени из уравнения $t = t_{x=0} = A$.

При $\tau=0$ решение уравнения теплопроводности принимает вид

$$t = A + B \cdot x + C.$$

Из него следует, что $B=0$, так как $t_n = \text{const}$, а $C = t_n - t_{x=0}$.

Для подтверждения адекватности применённого метода измерения температуры был поставлен натурный эксперимент.

Во внутреннюю полость вискозиметра, имевшего начальную температуру 19°C , установленного в вертикальном положении, была помещена откалиброванная термопара, таким образом, чтобы она показывала температуру в зоне контакта рабочей жидкости и внутренней поверхности корпуса. Затем полость, с помещенной в нее термопарой, была заполнена водой, температура которой составляла 100°C .

После этого в течение последующих 15 мин с интервалом, равным одной минуте, делалась тепловизионная фотография внешней поверхности корпуса и проводилась запись показаний термопары.

Полученные данные представлены на рис. 2–5.

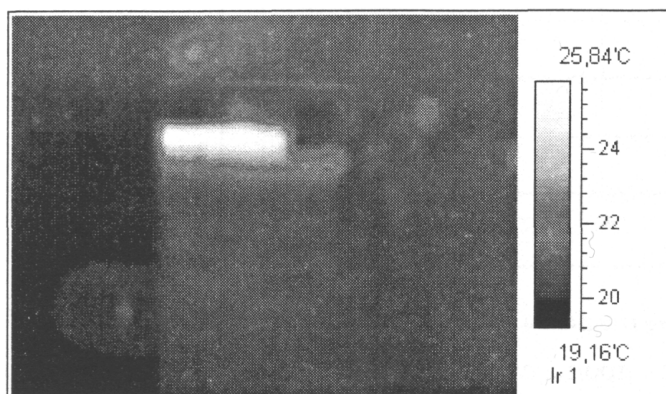


Рис. 2. Снимок, сделанный спустя 1 мин



Рис. 3. Снимок, сделанный спустя 2 мин



Рис. 4. Снимок, сделанный спустя 3 мин



Рис. 5. Снимок, сделанный спустя 13 мин

Используя тепловизионные фотографии, определим изменение температуры t на внешней поверхности корпуса вискозиметра с течением времени (на графиках время приведено в минутах) (рис. 6).

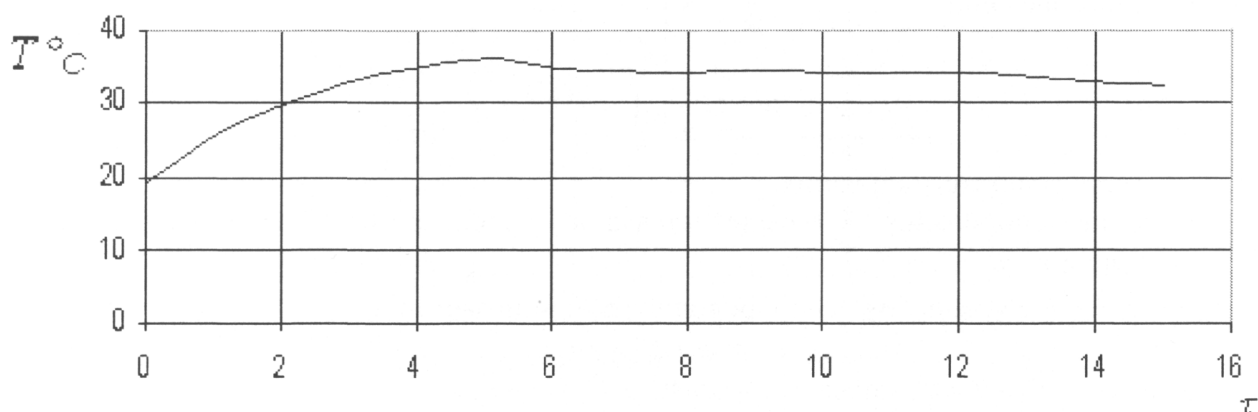


Рис. 6. Изменение температуры корпуса

Сопоставляем графики температур, определенных при помощи термопары непосредственно в зоне контакта жидкости с внутренней поверхностью, и температур, рассчитанных с использованием предложенной методики (рис. 7).

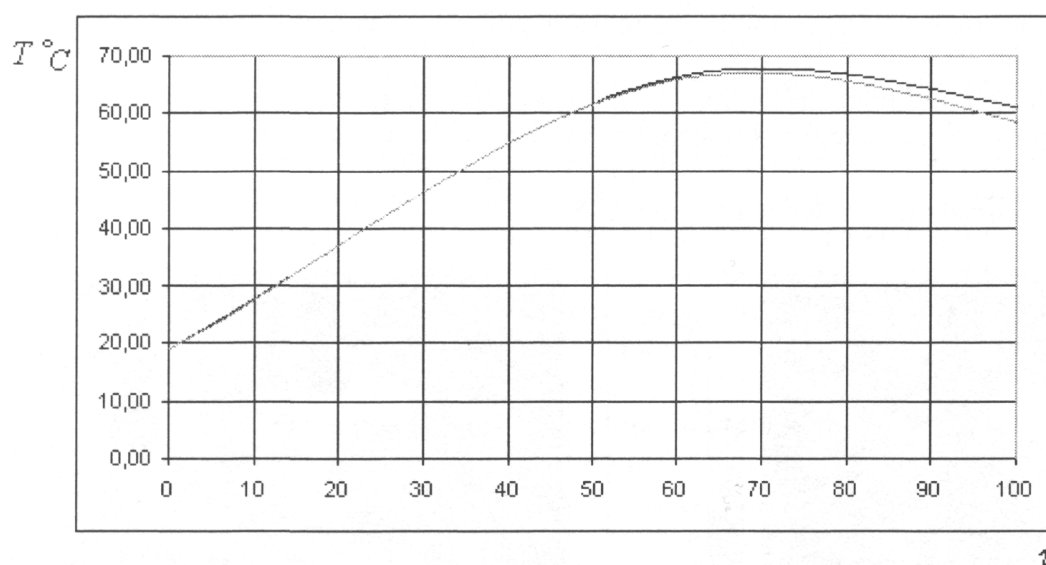


Рис. 7. Сопоставление графиков температур

Кроме того, производилось моделирование процесса нагрева с использованием программного пакета SolidWorks (Cosmos Works), результаты моделирования представлены на рис. 8.

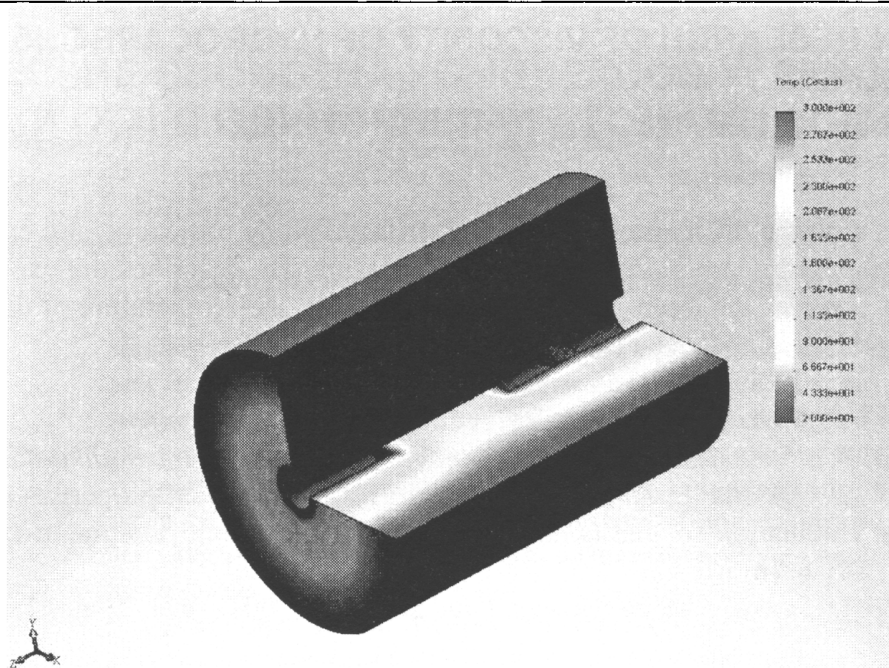


Рис. 8. Результат моделирования распределения температуры, выполненный с использованием программного пакета SolidWorks

Выводы

Результаты натурного и математического моделирования показывают достаточную точность предложенного метода определения температуры, который позволяет определять теплоту фазовых переходов и химических реакций, проходящих при высоких давлениях.

Желательно обеспечить минимальный внутренний объем исследуемой жидкости.

Литература

1. Кучеров, В.Г. Теплофизические свойства водонефтяных эмульсий и методика их расчета для условий сбора и подготовки нефти: дис. ... канд. техн. наук / В.Г. Кучеров. – М.: 1987. – 141 с.
2. Черноуцан, А.И. Физические свойства процесса стеклования / А.И. Черноуцан // Соросовский образовательный журнал. – 2001. – Т. 7, № 3. – С. 103–111.
3. Скородумов, В.Ф. Термодинамические аспекты стеклования под давлением / В.Ф. Скородумов // Журнал физической химии. – 1994. – Т. 68, № 12. – С. 2254–2256.
4. Циклис, Д.С. Техника физико-химических исследований при высоких давлениях / Д.С. Циклис. – 3-е изд. – М.: Химия, 1965. – 416 с.
5. http://www.f5-tech.de/micropvt_hp_viscometer.html?&L=1
6. Бриджмен, П.В. Исследования больших пластических деформаций и разрыва: пер. с англ. / П.В. Бриджмен. – М.: Мир, 1955. – 467 с.
7. Бриджмен, П.В. Физика высоких давлений: пер. с англ. / П.В. Бриджмен. – М.: ОНТИ, 1935. – 256 с.

Поступила в редакцию 3 октября 2011 г.

DIFFICULTIES IN RESEARCH OF VISCOSITY OF HYDROCARBONS AT HIGH PRESSURE

S.N. Rednikov¹

This article deals with the difficulties that the author faced while projecting and exploiting an installation for measuring the hydrocarbon viscosity at high pressure. He describes the experimental installation construction and analyzes the issues of defining the pressure and temperature of the researched area.

Keywords: pressure, temperature, viscosity, hydrocarbons.

References

1. Kuchеров V.G. *Teplofizicheskie svoistva vodoneftianykh emul'sii i metodika ikh rascheta dlia uslovii sbora i podgotovki nefiti: dis. ... kand. tekhn. nauk* (Thermophysical properties of oil-water emulsions and methods of calculation for the conditions of oil gathering and treatment: Dis. ... Cand. Eng. Sci.). Moscow, 1987. 141 p. (in Russ.).
2. Chernoutsan A.I. *Sorosovskii obrazovatel'nyi zhurnal*. 2001. Vol. 7, no. 3. pp. 103–111. (in Russ.).
3. Skorodumov V.F. *Zhurnal fizicheskoi khimii*. 1994. Vol. 68, no. 12. pp. 2254–2256.
4. Tsiklis D.S. *Tekhnika fiziko-khimicheskikh issledovani pri vysokikh davleniiakh* (Technique physico-chemical studies at high pressures). Moscow: Khimiia, 1965. 416 p. (in Russ.).
5. http://www.f5-tech.de/micropvt_hp_viscometer.html?&L=1
6. Bridzhmen P.V. (Bridgman P.W.) *Issledovaniia bol'shikh plasticheskikh deformatsii i razryva* (Studies of large plastic deformation and break). Moscow: Mir, 1955. 467 p. (in Russ.).
7. Bridzhmen P.V. (Bridgman P.W.) *Fizika vysokikh davlenii* (High pressure physics). Moscow: ONTI, 1935. 256 p. (in Russ.).

¹ Rednikov Sergey Nikolaevich is Cand. Sc. (Engineering), Hydraulics and Hydropneumo systems Department, South Ural State University.
E-mail srednikov@mail.ru

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ (7,7) С ОДИНОЧНЫМИ АТОМАМИ Li , Na , S И Se ¹

С.А. Созыкин², В.П. Бескачко³

Приводятся теоретические оценки влияния малых концентраций (~1 ат. %) атомов Li , Na , S и Se на электрическое сопротивление углеродной нанотрубки с металлическим типом проводимости. Рассчитанные зависимости сопротивления от разности потенциалов демонстрируют малое изменение сопротивления нанотрубки при взаимодействии с атомами щелочного металла. При внедрении атомов халькогенов в полость нанотрубки ее сопротивление увеличивается на мало зависящую от напряжения величину, в то время как адсорбция на внешней поверхности приводит к заметному увеличению сопротивления, возрастающему с увеличением разности потенциалов.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, электрическое сопротивление, теория функционала плотности, метод неравновесных функций Грина.

Введение

Уникальные свойства углеродных нанотрубок (УНТ) создали перспективу для их использования в элементах электронных устройств [2]. Для конструирования последних важна возможность изменения рабочих свойств в направлении, обеспечивающем наиболее эффективное функционирование устройства – возможность функционализации этих элементов. Для приложений в электронике главными являются электрические свойства элементов. Функционализация нанотрубок в рассматриваемом контексте означает изменение этих свойств за счет направленного изменения химического состава и строения трубок. К настоящему времени опытным путем установлена [2] возможность адсорбции внутренними и внешними поверхностями трубок множества атомных и молекулярных систем различной химической природы, от отдельных атомов до сложных органических молекул [3] и даже простейших биологических систем (вирусов). Из теоретических оценок [4] следует также, что присутствие даже небольших количеств адсорбата на поверхности трубки способно сильно повлиять на свойства образующегося комплекса. Имевшиеся сейчас сведения об адсорбционных комплексах УНТ довольно многочисленны, благодаря, в основном, богатому выбору адсорбатов. Они касаются по большей части возможности существования комплексов, их атомной и электронной структуры, и очень редко – свойств, представляющих интерес для практики, например, электропроводности. Определение этих свойств на опыте сопряжено с целым рядом проблем и поэтому на настоящем этапе исследований целесообразно получить их теоретическую оценку.

В связи с перспективами создания на основе УНТ литиевых батарей нового поколения, рядом научных групп было проведено исследование комплексов углеродных нанотрубок с этим металлом. Работы, в основном, были направлены на определение устойчивых конфигураций атомов лития вблизи поверхности углеродных нанотрубок [5, 6]. Данные об электрическом сопротивлении комплексов в настоящее время отсутствуют.

Известны экспериментальные исследования, продемонстрировавшие уменьшение электрического сопротивления пучков УНТ посредством их интеркалирования соединениями серы ($SOBr_2$ [7] и $SOCl_2$ [8]), вызвавшие интерес у теоретиков. Расчеты, описанные в работе [9], указывают на исчезновение запрещенной щели в энергетическом спектре и появление проводящих каналов при наличии цепочек атомов серы на внешней поверхности УНТ (8,0), обладающей полупроводниковой проводимостью. Однако нам не известны работы, в которых изучалось бы влияние серы на УНТ с металлическим типом проводимости.

¹ Работа выполнялась при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (И К № 14.740.11.1420 от 02 ноября 2011 г.), Минобрнауки (государственное задание № 2012065).

² Созыкин Сергей Анатольевич – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: sergey.sozykin@gmail.com

³ Бескачко Валерий Петрович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

Необходимо отметить, что атомы лития и серы являются донорами и акцепторами электронов соответственно. Рассмотрение влияния этих, противоположных в указанном смысле, типов атомов в рамках одной и той же методики расчета представляет особый интерес, поскольку позволяет исключить неопределенности, связанные с выбором метода расчета и его реализацией на компьютере. Для полноты картины были исследованы еще два элемента, обладающие донорными (натрий) и акцепторными (селен) свойствами.

В данной работе оценивается влияние поверхностных атомов лития, натрия, серы и селена на электрическое сопротивление углеродной нанотрубки с металлическим типом проводимости в пределах малых концентраций (≤ 1 ат. %), когда взаимодействием этих атомов друг с другом можно пренебречь.

Методика расчета

В настоящее время наиболее зарекомендовавшим себя способом определения проводимости молекулярных структур является метод неравновесных функций Грина, который реализован в ряде коммерческих и свободно распространяемых программных продуктов. В качестве инструмента моделирования в данной работе выбран квантово-механический пакет Siesta (и его модификация TranSiesta).

Расчет электрической проводимости с использованием пакета TranSiesta состоит из следующих этапов:

1. Поиск равновесной конфигурации моделируемого фрагмента. При этом оптимизация его геометрии проводится с использованием периодических граничных условий.

2. Генерация данных о строении и свойствах электродов (TSHS файлов), которые содержат информацию, необходимую для расчета электрического тока, возникающего в системе электрод–нанотрубка–электрод при конечной разности потенциалов.

3. Расчет электрической проводимости, который начинается с обычной процедуры расчета матрицы плотности с использованием схемы Кона–Шэма для периодических систем. Этот расчет используется в качестве входной информации для процедуры самосогласования в методе функций Грина. При этом периодические граничные условия накладываются только в плоскости XOY, тогда как ось нанотрубки ориентируется в направлении оси OZ. С двух концов нанотрубка соединяется с электродами, расчет которых проводился на втором этапе.

При изучении УНТ, адсорбировавшей одиночный атом, размер моделируемого фрагмента должен обеспечить отсутствие взаимодействия адсорбированного атома с самим собой (в результате применения периодических граничных условий). Среди рассмотренных нами адсорбатов максимальным ковалентным радиусом R_c обладает атом натрия (0,166 нм [10]). Выбрав в качестве критерия большой удаленности атомов друг от друга величину $6R_c$, получим, что длина фрагмента нанотрубки вдоль оси OZ должна быть около 1 нм. Поскольку атомы предполагается размещать как снаружи нанотрубки, так и в ее внутренней полости, диаметр УНТ не может быть слишком малым. Учитывая конечность толщины стенки нанотрубки (примем ее равной межплоскостному расстоянию в графите 0,345 нм) получаем условие, обеспечивающее возможность нахождения атома натрия во внутренней полости, при котором несущественно изменяется электронная плотность на стенке трубки: $0,345 + 2 \cdot 0,166 = 0,677$ (нм). На основании этих соображений в качестве объекта моделирования был выбран фрагмент нанотрубки (7,7) (диаметр углеродного каркаса 0,95 нм), состоящий из 112 атомов углерода (длина фрагмента 0,99 нм).

Требование периодичности, накладываемое на электроды, ограничивает их возможные длины значениями $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{4}$ и т.д. от длины рассматриваемого фрагмента УНТ. Использование самого короткого из них, хотя и позволяет получать достоверные значения электрической проводимости [11], но приводит к ошибке в сопротивлении полой индивидуальной нанотрубки на уровне 3 %. Использование электрода вдвое большей длины (как показали предварительные расчеты) позволяет добиться уменьшения этой погрешности в 2 раза. Дальнейшее увеличение размера электрода приводит к существенному увеличению времени расчета, из-за чего погрешность, получаемая при его использовании, не была определена. В данной работе применялись электроды, состоящие из 56 атомов углерода, показанные на рис. 1. Таким образом, размер системы составил 225 атомов (224 атома углерода и 1 адсорбированный атом).

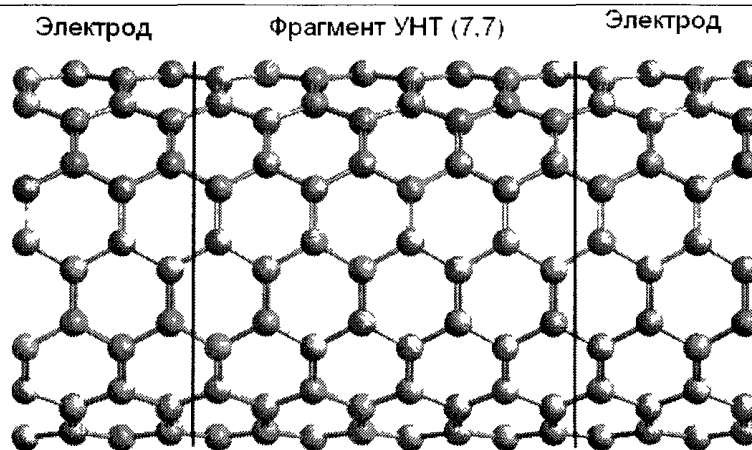


Рис. 1. Модель углеродной нанотрубки (7,7) с электродами

При расчетах использовался обменно-корреляционный функционал Каперлея–Алдера (Ceperley–Alder) [12]. В качестве альтернативного функционала рассматривался обменно-корреляционный функционал PBE [13]. Выбор в пользу функционала Каперлея–Алдера был сделан потому, что, несмотря на абсолютно одинаковые результаты в предсказании зонной структуры и плотности электронных состояний, при расчете проводимости данный функционал позволял получать лучшую сходимость и точность.

Расчет плотности состояний индивидуальной УНТ (7,7) был проведен для трех базисных наборов: SZ, DZ и DZP. При использовании последних двух получались близкие результаты. Использование базиса SZ, самого малого из перечисленных, приводит к искаженной плотности электронных состояний. Из-за большой вычислительной сложности задачи нам пришлось ограничиться базисным набором DZ.

Результаты и их обсуждение

Равновесные положения рассматриваемых атомов (Li, Na, S, Se) определялись во внутреннем канале и на внешней поверхности УНТ (7,7). Поиск равновесной конфигурации систем «нанотрубка + адсорбированный атом» проводился по методу сопряженных градиентов до тех пор, пока силы, действующие на атомы, не становились меньше 0,4 эВ/нм.

Из рассматриваемых в данной работе атомов-адсорбатов детальная информация о расположении относительно УНТ имеется только для лития [5, 6]. Известно также энергетически наиболее выгодное положение серы на внешней поверхности УНТ. Рассмотрим коротко равновесные конфигурации, полученные в данной работе. Для атомов щелочных металлов характерно расположение над центром шестиугольника каркаса нанотрубки. Стоит отметить, что геометрия каркаса нанотрубки нечувствительна к внедрению атомов лития и натрия в ее полость (в сечении – окружность с радиусом 0,478 нм). При расположении этих атомов на внешней поверхности происходит небольшое сжатие УНТ в направлении, проходящем через ось нанотрубки и адсорбированный атом. При размещении на внешней поверхности УНТ атомы лития и натрия находятся на меньшем расстоянии от стенки, чем при размещении в полости (для лития 0,190 и 0,198 нм, для натрия 0,220 и 0,264 нм, соответственно). Для атомов халькогена предпочтительным оказывается расположение над серединой связи C–C каркаса нанотрубки. Однако, это отчетливо видно лишь при расположении атома на внешней поверхности УНТ, когда его расстояния до пары атомов углерода свидетельствуют об образовании ковалентной связи (0,189 нм для серы и 0,207 нм для селена). Длина связи C–S хорошо согласуется с полученной в работе [14] (0,19 нм). При размещении в полости УНТ расстояние до атомов углерода становится настолько большим (0,350 нм для серы и 0,370 нм для селена), так что говорить о наличии связи, скорее всего, нельзя.

На рис. 2 приведены результаты расчета зонной структуры УНТ. Полученные дисперсионные кривые индивидуальной нанотрубки (7,7) в отсутствие адсорбированных атомов (см. рис. 2, а) согласуются с результатами работ других авторов [15], в которых для всех кресловидных нанотрубок предсказываются две линейно зависящие от волнового вектора дисперсионные кривые, пересекающиеся на уровне Ферми.

В зависимости от вида присоединяемого атома щелочного металла (литий или натрий) и его расположения относительно каркаса УНТ (внутри или снаружи) положение уровня Ферми изменяется, но относительно этого уровня дисперсионные кривые оказываются расположенными

одинаково (см. рис. 2, б и в для Na). Из этих рисунков можно сделать вывод, что при наличии атома щелочного металла внутри или снаружи УНТ уровень Ферми поднимается выше по энергии относительно точки пересечения дисперсионных кривых, соответствующей уровню Ферми в случае пустой нанотрубки (рис. 2, а). При этом он остается в области, где дисперсионные кривые имеют ту же линейную зависимость от вектора k , что и в идеальной нанотрубке.

При взаимодействии с нанотрубкой атома халькогена (серы или селена) происходят изменения в зонной структуре, отличающиеся от тех, что наблюдались для щелочных металлов. Рассмотрим эти изменения на примере селена (рис. 2, з, е). В случае размещения атома селена на внешней поверхности нанотрубки уровень Ферми оказывается в запрещенной зоне (рис. 2, з). Если ширина мала (около 0,2 эВ), но все же свидетельствует о смене типа проводимости с металлического на полупроводниковый. При размещении атома серы в полости нанотрубки щель не образуется (рис. 2, д), а характер дисперсионных кривых заметно отличается от всех рассмотренных ранее. При большом увеличении (рис. 2, е) становится видно, что ниже уровня Ферми на 0,03 эВ имеется особенность, приводящая к образованию сингулярности Ван-Хова. Тем не менее, уровень Ферми находится в зоне проводимости, где поведение дисперсионных кривых не имеет заметных отклонений от линейного поведения.

Для выяснения причин таких изменений в зонной структуре УНТ при взаимодействии с атомами халькогенов были рассчитаны парциальные плотности состояний электронов, показанные на рис. 3. Из этого рисунка видно, что при внедрении атомов серы и селена в полость нанотрубки плотность состояний электронов атомов углерода практически не меняется, а электроны халькогена создают узкий пик несколько ниже уровня Ферми (рис. 3, а, б). При размещении атомов халькогена на внешней поверхности УНТ замечен слабый размытый пик ниже уровня Ферми, обусловленный этими атомами. Плотность состояний электронов атомов углерода в окрестности уровня Ферми обращается в нуль. Подобное изменение в плотности состояний УНТ (5,5) было обнаружено в работе [16] при замещении атомом серы атома углерода в стенке нанотрубки.

На следующем этапе расчетов к полученным эндо- и экзодральным комплексам УНТ подводились электроды в виде фрагментов УНТ (7,7) длиной 0,49 нм и определялись зависимости силы тока I от приложенной разности потенциалов U в интервале значений от 0,02 до 0,70 В.

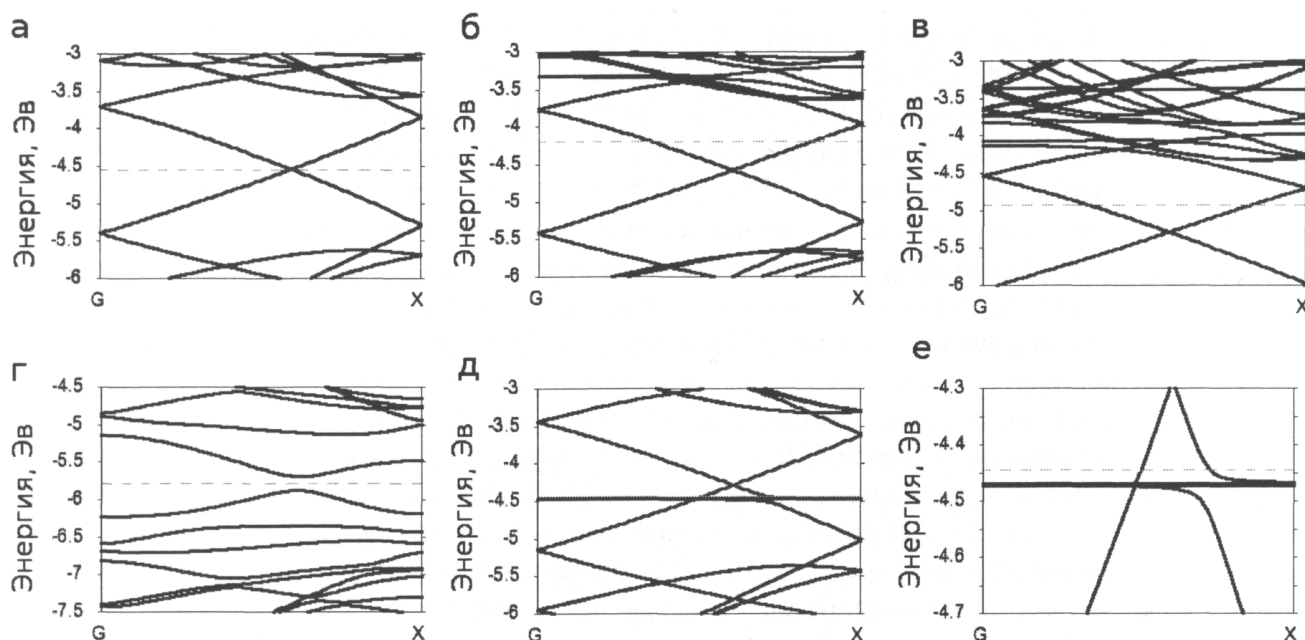


Рис. 2. Зонная структура: а) индивидуальной УНТ (7,7), б) УНТ (7,7) с атомом Na в полости, в) УНТ (7,7) с атомом Na на внешней поверхности, г) УНТ (7,7) с атомом Se на внешней поверхности, д) УНТ (7,7) с атомом Se в полости, е) увеличенный рисунок (г)

Согласно теории Ландауэра проводимость рассматриваемых объектов определяется формулой $G = \frac{2e^2}{hMT}$, где M – количество разрешенных каналов проводимости, T – квантовомеханический коэффициент пропускания, который характеризует вероятность перехода электро-

на от одного электрода к другому. Множитель «2» в этой формуле появляется из-за спинового вырождения. На величину T могут оказывать влияние дефекты строения УНТ и ее деформации. Две дисперсионные кривые, пересекающиеся на уровне Ферми УНТ (7,7) (см. рис. 2, а) свидетельствуют о наличии двух каналов проводимости. Таким образом, наименьшее возможное сопротивление УНТ (7,7), включая контактное сопротивление, составляет 6,47 кОм. Полученное нами значение этой величины составило 6,56 кОм, что на 1,4 % больше указанного выше значения.

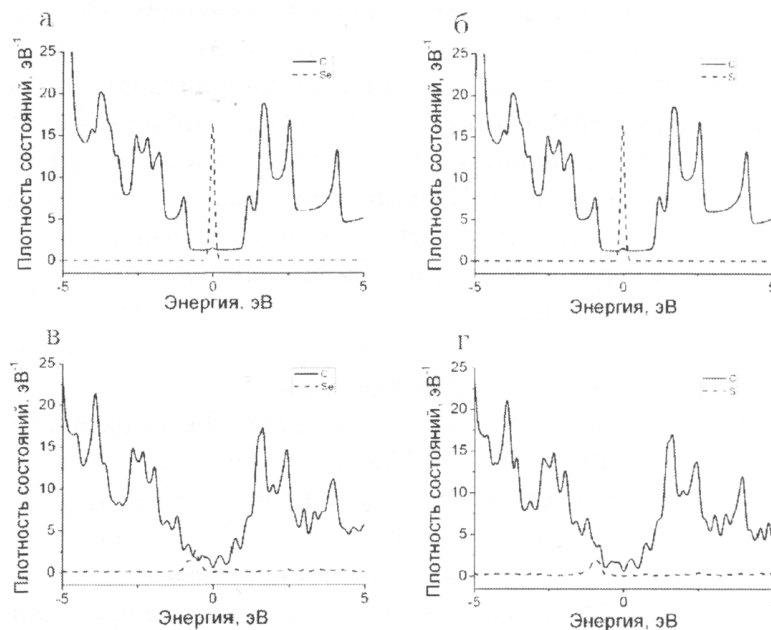


Рис. 3. Парциальные плотности состояний УНТ (7,7) с атомом халькогена: а) атом Se в полости; б) атом S в полости; в) атом Se на внешней поверхности; д) атом S на внешней поверхности

Описанные выше особенности в зонной структуре комплексов УНТ приводят к изменениям в поведении их электрических свойств. На рис. 4 приведены результаты расчетов электрического сопротивления трубок $R = U/I$. Из него видно, что во всех случаях, кроме двух, изучаемые системы являются омическими проводниками – их сопротивление практически не зависит от приложенной разности потенциалов. Исключение составляют системы, где атом халькогена находится на внешней стороне трубки. Здесь при увеличении напряжения сопротивление возрастает к краю исследованного интервала напряжений, но довольно слабо – примерно на 4 %. Отклик сопротивления УНТ на появление атома лития мало зависит от того, расположен этот атом в полости (6,52 кОм) или на внешней поверхности (6,51 кОм). Оба значения близки к сопротивлению чистой нанотрубки и меньше его примерно на 1 %. Сопротивление нанотрубки, адсорбировавшей атом натрия, хотя и зависит от положения атома, но изменение также оказывается менее 1 % (6,59 кОм и 6,50 кОм при размещении в полости на внешней поверхности, соответственно). При внедрении халькогенов в полость нанотрубки ее сопротивление увеличивается на мало зависящую от напряжения величину не превышающую 3 % от исходного сопротивления пустой нанотрубки (6,74 кОм для серы и 6,69 кОм для селена). В то же время адсорбция этих атомов на внешней поверхности приводит к заметному увеличению сопротивления. Присутствие атома серы увеличивает сопротивление УНТ от 6,56 до 7,26 кОм (при малой разности потенциалов), а атома селена до 7,52 кОм (при том же условии).

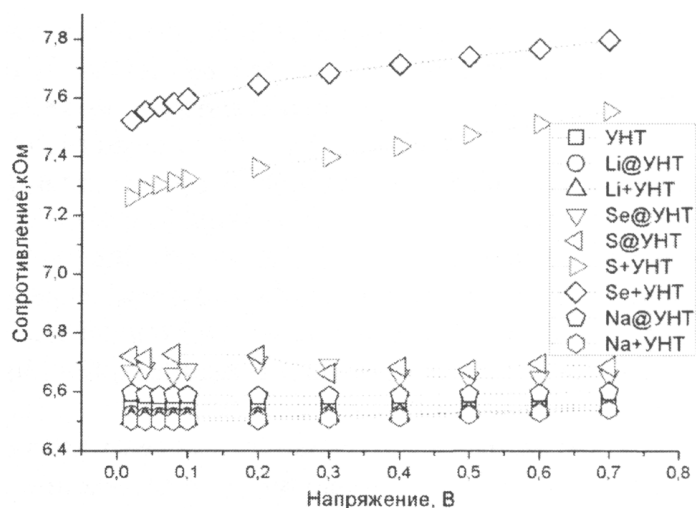


Рис. 4. Зависимости сопротивления от приложенной разности потенциалов для комплексов углеродных нанотрубок

Заключение

Таким образом, на основе анализа результатов проведенного исследования можно сделать следующие выводы.

1. Адсорбция лития и натрия внутри и снаружи нанотрубки (7,7) приводит к качественно похожим изменениям в зонной структуре. При взаимодействии УНТ с атомом халькогена подобия в зонной структуре эндо- и экзодральных комплексов не наблюдается. Наиболее интересно появление запрещенной щели в зонной структуре УНТ при размещении атома халькогена на ее внешней поверхности.

2. Рассчитанные зависимости сопротивления от напряжения подтверждают наблюдаемые изменения в зонной структуре УНТ: сопротивление эндо- и экзодральных комплексов УНТ с литием и натрием, а также эндодральных комплексов с халькогенами мало изменяется по сравнению с сопротивлением чистой трубки. В то же время размещение халькогенов на внешней поверхности приводит к большому (до 10 %) изменению сопротивления. Последнее означает, что интеркалирование пучков углеродных нанотрубок халькогенами должно оказывать заметное влияние на их электрические свойства.

Литература

1. Transparent and Flexible Carbon Nanotube Transistors / E. Artukovic, M. Caemppgen, D.S. Hecht *et al.* // *Nano Letters*. – 2010. – Vol. 5. – P. 757–760.
2. Елецкий, А.В. Сорбционные свойства углеродных наноструктур / А.В. Елецкий // *Успехи физических наук*. – 2004. – Т. 174. – С. 1191–1231
3. Ивановский, А.Л. Гибридные наноматериалы: структура и свойства углеродных пиподов и родственных наносистем / А.Л. Ивановский // *Альтернативная энергетика и экология*. – 2004. – Т. 7. – С. 28–40.
4. Energetics and Electronic Structures of Individual Atoms Adsorbed on Carbon Nanotubes / E. Durgun, S. Dag, S. Ciraci, O. Gullseren // *J. Phys. Chem. B*. – 2004. – Vol. 08. – P. 575–582.
5. Interaction and concerted diffusion of lithium in a (5,5) carbon nanotube / M. Khandha, N.A. Cordero, J.A. Alonso *et al.* // *Physical review B*. – 2008. – Vol. 78. – P. 115430.
6. Ab initio investigations of lithium diffusion in carbon nanotube systems / V. Meunier, J. Kephart, C. Roland, J. Bernholc // *Physical review letters*. – 2002. – Vol. 88. – P. 075506.
7. Optimizing single-walled carbon nanotube films for applications in electroluminescent devices / Y. Wang, C.A. Di, Y.Q. Liu *et al.* // *Advanced Materials*. – 2008. – Vol. 20. – P. 4442–4449.
8. Effect of SOCl₂ Treatment on electrical and mechanical properties of single-wall carbon nanotube networks / U. Dettlaff-Weglikowska, V. Skákalová, R. Graupner *et al.* // *Journal of the American Chemical Society*. – 2005. – Vol. 127. – P. 5125–5131.
9. Xu, B. Electronic structures and transport properties of sulfurized carbon nanotubes / B. Xu, Y.P. Feng // *Solid State Communications*. – 2010. – Vol. 150. – P. 2015–2019.
10. Covalent radii revisited / B. Cordero, V. Gómez, A.E. Platero-Prats *et al.* // *Dalton Transactions*. – 2008. – P. 2832–2838.
11. Созыкин, С.А. Зависимость электрического сопротивления углеродной нанотрубки с металлическим типом проводимости от механического нагружения и интеркалирования серой / С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика»*. – 2011. – Вып. 5. – № 32(249). – С. 115–119.
12. Ceperley, D.M. Ground state of the electron gas by a stochastic method / D.M. Ceperley, B.J. Alder // *Physical Review Letters*. – 1980. – Vol. 45. – P. 566–569.
13. Perdew, J.P. Generalized gradient approximation made simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Physical Review Letters*. – 1996. – Vol. 77. – P. 3865–3868.
14. Selected absorption behavior of sulfur on single-walled carbon nanotubes by DFT/ X. Lu, C. Sun, F. Li, H.-M. Cheng // *Chemical Physics Letters*. – 2008. – Vol. 454. – P. 305–309.
15. Fathi, D. A review of electronic band structure of graphene and carbon nanotubes using tight binding / D. Fathi // *Journal of Nanotechnology*. – 2011. – P. 471241.
16. Denis, P.A. Is it possible to dope single-walled carbon nanotubes and graphene with sulfur? / P. A. Denis, R. Faccio, A.W. Mombu // *ChemPhysChem*. – 2009. – Vol. 10. – P. 715–722.

Поступила в редакцию 17 июля 2012 г.

ELECTRICAL PROPERTIES OF CARBON NANOTUBE (7,7) COMPLEXES WITH SINGLE ATOMS LI, NA, S AND SE

S.A. Sozykin¹, V.P. Beskachko²

The article provides the results of theoretical estimation of the influence of small concentrations of atoms Li, Na, S and Se (~1 at. %) on the electrical resistance of carbon nanotube with metal type of conductivity. The calculated dependences of the resistance on potential difference demonstrate insignificant change in resistance of the nanotube at interaction with atoms of alkaline metal. While introducing chalcogens in a nanotube cavity its resistance is increased by the size, which is hardly ever depending on voltage, while adsorption on an external surface leads to a sensible increase of resistance, which increases with increasing potential difference.

Keywords: carbon nanotubes, electrical resistance, density functional theory, method of nonequilibrium Green's function.

References

1. Artukovic E., Kaempgen M., Hecht D.S., Roth S., Gruner G. Transparent and Flexible Carbon Nanotube Transistors. *Nano Letters*. 2010. Vol. 5. pp. 757–760.
2. Eletskii A.V. Sorption properties of carbon nanostructures. *Phys. Usp.* 2004. Vol. 47. pp. 1119–1154. DOI: 10.1070/PU2004v047n11ABEH002017
3. Ivanovskii A.L. *Alternativnaia energetika i ekologiya*. 2004. Vol. 7. pp. 28–40. (in Russ.).
4. Durgun E., Dag V., Ciraci V., Gullseren O. Energetics and Electronic Structures of Individual Atoms Adsorbed on Carbon Nanotubes. *J. Phys. Chem. B*. 2004. Vol. 108. pp. 575–582.
5. Khantha M., Cordero N.A., Alonso J.A., Cawkwell M., Girifalco L.A. Interaction and concerted diffusion of lithium in a (5,5) carbon nanotube. *Physical review B*. 2008. Vol. 78. p. 115430.
6. Meunier V., Kephart J., Roland C., Bernhole J. *Ab initio* investigations of lithium diffusion in carbon nanotube systems. *Physical review letters*. 2002. Vol. 88. p. 075506.
7. Wang Y., Di C.A., Liu Y.Q., Kajiura H., Ye S.H., Cao L.C., Wei D.C., Zhang H.L., Li Y.M., Noda K. Optimizing single-walled carbon nanotube films for applications in electroluminescent devices. *Advanced Materials*. 2008. Vol. 20. pp. 4442–4449.
8. Dettlaff-Weglikowska U., Skákalová V., Graupner R., Jhang S.H., Kim B.H., Lee H.J., Ley L., Park Y.W., Berber S., Tománek D., Roth S. Effect of SOCl₂ Treatment on electrical and mechanical properties of single-wall carbon nanotube networks. *Journal of the American Chemical Society*. 2005. Vol. 127. pp. 5125–5131.
9. Xu B., Feng Y.P. Electronic structures and transport properties of sulfurized carbon nanotubes. *Solid State Communications*. 2010. Vol. 150. pp. 2015–2019.
10. Cordero B., Gómez V., Platero-Prats A.E., Revés M., Echeverría J., Cremades E., Barragán F., Alvarez S. Covalent radii revisited. *Dalton Transactions*. 2008. pp. 2832–2838.
11. Sozykin S.A., Beskachko V.P. Zavisimost' elektricheskogo soprotivleniia uglerodnoi nanotrubki s metallicheskim tipom provodimosti ot mekhanicheskogo nagruzheniia i interkalirovaniia seroi (Electrical resistance of carbon nanotube with a metallic type of conductivity during mechanical loading and intercalation by sulfur). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2011. Issue 5. no. 32(249). pp. 115–119. (in Russ.).
12. Ceperley D.M., Alder B.J. Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Physical Review Letters*. 1980. Vol. 45. pp. 566–569.
13. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*. 1996. Vol. 77. pp. 3865–3868.
14. Lu X., Sun C., Li F., Cheng H.-M. Selected absorption behavior of sulfur on single-walled carbon nanotubes by DFT. *Chemical Physics Letters*. 2008. Vol. 454. pp. 305–309.
15. Fathi D. A review of electronic band structure of graphene and carbon nanotubes using tight binding. *Journal of Nanotechnology*. 2011. p. 471241. Article ID 471241. DOI:10.1155/2011/471241.
16. Denis P.A., Faccio R., Mombro A.W. Is it possible to dope single-walled carbon nanotubes and graphene with sulfur? *ChemPhysChem*. 2009. Vol. 10. pp. 715–722.

¹ Sozykin Sergey Anatolevich is Post-Graduate Student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University
E-mail: sergey.sozykin@gmail.com

² Beskachko Valeriy Petrovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

ВЛИЯНИЕ ГИБРИДИЗАЦИИ ЭФФЕКТИВНОГО ПАРНОГО ПОТЕНЦИАЛА НА РАСЧЕТНЫЕ СВОЙСТВА ЖИДКОГО ЖЕЛЕЗА

В.А. Старухин¹, А.А. Мирзоев²

С помощью метода гибридизации эффективного парного потенциала Д.К. Белашенко построен ряд парных потенциалов для жидкого железа при температуре 1923 К. В работе показана зависимость термодинамических и структурных параметров модели от используемого эффективного потенциала из этого ряда. На основании полученных данных предложен критерий выбора наиболее оптимального парного потенциала, получаемого при гибридизации.

Ключевые слова: эффективный парный потенциал, компьютерное моделирование, неупорядоченные системы, структура жидкости, молекулярная динамика.

Введение

Одним из простейших вариантов модельного потенциала, применяемого при молекулярно-динамическом моделировании (МД), является эффективный парный потенциал (ЭПП). Среди методов получения ЭПП особенно выделяются методы расчета по известной структуре вещества. Часть наиболее известных методов, реализующих данный подход, описана в работе [1]. Среди них можно выделить метод Шоммерса [2, 3], являющийся исторически первой итерационной схемой, позволяющей рассчитать ЭПП, воспроизводящий экспериментальную парную корреляционную функцию (ПКФ) при моделировании методом МД. Причиной особого положения методов воспроизведения потенциала по структуре является взаимно однозначная связь между ЭПП и ПКФ. Единственность ЭПП, воспроизводящего заданную ПКФ, при условии его существования была доказана Хендерсоном [4], а существование такого потенциала доказано Чайссом с соавторами [5].

Несмотря на этот факт, численное воспроизведение ЭПП по данным структурного эксперимента любыми методами, аналогичными схеме Шоммерса, не является однозначным [6]. Однако это не противоречит теоремам Хендерсона и Чайсса, поскольку на самом деле отличающиеся потенциалы приводят к модельным ПКФ, различие между которыми очень незначительно. В то же время ЭПП при этом могут отличаться очень существенно и, как следствие, приводят к различающимся значениям термодинамических параметров системы. Возможность получения такого ряда ЭПП, воспроизводящих с определенной точностью одну и ту же ПКФ, была продемонстрирована и объяснена Д.К. Белашенко [6]. Сама процедура получения такого ряда функций была названа им гибридизацией ЭПП.

Понимание причины возникновения такого вырождения даст возможность учесть этот эффект при построении ЭПП. Например, в работе [7] авторы использовали этот принцип для получения ЭПП, воспроизводящего одновременно с ПКФ кривую фононного спектра. В [8] мы предложили алгоритм для получения ЭПП, воспроизводящего ПКФ в NPT-ансамбле (канонический ансамбль, при котором рассматривается система, состоящая из фиксированного числа частиц, при заданном давлении и температуре), при этом получаемый потенциал даст правильное значение плотности системы. Кроме этого, наш алгоритм приводит к ЭПП, содержащему свободный параметр, который не меняет ПКФ и плотность модели, но при этом существенно влияет на все остальные расчетные свойства.

К сожалению, оказалось, что, изменяя этот параметр, не всегда удастся согласовать с экспериментом такие характеристики как коэффициент самодиффузии и динамическую вязкость вещества. При этом анализ локальной структуры показал наличие существенной зависимости структуры ближнего порядка от свободного параметра ЭПП.

¹ Старухин Виктор Андреевич – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: victor_staruhin@mail.ru

² Мирзоев Александр Аминутасович – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

В настоящей работе показано влияние гибридизации ЭПП на все основные термодинамические и структурные характеристики жидкого состояния вещества на примере жидкого железа при температуре 1923 К. На основании полученных результатов предложен критерий выбора наиболее оптимального ЭПП, воспроизводящего методом МД экспериментальную кривую ПКФ для заданного значения температуры и давления.

Алгоритм

Метод гибридизации ЭПП Д.К. Белашенко [6] состоит в следующем. Допустим, мы получили каким-либо из существующих методов [1] ЭПП $\varphi_T(r)$, воспроизводящий необходимую ПКФ в NVT-ансамбле (канонический ансамбль, в котором фиксируется количество частиц, объем и температура системы) при необходимой температуре. Кроме этого, мы можем подобрать потенциал $\varphi_0(r)$, который соответствует статическому равновесию этой же системы с такой же ПКФ. Такой потенциал можно подобрать, например, методом сопоставления координационного числа в модели и значения полученного из эксперимента [7]. В итоге оказывается, что потенциал $\varphi(r) = \varphi_T(r) + \lambda \varphi_0(r)$ тоже с хорошей точностью воспроизводит заданную ПКФ при некоторых значениях λ в NVT-ансамбле. Это происходит, потому что равнодействующая сила на отдельном атоме при этом не меняется.

Ранее мы предложили алгоритм [8] на основе этого принципа, который позволяет подобрать ЭПП, воспроизводящий ПКФ в NPT-ансамбле, благодаря чему одновременно достигается согласие по плотности системы. При этом остается еще один подгоночный параметр ЭПП, который не искажает ни ПКФ, ни плотность системы, но при этом сильно влияет на другие термодинамические характеристики системы. В нашем алгоритме вместо того, чтобы подбирать потенциал $\varphi_0(r)$ для статического равновесия системы мы пользуемся неоднозначностью метода Шоммерса. При различных стартовых потенциалах метод Шоммерса приводит к различным итоговым потенциалам, которые почти с одинаковой точностью воспроизводят одну и ту же ПКФ в NVT-ансамбле. На данный момент мы можем получать три различных ЭПП, соответствующих одной и той же ПКФ. Для этого мы используем потенциал Леннард-Джонса с различными параметрами $(r_{\min}; E_{\min})$:

$$\varphi_{LJ}(r) = -E_{\min} \left[\left(r_{\min}/r \right)^{12} - 2 \left(r_{\min}/r \right)^6 \right]. \quad (1)$$

Таким способом не удастся получить больше трех различных решений методом Шоммерса. Изменение отталкивающей и притягивающей степеней не влияет на конечный результат.

Схема Шоммерса в силовом варианте [9] выглядит следующим образом:

$$F_i(r) = kT \frac{g'_i(r)}{g_i(r)}, \quad (2)$$

$$F_{i+1}(r) = F_i(r) + kT \frac{g'_i(r)g_i(r) - g(r)g'_i(r)}{g_i(r)g_i(r)}, \quad (3)$$

где $F_i(r)$ – эффективная силовая функция на i -й итерации; $g(r)$ – целевая ПКФ; k – постоянная Больцмана; T – температура; $g_i(r)$ – ПКФ на i -й итерации, получаемая из модели, построенной методом МД; функции со штрихом – производные соответствующих функций. ЭПП рассчитывается интегрированием силовой функции при условии, что потенциал на радиусе обрыва равен нулю. В качестве критерия качества получаемой ПКФ на каждой итерации рассчитывается невязка между целевой и модельной ПКФ:

$$d_i = \left[\frac{1}{N} \sum_{j=0}^N (g(r_j) - g_i(r_j))^2 \right]^{1/2}, \quad (4)$$

где $g(r)$ – целевая ПКФ, $g_i(r)$ – расчетная ПКФ на i -й итерации, N – количество точек в гистограммах целевой и модельной ПКФ. При расчете ЭПП методом Шоммерса также использовалась стандартная схема демпфирования. В этом случае новое приближение выбиралось по формуле

$$F_{i+1}^{new}(r) = p F_{i+1}(r) + (1-p) F_i(r), \quad (5)$$

где $F_i(r)$ – эффективная силовая функция на i -й итерации; p – коэффициент демпфирования, принимающий значения в интервале $[0, 1]$.

После получения методом Шоммерса трех различных ЭПП $\varphi_1(r)$, $\varphi_2(r)$, $\varphi_3(r)$, воспроизводящих одну и ту же ПКФ в NVT-ансамбле, мы можем применить метод гибридизации следующим образом:

$$\varphi_{hvb}(r) = \lambda_1 \varphi_1(r) + \lambda_2 \varphi_2(r) + \lambda_3 \varphi_3(r) \quad (6)$$

при условии

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 1. \quad (7)$$

В силу условия (7) мы имеем только два свободных параметра гибридного потенциала (6). Перепишем уравнение (6) с учетом (7):

$$\varphi_{hvb}(r) = \varphi_1(r) + \lambda_{21} \tilde{\varphi}_{21}(r) + \lambda_{31} \tilde{\varphi}_{31}(r). \quad (8)$$

Здесь $\tilde{\varphi}_{21}(r) = \varphi_2(r) - \varphi_1(r)$, $\tilde{\varphi}_{31}(r) = \varphi_3(r) - \varphi_1(r)$. Построим два различных гибридных потенциала, воспроизводящих ПКФ в NPT-ансамбле с необходимой плотностью:

$$\varphi_1^{\text{NPT}}(r) = \varphi_1(r) + \lambda_{21} \tilde{\varphi}_{21}(r) + \lambda_{31} \tilde{\varphi}_{31}(r), \quad (9)$$

$$\varphi_2^{\text{NPT}}(r) = \varphi_1(r) + \lambda'_{21} \tilde{\varphi}_{21}(r) + \lambda'_{31} \tilde{\varphi}_{31}(r), \quad (10)$$

где $(\lambda_{21}; \lambda_{31})$ и $(\lambda'_{21}; \lambda'_{31})$ – два различных набора параметров гибридного потенциала (8). Теперь можно выполнить повторную гибридизацию:

$$\varphi_{hvb}^{\text{NPT}}(r) = \varphi_1^{\text{NPT}}(r) + \lambda \tilde{\varphi}^{\text{NPT}}(r). \quad (11)$$

Здесь $\tilde{\varphi}^{\text{NPT}}(r) = \varphi_2^{\text{NPT}}(r) - \varphi_1^{\text{NPT}}(r) = (\lambda'_{21} - \lambda_{21}) \tilde{\varphi}_{21}(r) + (\lambda'_{31} - \lambda_{31}) \tilde{\varphi}_{31}(r)$. Изменение параметра λ (11) в некотором интервале значений практически не будет влиять ни на ПКФ, ни на плотность системы при расчете в NPT-ансамбле, но при этом будет существенно влиять на другие расчетные характеристики системы.

Расчет потенциала для жидкого железа при температуре 1923 К

В качестве целевой ПКФ использовали экспериментальные данные для жидкого железа при температуре 1923 К [10].

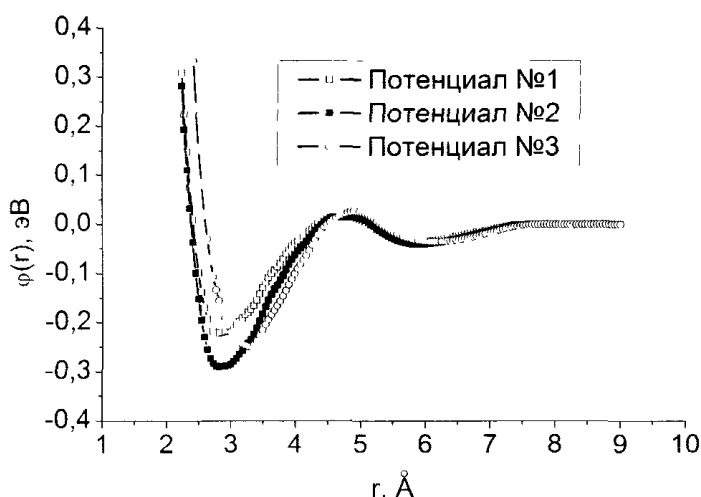


Рис. 1. Эффективные парные потенциалы, полученные методом Шоммерса с использованием различных стартовых потенциалов в форме Леннард-Джонса

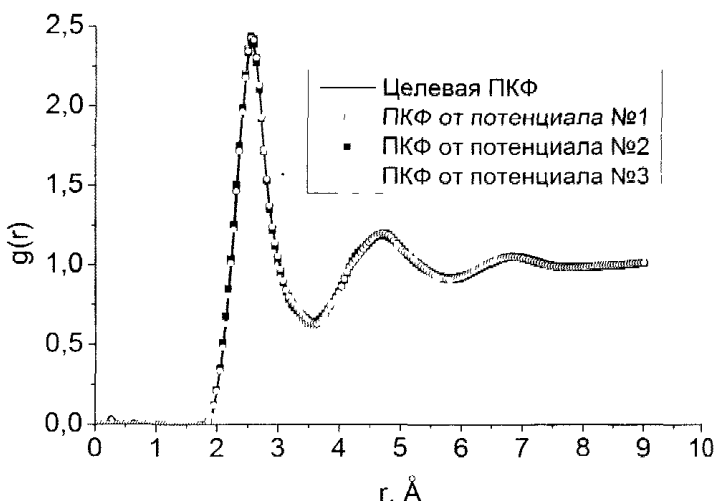


Рис. 2. Парные корреляционные функции, рассчитанные в NVT-ансамбле с различными эффективными потенциалами (рис. 1), в сравнении с экспериментальной кривой из работы [10]

Согласно описанному алгоритму, на первом этапе рассчитывались три различных ЭПП методом Шоммерса. Для этого были подготовлены три различных потенциала Леннард-Джонса (1) с различными параметрами $(r_{\min}; E_{\min})$: $(2,5 \text{ Å}; -0,145 \text{ эВ})$, $(2,5 \text{ Å}; -0,245 \text{ эВ})$, $(2,8 \text{ Å}; -0,145 \text{ эВ})$. С каждым из этих потенциалов был выполнен расчет ЭПП методом Шоммерса с коэффициентом демпфирования $p = 0,5$. В итоге были получены три различных ЭПП (рис. 1), хорошо воспроиз-

водящие целевую ПКФ в NVT-ансамбле (рис. 2). Невязки по ПКФ d для потенциалов № 1, № 2 и № 3 на рис. 1 составили: $d_1 = 0,0329$, $d_2 = 0,0326$, $d_3 = 0,0298$ соответственно.

Все расчеты методом МД в настоящей работе выполнялись при помощи пакета LAMMPS [11]. Расчет ПКФ при построении потенциала методом Шоммерса производился в NVT-ансамбле с использованием термостата Нозе–Гувера [12]. Система во всех случаях представляла собой куб с периодическими граничными условиями, состоящий из 1000 атомов. Объем модельного куба выбирали таким образом, чтобы атомная плотность была равна экспериментальному значению $0,0742 \text{ \AA}^3$ [10]. Длина шага по времени была равна 1 фс. Расчет ПКФ выполнялся в два этапа. Сначала производили релаксацию системы с новым потенциалом в течение 5000 шагов. После этого полученную модель использовали в качестве стартовой конфигурации для дальнейшего МД расчета, в ходе которого рассчитывали модельную ПКФ. При этом моделирование выполняли в течение 1000 шагов, на каждом из которых рассчитывалась ПКФ. Итоговую кривую получали усреднением по всем 1000 шагам. Радиус обрыва потенциала и ПКФ во всех расчетах был равен $9,0 \text{ \AA}$.

На следующем этапе рассчитывали два гибридных потенциала (9) и (10), подбирая соответствующие коэффициенты таким образом, чтобы получаемые потенциалы воспроизводили в NPT-ансамбле экспериментальное значение атомной плотности. В первом случае были получены значения $(\lambda_{21}; \lambda_{31}) = (0, 0; -0,43)$, во втором – $(\lambda'_{21}; \lambda'_{31}) = (4, 0; 0,65)$. После этого семейство гибридных потенциалов, воспроизводящих ПКФ в NPT-ансамбле, определяется согласно выражению (11).

Методика моделирования

Для анализа влияния гибридизации ЭПП на свойства модели рассчитали кривые ПКФ и невязки d между целевой и модельными ПКФ, коэффициент самодиффузии D , коэффициент динамической вязкости η , коэффициент теплового объемного расширения β , атомную плотность n , потенциальную энергию системы U_{pot} . Все перечисленные характеристики рассчитывались в зависимости от параметра λ (11). Для более детального анализа структуры выполнили расчет основных структурных параметров методом многогранников Вороного. В качестве таких характеристик рассмотрели распределения по коэффициенту сферичности многогранников Вороного k_{sph} , по количеству граней у многогранников N_v , по объему многогранников V_{VP} и распределение $G(r)$.

Все перечисленные характеристики вычислялись по данным, полученным в результате моделирования в NPT-ансамбле при нулевом давлении. Все параметры модельного бокса использовали такие же, как при построении ЭПП методом Шоммерса. Во всех случаях систему предварительно выдерживали в течение 30 000 шагов с длиной шага 1 фс для достижения термодинамического равновесия. После этого выполняли 10 расчетов по 1000 шагов каждый с таким же временным шагом для набора статистики по необходимым для дальнейших вычислений параметрам. Для вычисления коэффициента β выполняли 30 расчетов по 1000 шагов для набора статистики.

Расчет ПКФ в NPT-ансамбле идентичен описанной выше процедуре расчета в NVT-ансамбле. Здесь также использовался термостат и баростат Нозе–Гувера [12, 13]. Отличие состоит только в использовании NPT-ансамбля вместо NVT-ансамбля, причем давление в баростате задавалось равным нулю. Невязку с целевой ПКФ рассчитывали согласно выражению (4).

Коэффициент самодиффузии вычисляли через угловой коэффициент прямой среднеквадратичного отклонения атомов от времени. При этом из расчета исключали значения при малых t , когда атомы движутся в баллистическом режиме.

Коэффициент динамической вязкости η рассчитывали методом Мюллера–Платца [14]. Идея метода состоит в том, что в процессе моделирования методом МД в системе искусственно индуцируется градиент скорости, характеризующий движение слоев жидкости. Средний слой движется с положительной скоростью относительно выбранной оси, а крайние слои движутся в обратном направлении. Для этого с определенной частотой выбирается одна или более пар атомов. В среднем слое выбираются атомы с самой низкой скоростью, а в одном из крайних слоев – атомы с самой высокой скоростью, после чего они обмениваются импульсами, в результате средний слой приобретает положительное направление скорости, а крайние слои – отрицательное. В на-

стоящей работе обмен импульсами выполнялся для одной пары атомов на каждом десятом шаге МД. Количество слоев, на которые условно разделялась модель, было равно десяти. Перед расчетом η равновесная по объему и энергии система дополнительно выдерживалась в течение 1000 шагов для получения равновесного градиента скорости. В результате во всех случаях был получен линейный профиль скорости v_z относительно оси z . Далее расчет динамической вязкости η производили по известному выражению:

$$j_p = -\eta \frac{\partial v_z}{\partial z}, \quad (12)$$

где j_p – поток импульса от среднего слоя к крайнему.

Коэффициент теплового объемного расширения β вычисляли по приближительному соотношению:

$$\beta = \frac{2}{\langle V_2 \rangle + \langle V_1 \rangle} \frac{\langle V_2 \rangle - \langle V_1 \rangle}{T_2 - T_1}, \quad (13)$$

где $\langle V_1 \rangle$ – средний объем модели после 1000 шагов МД при температуре T_1 , и аналогично для параметров с индексом 2. Во всех случаях расчет производили при нагревании системы от 1723 К до 2123 К.

Атомную плотность n рассчитывали как отношение количества атомов модели к среднему объему системы. Усреднение объема производили по 1000 шагам МД.

Потенциальную энергию системы U_{pot} вычисляли как сумму потенциальных энергий всех атомов.

Все характеристики структуры ближнего порядка были получены с использованием программы статистико-геометрического анализа структуры методом многогранников Вороного [15]. Большинство рассматриваемых в настоящей работе характеристик разбиения Вороного не нуждаются в пояснении за исключением k_{sph} и $G(r)$. Коэффициент сферичности k_{sph} определяет близость формы многогранника к идеальной сфере:

$$k_{sph} = \frac{36\pi V^2}{S^3}, \quad (14)$$

где V – объем многогранника, S – площадь его боковой поверхности. Для сферы $k_{sph} = 1$. Распределение $G(r)$ является аналогом ПКФ, но описывает относительное расположение ближайших соседей данного атома, определяемых только многогранником Вороного.

Анализ влияния гибридизации ЭПП на характеристики модели жидкого железа

Необходимо заранее отметить, что параметр λ (11) можно изменять только в пределах некоторого интервала. Как будет показано ниже, при слишком низком или высоком значении λ плотность системы и модельная ПКФ начинают сильно искажаться. В настоящей работе для анализа выбран интервал значений λ $[-0,3; 2,0]$. В качестве примера на рис. 3 приведены графики ЭПП из ряда (11) для значений $\lambda = -0,3$, $\lambda = 0,0$, $\lambda = 1,0$, $\lambda = 2,0$.

В таблице приведены расчетные значения всех термодинамических характеристик модели, описанных в предыдущем разделе. Все физические свойства модели рассчитаны для различных значений параметра λ (11).

На рис. 4 приведены ПКФ, рассчитанные в NPT-ансамбле с нулевым давлением в баростате с использованием потенциалов, показанных на рис. 3. Как видно из рис. 4, ПКФ при $\lambda = 2,0$ уже существенно отличается от целевой кривой на всей области определения. В это же время все остальные кривые, включая результат при $\lambda = -0,3$ – другом крайнем значении свободного параметра потенциала, остаются очень близки к искомой ПКФ. Для количественного сопоставления полученных кривых в таблице приведены невязки по ПКФ d для различных значений λ . Среди всех этих значений можно выделить явный минимум при $\lambda = 1,0$. При движении λ в меньшую или большую стороны от этого значения невязка монотонно возрастает. Максимальное значение доверительного интервала невязки для вероятности 99 % составило $\Delta d = 0,002$, что гораздо ни-

же, чем диапазон значений невязки в зависимости от λ . По этой причине можно рассматривать минимум по невязке как критерий выбора наиболее оптимального ЭПП из ряда (11). Кроме того, такой критерий согласуется с теоремами Хендерсона [4] и Часейса [5], согласно которым существует только один ЭПП для данной ПКФ.

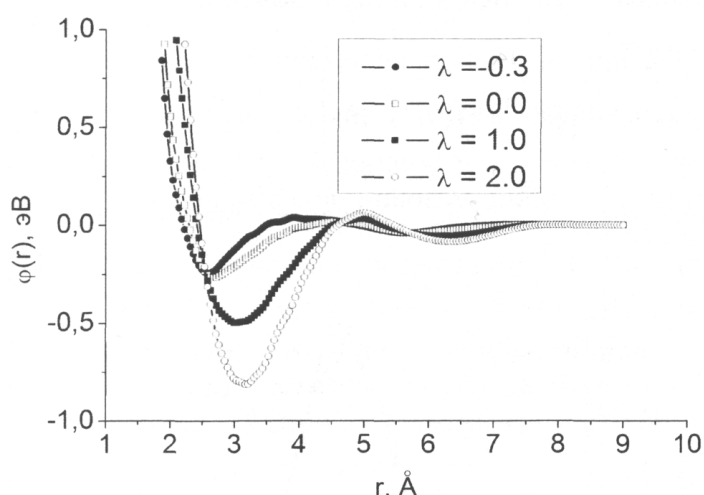


Рис. 3. Гибридный эффективный парный потенциал для различных λ , воспроизводящий ПКФ в NPT-ансамбле при нулевом давлении

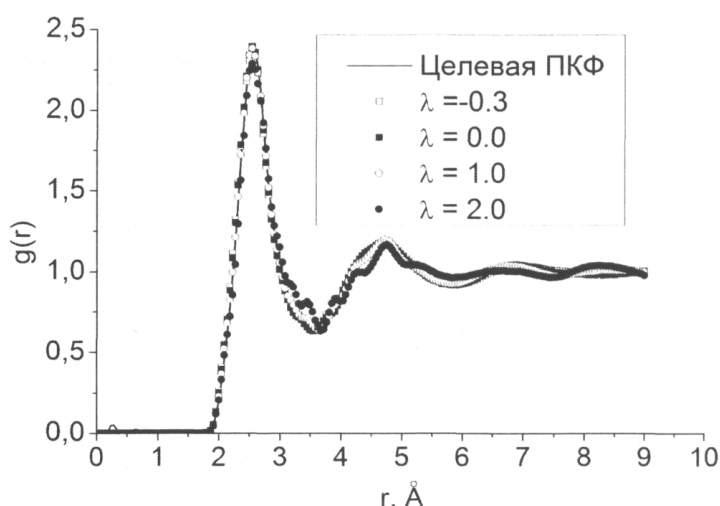


Рис. 4. Парные корреляционные функции, рассчитанные в NPT-ансамбле при нулевом давлении с различными гибридными потенциалами (рис. 3), в сравнении с экспериментальной кривой из работы [10]

Расчетные свойства жидкого железа при температуре 1923 К с различными парными потенциалами

	$d, 10^{-2}$	$n, \text{\AA}^{-3}$	$U_{\text{pot}}, \text{кДж/моль}$	$\beta, 10^{-5} \text{ K}^{-1}$	$D, 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{с}$	$\eta, \text{мПа}\cdot\text{с}$
Эксперимент	—	0,0742 [10]	—	16,7 [16]	3,61 [17]	5,04 [16]
$\lambda = -0,3$	0,041	0,0724	-123,5	11,9	8,3	1,9
$\lambda = -0,2$	0,040	0,0732	-143,2	10,4	8,2	2,0
$\lambda = -0,1$	0,039	0,0738	-162,9	9,2	7,6	2,0
$\lambda = 0,0$	0,038	0,0741	-182,2	8,6	7,8	2,1
$\lambda = 0,1$	0,038	0,0743	-201,4	8,2	7,7	2,1
$\lambda = 0,3$	0,036	0,0746	-239,9	7,5	7,4	2,0
$\lambda = 0,5$	0,034	0,0747	-278,4	7,3	7,6	2,1
$\lambda = 1,0$	0,032	0,0744	-374,6	6,4	7,6	2,1
$\lambda = 1,5$	0,036	0,0732	-471,1	5,7	7,8	2,3
$\lambda = 2,0$	0,055	0,0713	-568,3	3,7	7,6	2,3

Следующим наиболее важным параметром является плотность системы. Поскольку используемая экспериментальная ПКФ соответствует строго определенному значению атомной плотности n , то оптимизация гибридных потенциалов (9) и (10) изначально производится для согласования плотности модели и экспериментального значения. Тем не менее в пределах небольшой невязки d , различные гибридные потенциалы приводят к несколько отличающимся значениям плотности (см. третью колонку таблицы). Вообще говоря, не получив согласия по плотности, нельзя добиться хорошего согласия по ПКФ. Это подтверждается сравнением значений в колонках 2 и 3 таблицы. Видно, что наименьшее значение невязки соответствует наилучшему совпадению расчетной и экспериментальной плотности. Таким образом, можно предложить следующий метод получения оптимального ЭПП: варьируя λ в выражении (11), можно найти значение, при котором достигается минимальное значение невязки по ПКФ одновременно с наилучшим согласием по атомной плотности системы.

Потенциальная энергия системы U_{pot} зависит от λ линейно (см. таблицу). Линейную зависимость U_{pot} от λ очень легко объяснить. Зная ЭПП и ПКФ, потенциальную энергию можно рассчитать аналитически следующим образом:

$$U_{pot} = 4\pi n \int_0^{\infty} \varphi(r) g(r) r^2 dr. \quad (15)$$

Подставляя вместо $\varphi(r)$ потенциал (11), и, учитывая, что ПКФ при этом почти не зависит от λ , выражение (15) переписывается следующим образом:

$$U_{pot} = 4\pi n \int_0^{\infty} \varphi_1^{NPT}(r) g(r) r^2 dr + \lambda \left[4\pi n \int_0^{\infty} \tilde{\varphi}^{NPT}(r) g(r) r^2 dr \right]. \quad (16)$$

Отсюда видно, что второе слагаемое представляет собой угловой коэффициент прямой $U_{pot}(\lambda)$, а первое слагаемое – значение U_{pot} при $\lambda = 0,0$.

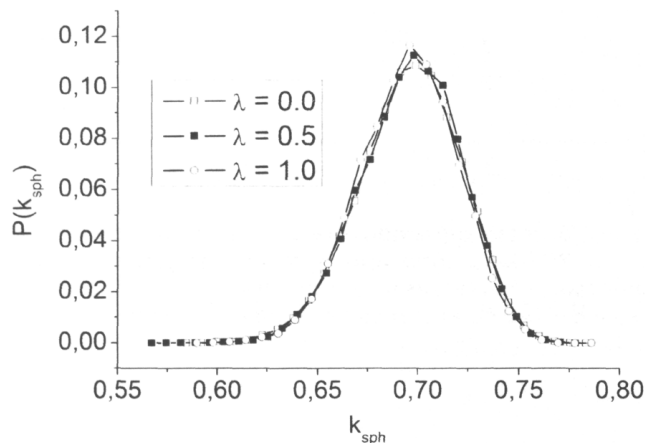


Рис. 5. Распределение многогранников Вороного по коэффициенту сферичности k_{sph} при различных значениях параметра λ

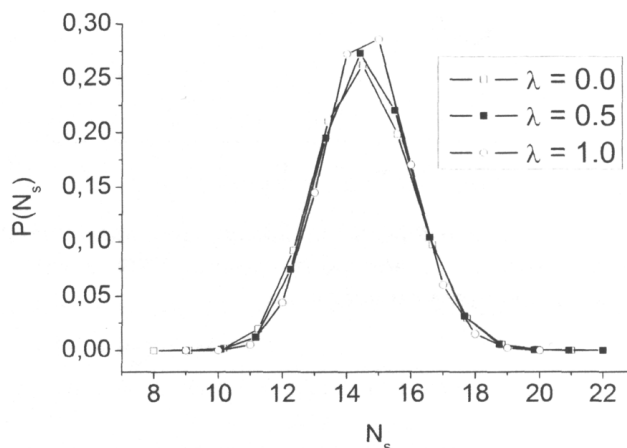


Рис. 6. Распределение многогранников Вороного по количеству граней при различных значениях параметра λ

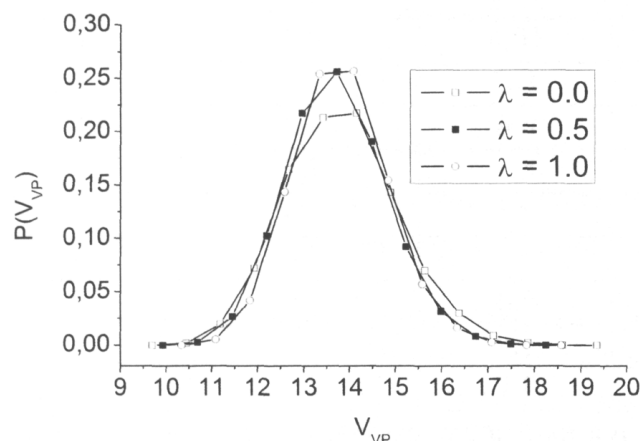


Рис. 7. Распределение многогранников Вороного по объему при различных значениях параметра λ

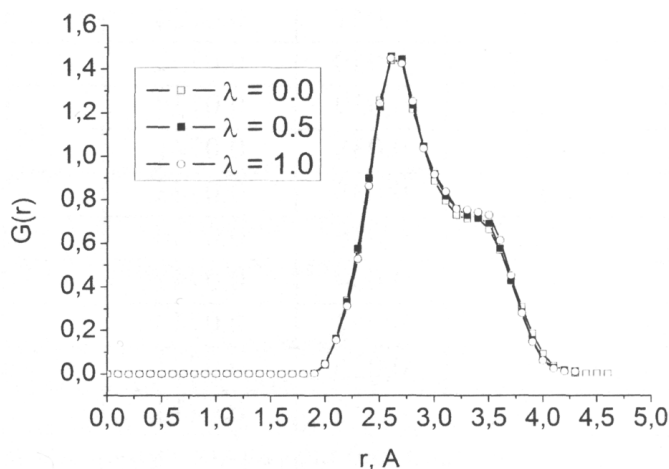


Рис. 8. Распределение $G(r)$ при различных значениях параметра λ

Коэффициент объемного расширения β сильно зависит от параметра λ (см. таблицу). При уменьшении λ коэффициент β начинает быстро возрастать. Это связано с увеличением крутизны отталкивающей ветви ЭПП (см. рис. 3). На всем диапазоне λ нет согласия β с экспериментальным значением для жидкого железа при температуре 1923 К – различие составляет от 1,5 до 2 раз.

Точно так же обстоит дело и с воспроизводимостью коэффициента самодиффузии D и динамической вязкости η жидкого железа. Семейство гибридных потенциалов (11) для температуры 1923 К дает заниженное приблизительно в два раза значение вязкости η по сравнению с экспериментом [16] и наоборот в два раза большее значение самодиффузии D по сравнению с данными первопринципного МД моделирования [17]. При этом параметр λ очень слабо влияет на значения η и D (см. таблицу). Здесь возможной причиной может быть следующее. Можно пока-

зять, что ряд базовых потенциалов, формирующих сумму (6) не является полным, то есть существует еще множество линейно независимых потенциалов, которые воспроизводят данную ПКФ в NVT-ансамбле. Поэтому можно предположить, что полученный в настоящей работе ЭПП не является истинным, но его можно улучшить, если продолжить ряд базовых потенциалов в уравнении (6).

На рис. 5–8 показаны кривые распределений коэффициента сферичности k_{sph} , количества граней многогранников N_g , объема многогранников V_{IP} и $G(r)$ соответственно. Распределение по коэффициенту сферичности k_{sph} и $G(r)$ (рис. 5, 8) не завися от λ в диапазоне $[0,0;1,0]$, в котором плотность модели меняется незначительно (см. таблицу). Но кривые распределений N_g и V_{IP} (рис. 6, 7) оказались различными. Оба распределения с ростом λ становятся существенно выше и сужаются. Это говорит о том, что структура ближнего порядка относительно этих характеристик становится более однородной. Но главный вывод здесь состоит в том, что гибридизация ЭПП может существенно влиять на структуру ближнего порядка получаемых моделей, в то время как ПКФ (рис. 4) при этом оказываются очень близки друг к другу.

Заключение

Предложенный в работе [8] алгоритм гибридизации ЭПП по принципу Д.К. Белащенко [6] был успешно применен для жидкого железа при температуре 1923 К. Метод позволяет получать целое семейство ЭПП, воспроизводящих ПКФ в NPT-ансамбле при МД моделировании. В свою очередь, воспроизведение ПКФ в NPT-ансамбле при заданном давлении приводит к автоматическому согласию по плотности модели с экспериментом. Несмотря на это, получаемый ряд ЭПП приводит к существенно различным значениям остальных термодинамических свойств модели жидкости. Анализ структуры ближнего порядка на примере жидкого железа тоже показал существенное влияние гибридизации ЭПП на такие характеристики локальной структуры, как распределения по объему и по количеству граней многогранников Вороного.

Существенным недостатком предложенного метода остается невозможность согласования с экспериментом основных транспортных свойств – коэффициента диффузии и динамической вязкости. Особенно учитывая, что вязкость является очень чувствительной к структурным изменениям характеристикой, а по результатам настоящей работы видно, что гибридизация ЭПП существенно влияет на структуру ближнего порядка, но при этом никак не сказывается на получаемых значениях диффузии и вязкости. Возможной причиной здесь можно назвать неполный ряд базовых потенциалов, используемых при построении гибридного ЭПП. Поэтому темой следующей работы будет поиск таких базовых функций для расширения этого ряда.

Литература

1. Toth, G. Interactions from diffraction data: historical and comprehensive overview of simulation assisted methods / G. Toth // J. Phys.: Condens. Matter. – 2007. – V. 19. – P. 1–18.
2. Schommers, W. A pair potential liquid rubidium from the pair correlation function / W. Schommers // Phys. Lett. A. – 1973. – V. 43. – P. 157–158.
3. Schommers, W. Pair potentials in disordered many-particle systems: A study for liquid gallium / W. Schommers // Phys. Rev. A. – 1983. – V. 28. – P. 3599–3605.
4. Henderson, R.L. A uniqueness theorem for fluid pair correlation functions / R.L. Henderson // Phys. Lett. A. – 1974. – V. 49. – P. 197–198.
5. Chayes, J.T. On the validity of the inverse conjecture in classical density functional theory / J.T. Chayes, L. Chayes // J. Stat. Physics. – 1984. – V. 36. – P. 471–488.
6. Belashchenko, D.K. Families of Intermolecular Potentials Corresponding to Identical Structure of Noncrystalline Substances in the Method of Molecular Dynamics/ D.K. Belashchenko // Russian J. Phys. Chem. – 2004. – V. 78. – P. 1621–1628.
7. Belashchenko, D.K. Computer Simulation of Amorphous Ni–Nb Alloys from Diffraction Data / D.K. Belashchenko, G.F. Syrykh // Inorganic Materials. – 2004. – V. 40. – P. 483–493.
8. Применение метода Шоммерса для получения гибридного парного потенциала / В.А. Старухин, Д.К. Белащенко, А.А. Мирзоев, А.Г. Воронцов // Расплавы. – 2012. – № 3. – С. 57–67.

9. Старухин, В.А. Применение метода Шоммерса для расчета парного потенциала в NPT ансамбле / В.А. Старухин, А.А. Мирзоев, А.Г. Воронцов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – Вып. 4. – № 10(227). – С. 106–113.
10. Waseda, Y. The structure of Non-crystalline Materials. Liquids and Amorphous Solids / Y. Waseda. – New York: McGraw-Hill, 1980. – 325 p.
11. Plimpton, S. Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator / S. Plimpton, A. Thompson, P. Crozier // <http://lammps.sandia.gov>.
12. Hoover, W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions / W.G. Hoover // Phys. Rev. A. – 1985. – V. 31. – P. 1695–1697.
13. Hoover, W.G. Constant pressure equations of motion / W.G. Hoover // Phys Rev A. – 1986. – V. 34. – P. 2499–2503.
14. Patrice, B. The shear viscosity of molecular fluids: A calculation by reverse nonequilibrium molecular dynamics / B. Patrice, F. Muller-Plathe // Journal Of Chemical Physics. – 2002. – V. 116. – № 8. – P. 3362–3369.
15. Медведев, Н.Н. Метод Вороного–Делоне в исследовании структуры некристаллических систем / Н.Н. Медведев. – Новосибирск: Изд-во СО РАН. – 2000. – 214 с.
16. Еланский, Г.Н. Строение и свойства металлических расплавов / Г.Н. Еланский, Д.Г. Еланский. – М.: МГВМИ, 2006 – 228 с.
17. Соболев, А.Н. Структура и свойства жидкого железа: первопринципное компьютерное моделирование / А.Н. Соболев, А.А. Мирзоев // Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы. – 2009. – Т. 12. – С. 1–4.

Поступила в редакцию 26 апреля 2012 г.

THE INFLUENCE OF EFFECTIVE PAIR POTENTIAL HYBRIDIZATION ON THE LIQUID IRON PROPERTIES

V.A. Starukhin¹, A.A. Mirzoev²

A set of effective pair potentials for liquid iron at 1923 K was calculated by means of D.K. Belashchenko hybridization method. The present article illustrates the influence of a hybrid potential choice on the model of thermodynamics and structural properties. On the basis of the results obtained a criterion for the most adequate effective pair potential selection from a set of hybrid potentials is proposed.

Keywords: effective pair potential, computer simulation, disordered systems, liquid structure, molecular dynamics.

References

1. Toth G. Interactions from diffraction data: historical and comprehensive overview of simulation assisted methods. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2007. Vol. 19. pp. 1–18.
2. Schommers W. A pair potential liquid rubidium from the pair correlation function. *Phys. Lett. A*. 1973. Vol. 43. pp. 157–158.
3. Schommers W. Pair potentials in disordered many-particle systems: A study for liquid gallium. *Phys. Rev. A*. 1983. Vol. 28. pp. 3599–3605.
4. Henderson R.L. A uniqueness theorem for fluid pair correlation functions. *Phys. Lett. A*. 1974. Vol. 49. pp. 197–198.
5. Chayes J.T., Chayes L. On the validity of the inverse conjecture in classical density functional theory. *J. Stat. Physics*. 1984. Vol. 36. pp. 471–488.
6. Belashchenko D.K. Families of Intermolecular Potentials Corresponding to Identical Structure of Noncrystalline Substances in the Method of Molecular Dynamics. *Russian J. Phys. Chem.* 2004. Vol. 78. pp. 1621–1628.

¹ Starukhin Victor Andreevich is Post-graduate Student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.
E-mail: victor_starukhin@mail.ru

² Mirzoev Alexander Aminulaevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.
E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

7. Belashchenko D.K., Syrykh G.F. Computer Simulation of Amorphous Ni–Nb Alloys from Diffraction Data. *Inorganic Materials*. 2004. Vol. 40. pp. 483–493.
8. Starukhin V.A., Belashchenko D.K., Mirzoev A.A., Vorontsov A.G. Primenenie metoda Shommersa dlia polucheniia hibridnogo parnogo potentsiala (The application of Schommers scheme for obtaining hybrid pair potential). *Raspilavy*. 2012. no. 3. pp. 57–67. (in Russ.).
9. Starukhin V.A., Mirzoev A.A., Vorontsov A.G. Primenenie metoda Shommersa dlia rascheta parnogo potentsiala v NPT ansamble (The application of Schommers scheme for the calculation of effective pair potential in NPT ensemble). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2011. Issue. 4. no. 10(227). pp. 106–113. (in Russ.).
10. Waseda Y. *The structure of Non-crystalline Materials. Liquids and Amorphous Solids*. New York: McGraw-Hill, 1980. 325 p.
11. Plimpton S., Thompson A., Crozier P. *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*. <http://lammps.sandia.gov>
12. Hoover W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Phys. Rev. A*. 1985. Vol. 31. pp. 1695–1697.
13. Hoover W.G. Constant pressure equations of motion. *Phys Rev A*. 1986. Vol. 34. pp. 2499–2503.
14. Patrice B., Muller-Plathe F. The shear viscosity of molecular fluids: A calculation by reverse nonequilibrium molecular dynamics. *Journal Of Chemical Physics*. 2002. Vol. 116, no. 8. pp. 3362–3369.
15. Medvedev N.N. *Metod Voronogo–Delone v issledovanii struktury nekristallicheskih sistem* (Voronoi–Delone method in the analysis of non-crystalline system structure). Novosibirsk: Izd-vo SO RAN. 2000. 214 p. (in Russ.).
16. Elanskii G.N., Elanskii D.G. *Stroenie i svoistva metallicheskih rasplavov* (The structure and properties of metallic melts). M.: MGVTI, 2006. 228 p. (in Russ.).
17. Sobolev A.N., Mirzoev A.A. *Fazovye perekhody, uporiadochennye sostoiianiia i novye materialy*. 2009. Vol. 12. pp. 1–4. (in Russ.).

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК, ПОЛУЧАЕМЫХ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ В ВАКУУМЕ

А.А. Троицкий¹, В.М. Березин², В.С. Лукашев³

Были получены пленочные образцы распыленного в вакууме и осажденного на нагретую стеклянную подложку графита. С помощью атомно-силовой и электронной микроскопии исследована поверхность и элементный состав. Было измерено удельное поверхностное сопротивление пленок и найдена его зависимость от толщины пленки.

Ключевые слова: графен, углерод, электронно-лучевое распыление, углеродные пленки, тонкие пленки.

Введение

Последнее два десятилетия ознаменовались быстрым темпом развития микроэлектроники, который можно наблюдать как в совершенствовании элементной, так и программной (логической) базы. Однако настоящий прогресс обнажил проблему, связанную, в первую очередь, с кремнием – главным материалом всех электронных устройств. Проблема заключается в том, что постепенное уменьшение размеров элементов в кристалле (сейчас технология производства подошла к рубежу 22–30 нм) приводит к ухудшению характеристик устройств, например, к увеличению токов утечки в полевых транзисторах.

В качестве замены кремния как основного материала микро- и нанoeлектроники рассматривается множество различных материалов и композитов, но самым привлекательным материалом считается графен. Графен представляет собой монослой кристаллического графита и состоит из атомов углерода, составляющих правильную гексагональную элементарную ячейку (рис. 1). Детальное теоретическое описание зонной структуры, проводимости, зоны Бриллюэна графита (и графена, в частности) было проведено в 1947 году [1], но сам материал был получен микромеханическим методом лишь в 2004 году, что дало мощнейший толчок изучению различных свойств и созданию всевозможных прототипных устройств на его основе [2].

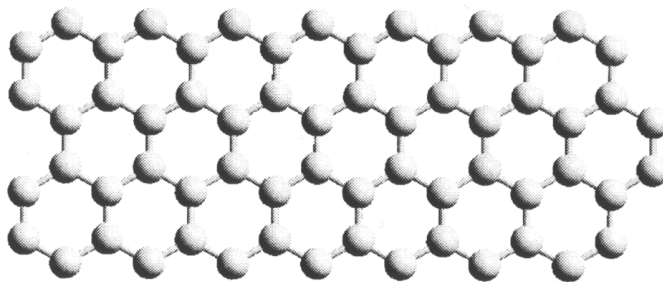


Рис. 1. Структура графена

Основными замечательными свойствами этого материала являются высокая подвижность носителей заряда (при нормальных условиях в 10 раз больше чем в кремнии) [3], амбиполярный полевой эффект [4], баллистический транспорт при нормальных условиях [5], возможность изучения квантового эффекта Холла [6] и др. Однако с графеном не все так просто. Во-первых, вблизи границы зоны Бриллюэна закон дисперсии имеет линейную зависимость, а зона проводимости и валентная зона смыкаются в точке Дирака – таким образом, графен обладает нулевой запрещенной зоной (рис. 2) [7]. Отсутствие зазора между зонами может затруднить создание эффективных транзисторов на основе графена из-за невозможности переключения между состояниями 0 и 1. Во-вторых, производство одного слоя бездефектного графена большого размера еще

¹ Троицкий Андрей Александрович – аспирант, кафедра технологии приборостроения, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: andrei.troitskiy@gmail.com

² Березин Владимир Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра технологии приборостроения, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: bvm@susu.ac.ru

³ Лукашев Владимир Сергеевич – инженер-электроник, кафедра технологии приборостроения, Южно-Уральский государственный университет.

не отлажено. В-третьих, возникают сложности с выбором подходящей изолирующей подложки, а также переносом графена с поверхности проводящего металла на диэлектрик без нарушения размеров и структуры монослоя графена. Несмотря на эти и другие ограничения графен по-прежнему захватывает умы ученых.



Рис. 2. Зона Бриллюэна и закон дисперсии для графена

Возникновение запрещенной зоны было предсказано в двухслойном графене, а также в планарной системе графен/h-BN (рис. 3), однако экспериментально такого эффекта пока еще не обнаружено [8–10].

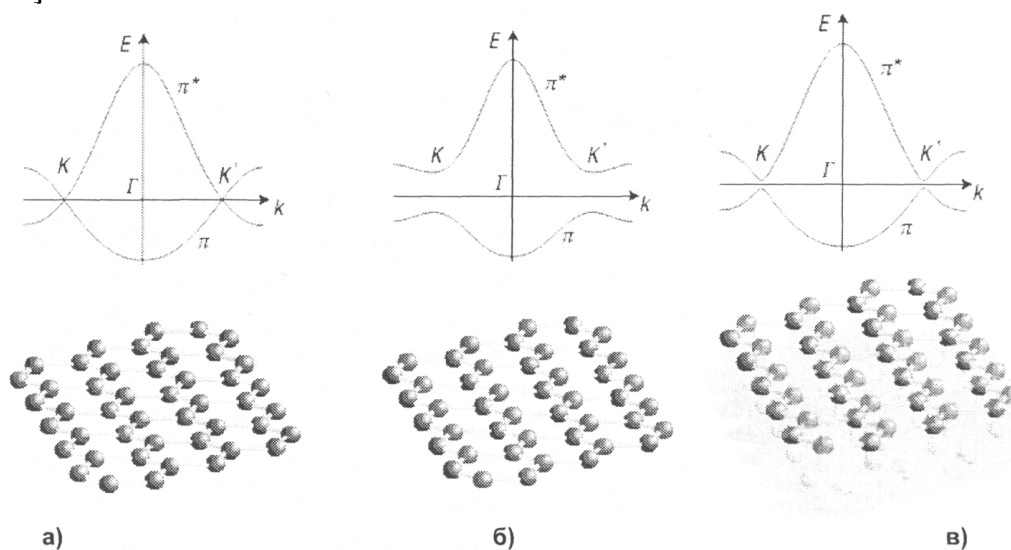


Рис. 3. Закон дисперсии для: графена (а), h-BN (б) и эпитаксиальный графен на подложке (в)

Также появление запрещенной зоны из-за квантово-размерного эффекта наблюдается в графеновых нанолентах. При ширине ленты 20 нм запрещенная зона составляет 28 мэВ. При уменьшении ширины наноленты можно добиться большей ширины запрещенной зоны, поскольку она обратно пропорциональна ширине [11].

Сравнение методик получения графена

На данный момент существует несколько принципиально различных методов получения данного материала. Эти методы можно разделить на три большие группы:

1) механическое отшелушивание (расслоение) является наиболее распространённым методом для производства больших образцов с размером ~10 мкм, пригодных для транспортных и оптических измерений, в первое время механическое отщепление или отшелушивание было основным способом получения материала;

2) химические методы: отличаются большим процентом выхода материала, но малыми размерами плёнок ~10–100 нм;

3) эпитаксиальные методы и метод термического разложения SiC подложки, благодаря которым можно вырастить плёнки графена.

Развитие методик 2-й и 3-й групп привело к повышению интереса к графену и созданию всевозможных прототипных устройств на его основе. Например, уже сейчас есть прототипы интегральных схем (ИС) на графене, работающих на частоте до 10 ГГц при комнатной температуре (300–400 К). Площадь всей микросхемы вместе с контактными площадками составила менее 1 мм², а работоспособность была проверена в заданном диапазоне [12].

В настоящее время не существует технологий эффективного получения графена. Самый большой лист графена, который удалось получить в лабораторных условиях, имеет прямоугольную форму с диагональю 20 см [13]. В свою очередь, для промышленного применения (например, в производстве сенсорных экранов) необходимо уметь получать графеновые листы больших линейных размеров.

Экспериментальная часть

Описание эксперимента

В данной статье предлагается еще один метод получения углеродных и графеноподобных пленок. Метод заключается в том, что углеродосодержащий источник (в нашем эксперименте использовались кристалл графита и спрессованный вспененный графит) распыляется в вакууме электронным пучком (electron beam evaporation) и осаждается на подложке. Конечно, в виду значительной площади формируемой пленки, шероховатости поверхности стекла и динамики режимов распыления сразу после напыления получить абсолютно однородную пленку не представляется возможным. Однако мы считаем, что при помощи более точной калибровки оборудования, последующей химической или другой обработки можно получить графеновые структуры достаточной площади для различных применений в нанoeлектронике.

В нашем методе в верхней части камеры предварительно размещается стеклянная подложка (размерами 25x75мм), на которой находятся медные контакты. Контакты изготавливаются фотолитографическим способом, схема контактов показана на рис. 4, а. Цифрами 1–4 указаны места, в которые будет напыляться углерод. Данные контакты позволяют измерять электрическое сопротивление получаемых на стекле углеродных пленок (УП) непосредственно во время напыления (*in situ*). Результаты *in situ* измерения сопротивления очень интересны и важны для получения сверхтонких пленок – от одного до нескольких десятков слоев графена. Комбинируя напыление и процесс фотолитографии, вместо стеклянной поверхности можно получить металлический (например, никелевый) или диэлектрический (из оксидов кремния) подслоя. Сверху над подложкой устанавливается малогабаритный электродвигатель, который двигает заслонку, тем самым открывая только необходимую площадь для напыления. При переходе от одной области к другой также происходит перемещение подвижного контакта для измерения сопротивления участка. Управление двигателем производится с помощью программы на персональном компьютере. Соединение и питание двигателя осуществляется по проводам через герметичный электропровод. В программе есть возможность задавать скорость движения заслонки и минимальный шаг движения. Таким образом, за один цикл откачки воздуха можно получить до 4 образцов с различной толщиной.

Распыление источника происходит при вакууме порядка 10^{-5} – 10^{-7} torr. Используемую подложку можно нагревать до температуры 500 °С. Нагрев подложки осуществляется инфракрасными лампами. Поток распыленного углерода направлен на подготовленную стеклянную подложку снизу вверх. Толщина получаемой пленки может быть измерена встроенным акустическим датчиком, скорость напыления рассчитывается контроллером. Регулирование скорости можно производить изменением тока или напряжения в луче или же заданием номинальной скорости в автоматическом режиме работы контроллера.

Сложности с *in situ* исследованиями заключаются в том, что стандартным фотолитографическим методом сложно создать контакты меньших размеров, что, безусловно, вносит погрешность в измеряемое значение сопротивления. Также при непосредственном измерении сопротивления необходимо учитывать, что при разгерметизации, охлаждении и возможной реконфигурации пленки ее сопротивление тоже изменится.

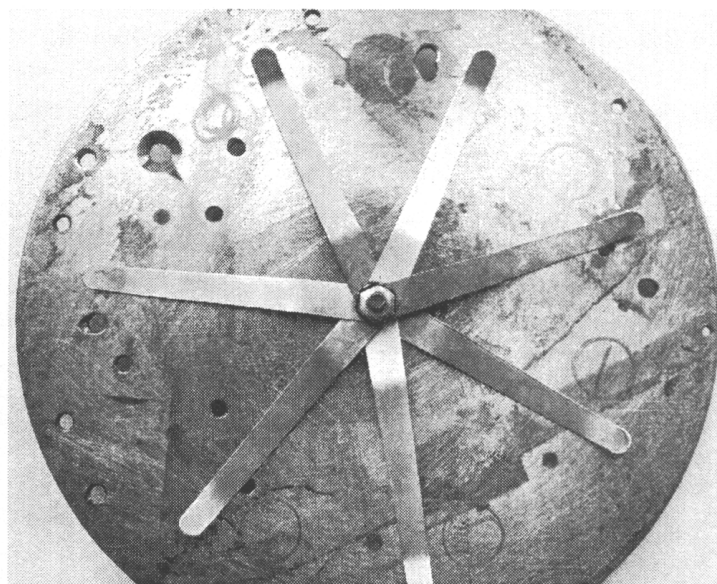
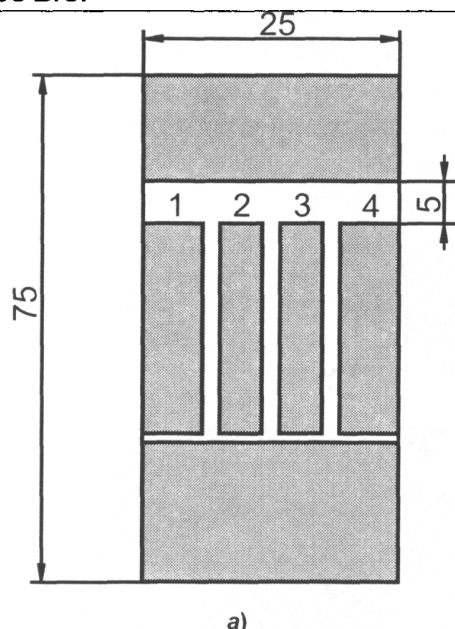


Рис. 4. Схема контактов на стеклянной подложке (а), расположение подложек при напылении за один технический процесс (б)

Поэтому мы также провели измерение сопротивления пленок после их формирования. На монтируемой подложке были размещены 6 держателей под равным углом между собой (рис. 4, б). Под каждый держатель ставится стекло (толщина 0,1 мм, 24x24 мм), под столиком монтируется металлический экран с круглым отверстием (диаметр 10 мм), через которое проходит поток распыляемого вещества. Переход от одного образца к другому осуществляется вручную при помощи поворота герметичного стержня, закрепленного к предметному столику.

Данная методика напыления позволяет получать унифицированные образцы с практически идентичными границами. Преимуществами методики являются: одинаковые параметры среды (температура подложки, вакуум, время нагрева), экономия временных и материальных ресурсов (объема используемой мишени), а также возможность получения пленок различной толщины.

Изучение полученных образцов

На рис. 5, а представлено увеличенное изображение одного из полученных образцов, структура которого нарушена иглой. Для сравнения на рис. 5, б представлено изображение однослойного и двухслойного графена. Светопроницаемость однослойного графена равна 97,7 %, тогда как для двухслойного она ниже на 2,3 % [13]. Из рис. 5, а видно, что получаемая пленка прозрачна, а при наложении нескольких слоев, как и для графена, проницаемость света уменьшается. Стоит отметить, что видимая на рисунке проницаемость света хуже, чем у указанных выше значений, следовательно, можно предположить, что получаемая пленка в несколько раз толще одного или двух слоев графена.

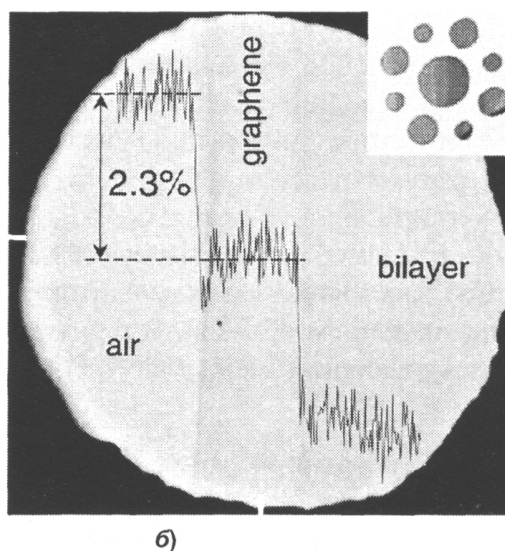
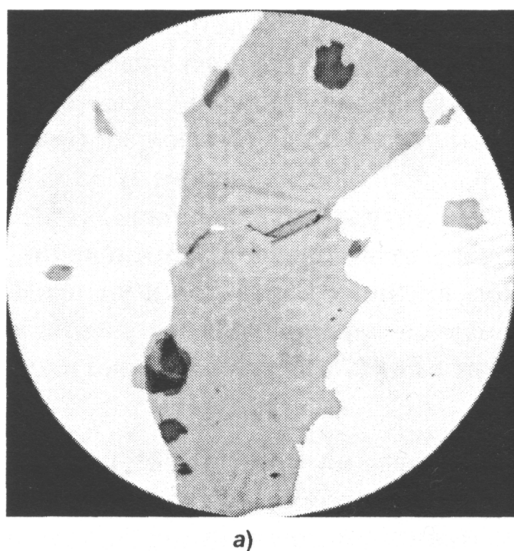


Рис. 5. Увеличенные изображения полученной УП (а) и графена (б)

На рис. 6 представлены изображения, полученные на электронном микроскопе (JEOL JSM-6460 LV). На изображениях видно, что пленка состоит из множества плоских чешушек, которые накладываются друг на друга. Спектральный анализ данного участка пленки подтверждает наличие в спектре углерода и элементов стекла – Si и O₂ и других (см. таблицу).

Элементный анализ пленки

Элемент	C	O	Na	Mg	Al	Si	K	Ca	Итого
Всесовой %	8,40	48,00	4,52	1,56	0,40	30,98	0,50	5,63	100,00

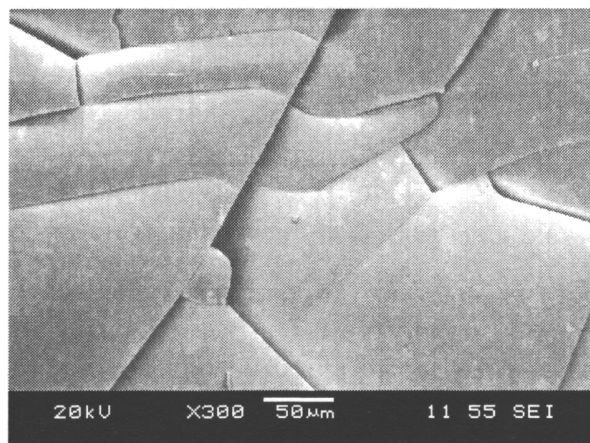
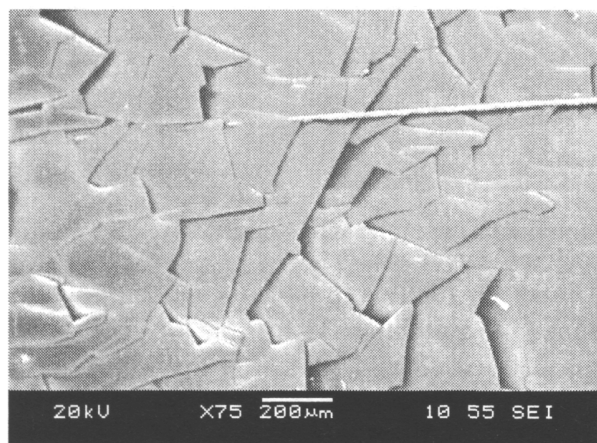


Рис. 6. Электронные изображения УП

Для получения больших и ровных образцов в дальнейшем необходимо изучить влияние температуры подложки, уровня вакуума и типа подложки, на которую напыляется материал.

На рис. 7–8 представлены AFM-изображения трех углеродных пленок разной толщины (1–10 нм, 2–20 нм, 3–30 нм). Толщина измерялась акустическим датчиком толщины.

Из рисунков видно, что чем больше толщина напыляемой пленки, тем ровнее ее поверхность. Для пленки толщиной 10 нм отмечаются равномерные пики и перепады высоты, что может свидетельствовать о кристаллической структуре в пленке и формировании на ней различных зародышей. Относительно гладкая поверхность более толстых пленок, скорее всего, свидетельствует об аморфном состоянии, так как аморфные пленки имеют крайне низкую шероховатость [14]. В центре рис. 8, а видна граница раздела напыленного углерода и стекла. Можно отметить, что граница довольно ровная, без резких перепадов. На рис. 8, б также в центре можно увидеть след царапины от скальпеля, граница тоже ровная с небольшими выступами.

Исследования зависимости сопротивления

На рис. 9 представлены графики зависимости поверхностного сопротивления от толщины формируемой пленки. Толщина УП также измерялась акустическим датчиком толщины. Поверхностное сопротивление измерялось на цифровом измерителе удельного поверхностного сопротивления полупроводниковых материалов ИУС-3. Измерение производится четырехзондовым методом. Контактное устройство обеспечивает контактирование четырех контактов, расположенных на равных расстояниях друг от друга ($1 \pm 0,015$ мм), с измеряемым образцом. Через 2 внешних контакта пропускается переменный ток, амплитуда которого зависит от выбранного диапазона (в пределах от 0,23 мкА до 23 мА). Ток создаст в образце распределение потенциала, определяемое расстоянием между контактами, током внешних контактов и удельным поверхностным сопротивлением образца. В приборе производится определение отношения амплитуд напряжения, возникающего между внутренними контактами манипулятора и тока внешних контактов.

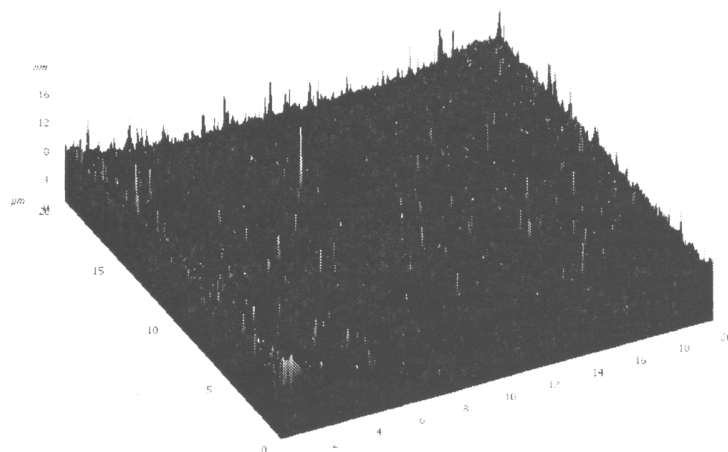


Рис. 7. AFM-изображение пленки, толщина 10 нм

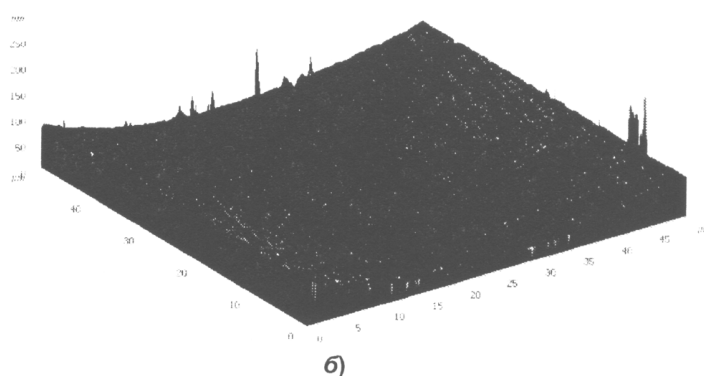
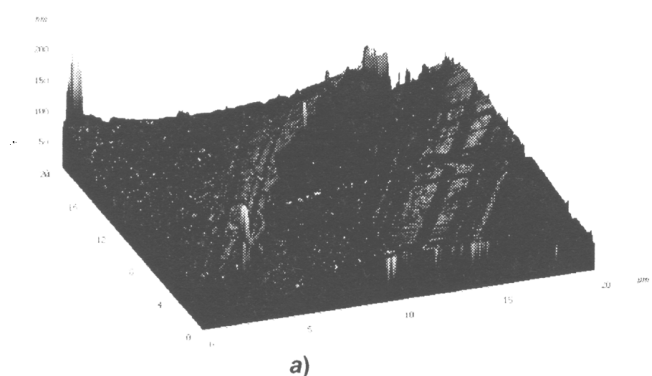


Рис. 8. AFM-изображение пленок толщиной 20 (а) и 30 (б) нм

Из графика видно, что при различных режимах напыления сопротивление получаемых пленок одной толщины различается. Это может быть связано, во-первых, с температурой подложки (в работе [15] эта зависимость доказана), из-за которой процесс формирования слоя изменяется. Во-вторых, из-за возможной погрешности датчика толщины, вызванной различной степенью осаждения напыляемого углерода к стеклу и к мембране датчика.

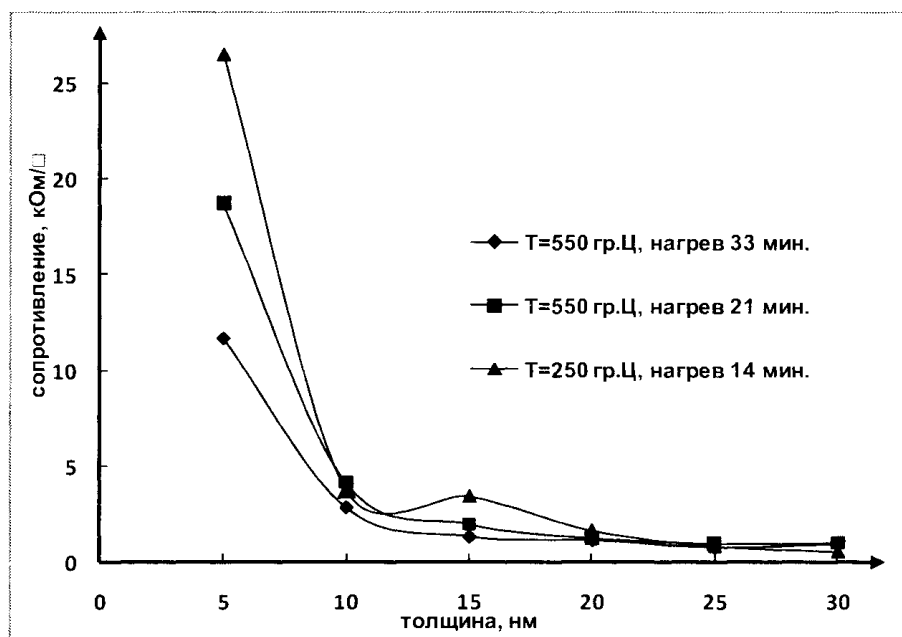


Рис. 9. Зависимости сопротивления от толщины тонких УП

Заключение

В данной работе были изучены углеродные пленки, получаемые распылением графитсодержащей мишени. Анализ поверхности получаемых пленок показал, что при большой толщине пленки она имеет очень низкую шероховатость, в то время как у тонких пленок наблюдаются пики и неровности на поверхности, что может свидетельствовать о кристаллической структуре пленки.

Литература

1. Wallace, P. R. The band theory of graphite / P.R. Wallace // *Phys. Rev.* – 1947. – V. 71, № 9. – P. 622–634.
2. Geim, A.K. The rise of graphene / A.K. Geim, K.S. Novoselov // *Nature Mater.* – 2007. – V. 6. – P. 183–191.
3. Schwierz, F. Graphene Transistors / F. Schwierz // *Nature Nanotech.* – 2010. – V. 5. – P. 487–496.
4. Field effect in epitaxial graphene on a silicon carbide substrate / Gong Gu, Shu Nie, R.M. Feenstra *et al.* // *Appl. Phys. Lett.* – 2007. – Vol. 90. – P. 253507.
5. Geim, A.K. Graphene: Status and Prospects / A.K. Geim // *Science.* – 2009. – V. 324. – P. 1530–1534.
6. Williams, J.R. Quantum Hall Effect in a Gate-Controlled p-n Junction of Graphene / J.R. Williams, L. DiCarlo, C.M. Marcus // *Science.* – 2007. – V. 317. – P. 638–641.
7. Wafer-Scale Graphene Integrated Circuit. / Yu-Ming Lin, Alberto Valdes-Garcia, Shu-Jen Han *et al.* // *Science.* – 2011. – V. 332. – P. 1294–1297.
8. Dean, C.R. Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics / C.R. Dean, A.F. Young, I. Eric // *Nanotech.* – 2010. – V. 5. – P. 722–726.
9. Novoselov, K. Mind the Gap / K.S. Novoselov // *Nature Mater.* – 2007. – V. 6. – P. 720–721.
10. Usachov, D. Quasifreestanding single-layer hexagonal boron nitride as a substrate for graphene synthesis / D. Usachov, V.K. Adamchuk // *Phys. Rev. B* – 2010. – V. 82. – P. 075415.
11. Zhihong, Chen Graphene nano-ribbon electronics / Zhihong Chen, Yu-Ming Lin, Michael J. Rooks, Phaedon Avouris // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, – 2010. – V. 40. – Issue 2. – P. 228–232.
12. Roll-to-roll production of 30-inch graphene films for transparent electrodes / S. Bac, H. Kim, Y. Lee *et al.* // *Nature Nanotechnology.* – 2010. – Vol. 5. – C. 574–578.
13. Nair, R.R. Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene / R.R. Nair, P. Blake, A.N. Grigorenko // *Science.* – 2008. – V. 320. – P. 1308.
14. Синельников, Б.М. Моделирование процессов образования аморфных и кристаллических пленок углерода / Б.М. Синельников, В.А. Тарала // *Материалы электрон. техники.* – 2010. – № 1. – С. 32–40.
15. Васильев, В.А. Диффузионная модель роста и морфология поверхностей тонких пленок материалов / В.А. Васильев, П.С. Чернов // *Нано- и микросистемная техника.* – 2011. – № 11 – С. 11–16.

Поступила в редакцию 6 июля 2012 г.

STRUCTURE AND PROPERTIES OF CARBON FILMS PRODUCED BY ELECTRON-BEAM EVAPORATION IN VACUUM

A.A. Troitskiy¹, V.M. Berezin², V.S. Lukashev³

Graphene, a one-atom thick, two-dimensional sheet of carbon atoms, approve oneself as a promising material for nanoelectronic devices. Here we proposed the method of producing this material by an electron beam evaporation of a carbon crystal in a vacuum chamber (equipment produced by TORR INTERNATIONAL, INC.). We obtained series of samples of films with different thickness and substrate temperatures and measured their surface resistance with a 4-pinned resistance measurer. The samples were measured at room temperature. We found out, that our samples as well as graphene sheets are transparent, while overlapping two films together their transparence decreases. We found out a dependence of thickness and the substrate temperature on the film resistance. Also we found out a dependence of the substrate temperature on an undulation of obtained carbon films.

Keywords: graphene, carbon, electron beam evaporation, carbon films, thin films.

References

1. Wallace P.R. The band theory of graphite. *Phys. Rev.* 1947. Vol. 71, no. 9. pp. 622–634.
2. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene. *Nature Mater.* 2007. Vol. 6. pp. 183–191.
3. Schwierz F. Graphene Transistors. *Nature Nanotech.* 2010. Vol. 5. pp. 487–496.
4. Gu Gong, Nie Shu, Feenstra R.M., Devaty R.P., Choyke W.J., Chan Winston K., Kane Michael G. Field effect in epitaxial graphene on a silicon carbide substrate. *Appl. Phys. Lett.* 2007. Vol. 90. p. 253507. DOI: 10.1063/1.2749839.
5. Geim A.K. Graphene: Status and Prospects. *Science.* 2009. Vol. 324. P. 1530–1534.
6. Williams J.R., DiCarlo L., Marcus C.M. Quantum Hall Effect in a Gate-Controlled p-n Junction of Graphene. *Science.* 2007. Vol. 317. pp. 638–641.
7. Lin Yu-Ming, Valdes-Garcia A., Han Shu-Jen, Farmer Damon B., Meric Inanc, Sun Yanning, Wu Yanqing, Dimitrakopoulos Christos, Grill Alfred, Avouris Phaedon, Jenkins Keith A. Wafer-Scale Graphene Integrated Circuit. *Science.* 2011. Vol. 332. – pp. 1294–1297. DOI: 10.1126/science.1204428
8. Dean C.R., Young A.F., Eric I. Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics. *Nanotech.* 2010. Vol. 5. pp. 722–726.
9. Novoselov K.S. Mind the Gap. *Nature Mater.* 2007. Vol. 6. pp. 720–721.
10. Usachov D., Adamchuk V.K. Quasifreestanding single-layer hexagonal boron nitride as a substrate for graphene synthesis. *Phys. Rev. B.* 2010. Vol. 82. p. 075415.
11. Chen Zhihong, Lin Yu-Ming, Rooks Michael J., Avouris Phaedon Graphene nano-ribbon electronics. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* 2010. Vol. 40. Issue 2. pp. 228–232. DOI: 10.1016/j.physe.2007.06.020
12. Bae S., Kim H., Lee Y. *et al.* Roll-to-roll production of 30-inch graphene films for transparent electrodes. *Nature Nanotechnology.* 2010. Vol. 5. pp. 574–578. DOI:10.1038/nnano.2010.132
13. Nair R.R., Blake P., Grigorenko A.N. Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene. *Science.* 2008. Vol. 320. p. 1308.
14. Sinel'nikov B.M., Tarala V.A. *Materialy elektron. tekhniki.* 2010. no. 1. pp. 32–40. (in Russ.).
15. Vasil'ev V.A., Chernov P.S. *Nano- i mikrosistemnaia tekhnika.* 2011. no. 11. pp. 11–16. (in Russ.).

¹ Troitskiy Andrei Aleksandrovich is Post-Graduate Student, Instrument Production Technique department, South Ural State University.
E-mail: andrei.troitskiy@gmail.com

² Berezin Vladimir Mikhailovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Instrument Production Technique department, South Ural State University.
E-mail: bvm@usuu.ac.ru

³ Lukashev Vladimir Sergeevich is Electronic Engineer, Instrument Production Technique department, South Ural State University.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОДОВОГО СОСТАВА ИЗЛУЧЕНИЯ, РАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ В МАЛОМОДОВОМ ОПТИЧЕСКОМ ВОЛОКНЕ

М.В. Большаков¹, М.А. Комарова², Н.Д. Кундикова³

Исследована возможность восстановления модового состава излучения, распространяющегося в оптическом волокне со ступенчатым профилем показателя преломления, по распределению поля на выходном торце волокна. Разработан и протестирован метод определения комплексных амплитуд мод оптического волокна с помощью генетического алгоритма и продемонстрирована возможность его использования.

Ключевые слова: оптическое волокно, моды оптического волокна, генетический алгоритм.

Интерес к волоконной оптике обусловлен множествами достоинств, обеспеченных структурой оптических волокон, и явлений, возникающих в нем, а также благодаря развитию фундаментальных и прикладных исследований в оптике и квантовой электронике. Хотя теория оптических волноводов хорошо разработана (например, [1, 2]), определение характеристик когерентного излучения остается весьма актуальной задачей. Практическая реализация многомодовых систем всегда осложнялась из-за множества нерешенных проблем. Такие проблемы возникают как в экспериментальных, так и в теоретических задачах, обусловленных особенностями многомодового волноводного распространения. Важнейшим вопросом в разработках и исследованиях таких систем является разложение световых лучей по модам в оптическом волноводе [3, 4]. Знание модового состава волокна необходимо, например, для определения дисперсии материала, образующего волновод [5], может эффективно использоваться в оптических коммуникациях, использующих волоконные лазеры и усилители [6]. Следует отметить, что волоконные лазеры, накачиваемые через оболочку, требуют полного знания и анализа модового состава исходного излучения, например, чтобы оптимизировать оптическую схему накачки [7]. Приблизительные методы для многомодового волокна, которые предполагали, что модовый состав непрерывен и распределение поля азимутально-симметрично уже известны достаточно давно (например, [8]), но до настоящего времени не было проведено точного анализа модового состава волокна.

В 1994 году был впервые предсказан и экспериментально обнаружен эффект поворота спекл-картины света при прохождении через оптическое волокно, помещенное во внешнее продольное магнитное поле при смене знака магнитного поля или его включении [9]. Это явление представляет собой наибольший интерес. Таким образом, прикладной характер носит перспективность использования оптических волокон в качестве датчиков физических полей (электрического и магнитного поля, механические напряжения и др.) и инструмента исследований в квантовой нелинейной оптике. Вместе с тем ряд проблем, связанных с влиянием магнитного поля на распространение света в волокне, недостаточно изучен. Одна из проблем заключается в согласовании экспериментально полученных данных с теоретическими. Если бы удалось в теории получить коэффициенты при модах, которые были возбуждены в результате экспериментальной работы, то можно было бы приблизить модель к эксперименту. В общем случае задача нахождения коэффициентов при различных модах представляется сложной задачей оптимизации. Наиболее подходящим методом оптимизации для решения этой задачи является генетический алгоритм [10, 11].

¹ Большаков Максим Вячеславович — кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет.

² Комарова Марианна Алексеевна — аспирант, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: marianna-a@mail.ru

³ Кундикова Наталия Дмитриевна — доктор физико-математических наук, профессор, декан физического факультета, отдел нелинейной оптики Института электрофизики РАН, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: knd@susu.ac.ru

Для того чтобы правильно задавать модовый состав в оптическом волокне, необходимо контролировать его на выходе. Выбор коэффициентов при разных модах в пучке и определяет модовый состав излучения оптического волокна. Все вышесказанное и определяет актуальность данного исследования.

В настоящей статье исследуется возможность использования генетического алгоритма для определения модового состава излучения оптического волокна. Фактически исследование посвящено решению обратной задачи волоконной оптики – восстановлению модового состава излучения во входной торцевой области оптического волновода по наблюдаемой интерференционной картине (коротко – спекл-картине). Целью данной работы являлась именно разработка алгоритма для определения коэффициентов при различных модах оптического волновода.

Предлагаемый метод состоит в подборе таких комплексных амплитуд $C_{m,N}$ при модах, чтобы распределение интенсивности (спекл-картина) совпадало с измеренным распределением интенсивности. Распределение поля на выходе из волокна рассчитывалось по выражению [12]:

$$E^{\pm}(r, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \cdot \left\{ \sum_{m \neq 1} \sum_N C_{\mp, m, N} e^{\mp i m \varphi} F_{m, N}(r) e^{i z (\beta_{m, N} + \delta \beta_{m, N}^{(2)})} + \right. \\ \left. + \sum_m \sum_N C_{\pm, m, N} e^{\pm i m \varphi} F_{m, N}(r) e^{i z (\beta_{m, N} + \delta \beta_{m, N}^{(1)})} + \right. \\ \left. + \sum_N C_{\mp, 1, N} e^{\mp i m \varphi} F_{1, N}(r) e^{i z \beta_{1, N}} (e^{i 2 z \delta \beta_{1, N}^{(2)}} + 1) \right\} + \\ + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp i \end{pmatrix} \cdot \left[e^{\pm i \varphi} \sum_N C_{\mp, 1, N} F_{1, N}(r) e^{\pm i z \beta_{1, N}} (e^{i 2 z \delta \beta_{1, N}^{(2)}} - 1) \right], \quad (1)$$

где знак «+» в верхнем регистре $E^{\pm}(r, \varphi, z)$ означает, что на входной торце волокна падает излучение с правой циркулярной поляризацией, а знак «-» – с левой. Затем распределение поля преобразовывалось в распределение интенсивности.

В общем случае задача нахождения коэффициентов $C_{m,N}$ при различных модах представляется сложной задачей оптимизации. Наиболее подходящим методом оптимизации для решения данной задачи является генетический алгоритм. Этот алгоритм может эффективно применяться для решения задач дискретной оптимизации, определённых на конечных множествах произвольной природы. Комплексные амплитуды $C_{m,N}$ при различных модах можно представить функцией

$C_{m,N} = c_{m,N} \cdot e^{\psi_{m,N}}$. В программе они задавались с помощью генератора случайных чисел. Если на входной торце волокна падает свет с циркулярной поляризацией, то каждой моде, распространившейся в волокне, соответствуют два коэффициента $C_{-,m,N} = c_{-,m,N} \cdot e^{\psi_{-,m,N}}$ и $C_{+,m,N} = c_{+,m,N} \cdot e^{\psi_{+,m,N}}$, где знаки «+» и «-» в обозначениях соответствуют знакам при m в формуле (1). Таким образом, каждая мода задается четырьмя коэффициентами: двумя амплитудными $c_{m,N}^+$, $c_{m,N}^-$ и двумя фазовыми $\psi_{m,N}^+$, $\psi_{m,N}^-$.

Подбор комплексных амплитуд $C_{m,N}$ при модах осуществляли так, чтобы эталонное распределение поля совпало с каким-либо расчетным распределением поля. В программе вычислялись амплитудные A и фазовые φ распределения x и y компонент поля, по которым и производилось сравнение распределений поля. Для сравнения использовалась функция среднеквадратичного отклонения. Такие жесткие условия обеспечили получение одного решения, которое скатывалось к эталонным коэффициентам при модах.

Для моделирования было выбрано маломодовое оптическое волокно со ступенчатым профилем показателя преломления со следующими параметрами: показатель преломления сердцевины $n = 1,47$, показатель преломления оболочки $n = 1,46588$, радиус сердцевины волокна $\rho = 4,5$ мкм, длина волокна $d = 40$ см. Для данного оптического волокна и длины волны света, распространяющейся в нем, равной 0,633 мкм, возбуждаются 4 моды. Были произведены тестовые

расчеты, найденные коэффициенты при четырех модах находились с некоторой погрешностью. Средняя погрешность для амплитудных и фазовых коэффициентов составляла 8 %.

Таким образом, был разработан и протестирован метод определения комплексных амплитуд мод оптического волокна с помощью генетического алгоритма. Основным преимуществом данного метода является нахождение одного единственного экстремума, обеспеченного жесткими условиями сравнения распределений поля и большим размером популяции (параметр генетических операторов).

Литература

1. Adams, M.J. An introduction to optical waveguides / M.J. Adams. – J. Willey and Sons, 1981. – 401 p.
2. Снайдер, А. Теория оптических волноводов / А. Снайдер, Д. Лав. – М.: Радио и связь, 1987. – 656 с.
3. Kaiser, T. Complete modal decomposition for optical fibers using CGH-based correlation filters / T. Kaiser, D. Flamm, S. Schroter, M. Duparre // Optics Express. – 2009. – V. 17, № 11. – P. 9347–9356.
4. Shapira, O. Complete modal decomposition for optical waveguides / O. Shapira, A.F. Abouraddy, J.D. Joannopoulos, Y. Fink // Physical Review Letters. – 2005. – V. 94, № 14. – P. 143902.
5. Feit, M.D. Calculation of dispersion in graded-index multimode fibers by a propagating-beam method / M.D. Feit, J.A. Fleck, Jr. // Applied Optics. – 1979. – V. 18, № 16. – P. 2843–2851.
6. Huo, Y. Analysis of transverse mode competition and selection in multicore fiber lasers / Y. Huo, P.K. Cheo // JOSA B. – 2005. – V. 22, № 11. – P. 2345–2349.
7. Gong, M. Numerical modeling of transverse mode competition in strongly pumped multimode fiber lasers and amplifiers / M. Gong, Y. Yuan, C. Li, P. Yan, H. Zhang, S. Liao // Optics Express. – 2007. – V. 15, № 6. – P. 3236–3246.
8. Snyder, A.W. Modes of optical waveguides / A.W. Snyder, W.R. Young // Journal Optical Society of America. – 1978. – V. 68, № 3. – P. 297–307.
9. Наблюдение «магнитного» поворота спекл-картины света, прошедшего через оптическое волокно / М.Я. Даршт, И.В. Жиргалова, Б.Я. Зельдович, Н.Д. Кундикова // Письма в ЖЭТФ. – 1994. – Т. 59, № 11. – С. 734–736.
10. Гладков, Л.А. Генетические алгоритмы / Л.А. Гладков, В.М. Курейчик, В.В. Курейчик. – М.: Физматлит, 2006. – 320 с.
11. Емельянов, В.В. Теория и практика эволюционного моделирования / В.В. Емельянов, В.М. Курейчик, В.В. Курейчик. – М.: Физматлит, 2003. – 432 с.
12. Большаков, М.В. Особенности распространения когерентного поляризованного света в оптических волокнах / М.В. Большаков, Н.С. Ваганова, Н.Д. Кундикова // Общая и техническая физика. – 2006. – Вып. 1(31). – С. 10–15.

Поступила в редакцию 13 сентября 2012 г.

DETERMINATION OF THE MODE COMPOSITION PROPAGATING IN A FEW-MODE OPTICAL FIBER

M.V. Bolshakov¹, M.A. Komarova², N.D. Kundikova³

The possibility for regeneration of a mode structure of radiation extending in the optical fiber with step index by field distribution at out fiber end is studied in the article. Test method for complex amplitudes of optical fiber modes is developed with the help of genetic algorithm and the possibility for its application is shown.

Keywords: optical fiber, optical fiber modes, genetic algorithm.

References

1. Adams M.J. *An introduction to optical waveguides*. J. Willey and Sons, 1981. 401 p.
2. Snaider A., Lav D. *Teoriia opticheskikh volnovodov* (Optical Waveguide Theory). Moscow: Radio i svyaz', 1987. 656 p. (in Russ.). [Snyder A.W., Love J. *Optical Waveguide Theory*. Chapman and Hall, 1983. 734 p.] (in Eng.).
3. Kaiser T., Flamm D., Schroter S., Duparre M. Complete modal decomposition for optical fibers using CGH-based correlation filters. *Optics Express*. 2009. Vol. 17, no. 11. pp. 9347–9356.
4. Shapira O., Abouraddy A.F., Joannopoulos J.D., Fink Y. Complete modal decomposition for optical waveguides. *Physical Review Letters*. 2005. Vol. 94, no 14. p. 143902.
5. Feit M.D., Fleck J.A., Jr. Calculation of dispersion in graded-index multimode fibers by a propagating-beam method. *Applied Optics*. 1979. Vol. 18, no. 16. pp. 2843–2851.
6. Huo Y., Cheo P.K. Analysis of transverse mode competition and selection in multicore fiber lasers. *Josa B*. 2005. Vol. 22, no 11. pp. 2345–2349.
7. Gong M., Yuan Y., Li C., Yan P., Zhang H., Liao S. Numerical modeling of transverse mode competition in strongly pumped multimode fiber lasers and amplifiers. *Optics Express*. 2007. Vol. 15, no 6. pp. 3236–3246.
8. Snyder A.W., Young W.R. Modes of optical waveguides. *Journal Optical Society of America*. 1978. Vol. 68, no. 3. pp. 297–307.
9. Darsht M.Ya., Zhirgalova I.V., Zel'dovich B.Ya., Kundikova N.D. *Pis'ma v ZhETF*. 1994. Vol. 59, no. 11. pp. 734–736. (in Russ.).
10. Gladkov L.A., Kureichik V.M., Kureichik V.V. *Geneticheskie algoritmy* (Genetic algorithms). M.: Fizmatlit, 2006. 320 p.
11. Emel'ianov V.V., Kureichik V.M., Kureichik V.V. *Teoriia i praktika evoliutsionnogo modelirovaniia* (Theory and practice of evolutionary simulation). Moscow: Fizmatlit, 2003. 432 p. (in Russ.).
12. Bolshakov M.V., Vaganova N.S., Kundikova N.D. *Obshchaia i tekhnicheskaiia fizika*. 2006. Issue. 1(31). pp. 10–15. (in Russ.).

¹ Bolshakov Maxim Vyacheslavovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), associate professor, Optics and Spectroscopy Department, South Ural State University.

² Komarova Marianna Alekseevna is Post-graduate student, Optics and Spectroscopy Department, South Ural State University.
E-mail: marianna-a@mail.ru

³ Kundikova Nataliya Dmitrievna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Dean of Physics Faculty, Joint Nonlinear Optics Laboratory of IEF RAS, Optics and Spectroscopy Department, South Ural State University.
E-mail: kno@susu.ac.ru

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА ТИТАНА ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ПОКАЗАТЕЛЕМ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ФОТОРЕЗИСТА SU-8 ДЛЯ СИНТЕЗА ТРЕХМЕРНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

А.М. Герасимов¹, Н.Д. Кундикова², Ю.В. Микляев³

Проведено исследование влияния наночастиц диоксида титана на оптические свойства суспензий. Рассчитан эффективный показатель преломления наночастиц диоксида титана. Получен нанокомпозитный материал: фоторезист SU-8/наночастицы TiO_2 с низким уровнем рассеяния, объемным содержанием наночастиц 38 % и ориентировочным значением показателя преломления 1,97.

Ключевые слова: нанокомпозит, фоторезист, показатель преломления, фотонные кристаллы.

Введение

В настоящее время исследование возможностей управления показателем преломления оптических материалов вызывает повышенный интерес. В ряде практических применений очень желательным является высокий показатель преломления. Так, например, как показано в работе [1], эффективность светодиодов увеличивается почти в два раза, когда показатель преломления их оболочки увеличивается с 1,5 до 2,0. В то же время показатель преломления большинства оптических полимерных материалов достаточно невысок, и существенной проблемой является получение полимерных и фотополимерных материалов с показателями преломления выше 1,7 и ниже 1,3. Для повышения показателя преломления полимеров предлагалось использовать нанокомпозитные материалы, состоящие из полимера с металлическими и оксидными наночастицами, а для уменьшения показателя преломления применяется методика создания нанопористых систем оксида кремния, фосфида галлия [2]. Задача повышения показателя преломления материала возникает при синтезе трехмерных фотонных кристаллов с полной запрещенной зоной в видимом диапазоне длин волн. Наиболее низким значением контраста показателя преломления для возникновения запрещенной зоны обладают фотонные кристаллы с симметрией решетки алмаза. Так, в работе [3] показано, что решетки с такой симметрией, которые могут быть синтезированы из фотополимерных материалов методом интерференционной литографии, будут обладать запрещенной зоной при минимальном показателе преломления 1,9. Большинство существующих фоторезистов, применяемых для синтеза трехмерно-периодических структур имеют значение коэффициента преломления в видимой области около $n = 1,7$. В данной работе приводятся экспериментальные результаты по созданию композитного материала из фоторезиста SU-8 ($n = 1,67$) и наночастиц диоксида титана TiO_2 с высоким объемным содержанием наночастиц и низким уровнем рассеяния света.

Измерение эффективного показателя преломления наночастиц TiO_2 , диспергированных в воде и метилэтилкетоне (МЕК)

Для определения собственного показателя преломления наночастиц диоксида титана, диспергированных в воде и в МЕК, мы использовали измерения показателя преломления суспензий на рефрактометре при разных концентрациях частиц. Для определения показателя преломления по полученным данным использовались две модели эффективной изотропной среды – модель Максвелла–Гарнетта и модель Бруггемана. Измерения коэффициента преломления суспензий TiO_2 в заданной концентрации сравнивались со значениями, полученными путем расчета по двум упомянутым моделям. В качестве ориентира было взято табличное значение показателя прелом-

¹ Герасимов Александр Михайлович – аспирант, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: Alexandro.gerasimov@gmail.com

² Кундикова Наталья Дмитриевна – доктор физико-математических наук, профессор, декан физического факультета, отдел нелинейной оптики Института электрофизики РАН, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: kndd@susu.ac.ru

³ Микляев Юрий Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет.

ления для TiO_2 в фазе анатаза $n = 2,5$. При этом значения показателя преломления для чистой воды ($n_1 = 1,334$) и МЕКа ($n_2 = 1,38$) при измерении практически совпали с табличными значениями ($n_1 = 1,33$ и $n_2 = 1,378$ – $1,38$). На рис. 1, можно видеть сравнение экспериментальных данных с расчетными данными по моделям Максвелла–Гарнетта и Бруггемана для суспензии диоксида титана в воде и на рис. 2 для суспензии в МЕКе. Как видно из графиков, экспериментальные значения эффективного показателя преломления суспензий оказались близки к расчетным, а среднее значение эффективного показателя преломления наночастиц TiO_2 , рассчитанное по двум моделям, составило величину $n = 2,49$.

Таким образом, можно констатировать, что наночастицы TiO_2 хорошо диспергированы в воде, а значение их эффективного показателя преломления близко к табличному значению показателя преломления кристаллической фазы диоксида титана.

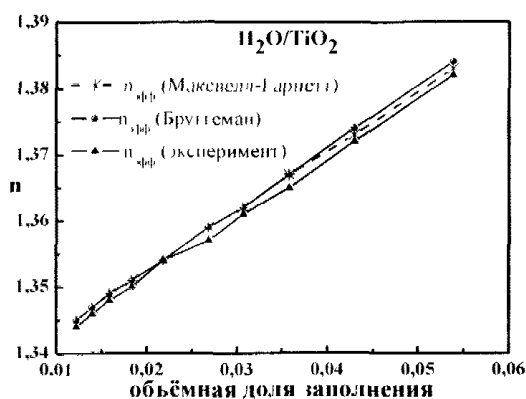


Рис. 1. Измерение показателя преломления суспензий наночастиц TiO_2 в воде

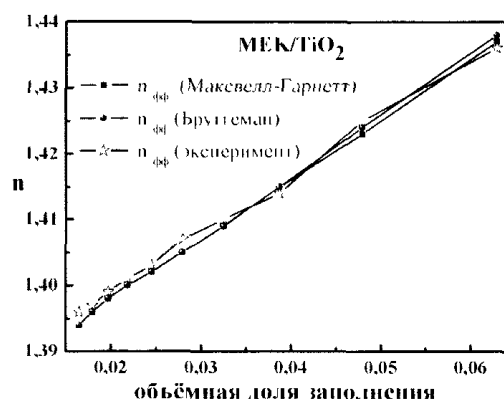


Рис. 2. Измерение показателя преломления суспензий наночастиц TiO_2 в МЕКе

Синтез нанокомпозитного материала SU-8/ TiO_2 с низким уровнем рассеяния и высоким содержанием наночастиц

Сам процесс приготовления нанокомпозитного материала достаточно сложен и включает в себя несколько этапов. На первом этапе мы имеем специально приготовленную суспензию диоксида титана в растворителе, применимом для используемого фоторезиста. В нашем случае мы использовали МЕК и специальным образом стабилизированные для данного растворителя наночастицы диоксида титана. Затем отмеряли количество сухого фоторезиста, необходимое для соблюдения объемной пропорции с диоксидом титана, так, чтобы объемная доля последнего была равна 38 %. Процесс растворения фоторезиста в суспензии лучше всего проводить центрифугированием емкости с суспензией при 2000–3000 об/мин в течение короткого времени – 3–5 мин. Не рекомендуется использовать ультразвук той же частоты, что и при приготовлении суспензии, так как при добавлении фоторезиста резонансные частоты твердых компонент суспензии изменяются и это может вызвать агрегацию наночастиц. Фоторезист растворяется в суспензии и на выходе мы имеем нанокомпозитный материал с нужным объемным соотношением твердых компонент. Затем растворитель частично испаряется до достижения «рабочей» вязкости фоторезиста.

На выходе мы имеем готовый нанокомпозитный материал, представляющий собой массу, несколько более жидкую, чем исходный фоторезист с растворителем, к тому же немного изменившую цвет – с прозрачного она стала немного отливать желтизной. Данный материал – будущая основа трехмерных периодических структур, которые в теории обладают фотонной запрещенной зоной. Итак, путем растворения SU-8 в суспензии TiO_2 в МЕК был создан нанокомпозит SU-8/ TiO_2 с объемным содержанием наночастиц TiO_2 , равным 38 %. Согласно значениям эффективного показателя преломления наночастиц TiO_2 , полученным в ходе экспериментов с суспензиями, можно дать приблизительную оценку величины показателя преломления данного нанокомпозитного материала. Более точная оценка получится по модели Бруггемана, так как данное приближение лучше подходит для композитных материалов с большими концентрациями наночастиц. Согласно данной модели, значение коэффициента преломления полученного нанокомпозитного материала получилось равным 1,97. Данное значение показателя преломления материала близко к тем пороговым значениям, которые требуются для возникновения фотонной запрещенной зоны.

Проверка возможности использования композитного материала SU-8/TiO₂ для интерференционной литографии

В ходе экспериментов нами был получен нанокомпозитный материал с высокой концентрацией наночастиц TiO₂ и низким уровнем рассеяния света. Однако сама возможность синтеза фотонных кристаллов из подобного материала нуждается в проверке, поскольку неизвестно, насколько изменились фотохимические свойства данного фоторезиста при его замене по объёму более чем на треть наночастицами TiO₂. Для такой проверки была проведена серия экспериментов, которые доказали, что нарушения процесса полимеризации при таком высоком содержании наночастиц не происходит. В результате освещения светом ультрафиолетового диапазона и высушивания пленок композитного материала после проявки полученный материал является устойчивым к растворителям неполимеризованного фоторезиста. Это подтвердило возможность синтеза из полученного материала фотонных кристаллов методом интерференционной литографии.

Измерение уровня рассеяния композитного материала SU-8/TiO₂

Полученный нанокомпозитный материал в виде прозрачной пленки был нанесен на стеклянную подложку, после чего фоторезист был полностью полимеризован. Для оценки уровня рассеяния данного композитного материала проводились измерения интенсивности пропускания падающего по нормали на пленку фоторезиста излучения He-Ne лазера. Коэффициент пропускания образца с наночастицами оказался на 10 % меньше, чем у образца с фоторезистом без наночастиц.

В заключение получен новый нанокомпозитный материал, состоящий из фоторезиста SU-8 и наночастиц диоксида титана с объёмной концентрацией наночастиц около 38 %. Данный материал обладает требуемыми фотохимическими свойствами, характерными для исходного фоторезиста, низким уровнем рассеяния света и ориентировочным показателем преломления 1,97. Данные измерений свидетельствуют о том, что данный нанокомпозитный материал может быть использован для синтеза трехмерных фотонных кристаллов методом интерференционной литографии.

Литература

1. High-refractive-index TiO₂-nanoparticle-loaded encapsulants for light-emitting diodes / F.W. Mont, J.K. Kim, M.F. Schubert *et al.* // J. Appl. Phys. – 2008. – V. 103. – P. 083120.
2. Головань, Л.А. Оптические свойства нанокомпозитов на основе пористых систем / Л.А. Головань, В.Ю. Тимошенко, П.К. Кашкаров // УФН. – 2007. – Т. 177, № 6. – С. 619–638.
3. Sharp, D.N. Holographic photonic crystals with diamond symmetry / D.N. Sharp, A.J. Turberfield, R.G. Denning // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 68. – P. 205102.

Поступила в редакцию 19 сентября 2012 г.

THE USE OF TITANIUM DIOXIDE NANOPARTICLES TO CONTROL THE REFRACTIVE INDEX OF THE PHOTORESIST SU-8 FOR THE SYNTHESIS OF THREE-DIMENSIONAL PHOTONIC CRYSTALS

A.M. Gerasimov¹, N.D. Kundikova², Yu.V. Miklyaev³

The effect of titanium dioxide nanoparticles on the optical properties of the suspensions is studied in the article. The effective refraction index of titanium dioxide nanoparticles is calculated. Nanocomposite material synthesis, consisting of SU-8 photoresist and nanoparticles TiO_2 is obtained. This material demonstrates low light scattering with volume filling factor 0,38 and value of the refraction index which is about 1,97.

Keywords: nanocomposite, photoresist, refraction index, photonic crystals.

References

1. Mont F.W., Kim J.K., Schubert M.F., Schubert E.F., Siegel R.W. High-refractive-index TiO_2 -nanoparticle-loaded encapsulants for light-emitting diodes. *J. Appl. Phys.* 2008. Vol. 103. p. 083120.
2. Golovan L.A., Timoshenko V. Yu., Kashkarov P. K. Optical properties of porous-system-based nanocomposites. *Phys. Usp.* 2007. Vol. 50. pp. 595–612. DOI: 10.1070/PU2007v050n06ABEH006257
3. Sharp D.N., Turberfield A.J., Denning R.G. Holographic photonic crystals with diamond symmetry. *Phys. Rev. B.* 2003. Vol. 68. p. 205102.

¹ Gerasimov Alexander Michaylovich is Post-graduate student, Optics and Spectroscopy Department, South Ural State University.
E-mail: Alexandro.gerasimov@gmail.com

² Kundikova Nataliya Dmitrievna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Dean of Physics Faculty, Join Nonlinear Optics Laboratory of IEF RAS, Optics and Spectroscopy Department, South Ural State University.
E-mail: knd@susu.ac.ru

³ Miklyaev Yuriy Vladimirovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), associate professor, Optics and Spectroscopy Department, South Ural State University.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ ИМПУЛЬСНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ, ВОЗБУЖДАЕМЫХ ВОЛНАМИ ЛЭМБА В МАГНИТОПОЛЯРИЗОВАННОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛАСТИНЕ

С.Ю. Гуревич¹, Ю.В. Петров², Е.В. Голубев³, А.А. Шульгинов⁴

Экспериментально исследован процесс регистрации ультразвука, возбуждаемого лазером в металлических пластинах с помощью широкополосного ЭМА-приемника. Результаты исследований можно использовать для создания бесконтактных методов и средств ультразвукового контроля листовых металлоизделий.

Ключевые слова: лазерное возбуждение, ультразвуковые волны Лэмба, широкополосный ЭМА-приемник, спектр, ферромагнетик.

Введение

Для контроля качества листовых металлоизделий, имеющих высокую температуру (до 1000 °С), большую скорость перемещения (до 20 м/с) в процессе производства, грубообработанную поверхность (литьё, горячий прокат,ковка, штамповка и т.п.) в последние годы используют бесконтактные у.з. методы. Перспективными здесь представляется оптико-акустический метод, при котором генерация у.з. волн осуществляется с помощью наносекундных импульсов ОКГ, а их регистрация – широкополосным электромагнитно-акустическим приёмником.

Поскольку оптический импульс очень короткий, то спектр частот генерируемых лазером у.з. импульсов должен быть значительно шире, чем в случае возбуждения волн Лэмба с помощью узкополосных (резонансных) пьезоискателей. А поскольку регистрация этих волн, как правило, осуществляется такими же искателями, то применение широкополосного ЭМА-приёмника, даст возможность подробнее исследовать спектр возбуждаемых лазером у.з. импульсов, получить дополнительную информацию об ультразвуковых волнах с различными частотами колебаний (модах) в металлической пластине.

Эксперимент

Для проведения исследований по регистрации ультразвука, возбуждаемого лазером в металлических пластинах с помощью широкополосного ЭМА-приемника, была собрана экспериментальная установка, схема которой приведена на рис. 1. Образцами служили шлифованные ферромагнитные металлические пластины размерами 270х60 мм, толщиной 0,60; 1,50 мм. Генерация волн Лэмба в пластинах осуществляется импульсным лазером ЛТИ-403, работающим на длине волны 1064 нм в многомодовом режиме. Длительность импульсов лазерного излучения 30 нс, максимальная энергия 0,30 Дж. Для возбуждения у.з. импульсов достаточной амплитуды диаметр лазерного пятна и средняя мощность лазерного излучения были подобраны опытным путем и соответственно равны 2,0 мм и 0,22 Вт.

У.з. колебания, распространяясь в пластине, регистрируются широкополосным ЭМА-приемником [1]. Работает такой приемник следующим образом. Элементы объема металлического ферромагнетика, под действием упругих волн изменяют свою форму и за счет линейного магнитоупругого эффекта создают переменное магнитное поле, которое наводит в высокочастотном индукторе ЭДС, пропорциональную упругим смещениям. Таким образом, ЭМА-приёмник реги-

¹ Гуревич Сергей Юрьевич – доктор технических наук, профессор, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: sergur@susu.ac.ru

² Петров Юрий Владимирович – кандидат технических наук, доцент, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет

³ Голубев Евгений Валерьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет.

⁴ Шульгинов Александр Анатольевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет

E-mail: saa@susu.ac.ru

стрирует импульсы электромагнитного поля, наводимого у.з. волнами. Внешнее (поляризующее) магнитное поле увеличивает амплитуду наводимой ЭДС, особенно в случае, когда оно имеет в основном тангенциальную составляющую. Более подробно о механизме трансформации упругих волн в электромагнитные можно узнать из работы [2].

Визуализация электрических импульсов осуществляется с помощью двухканального осциллографа GDS-2202, предназначенного для исследования и измерения параметров периодических и непериодических сигналов.

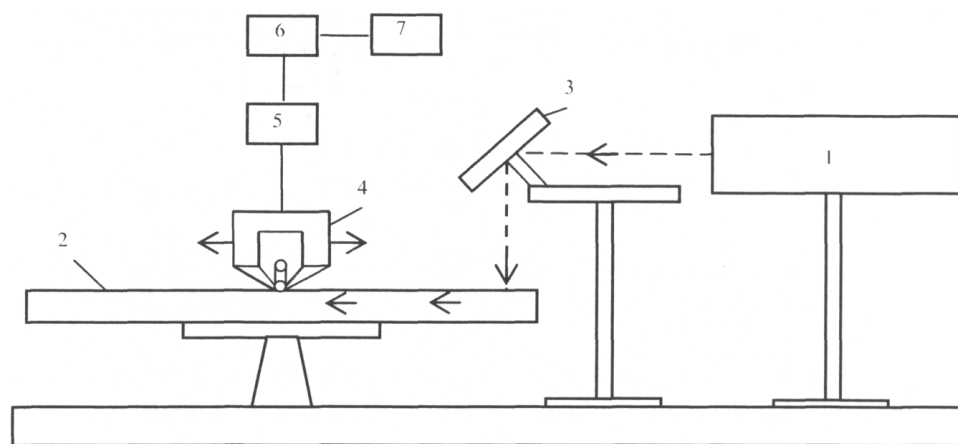


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1 – лазер, 2 – металлическая пластина, 3 – подвижный столик с поворотным зеркалом, 4 – ЭМА-приёмник, 5 – усилитель тока, 6 – усилитель напряжения, 7 – осциллограф

Обсуждение результатов

На рис. 2 приведена осциллограмма электромагнитных импульсов, наводимых волнами Лэмба в металлической пластине толщиной 0,6 мм, полученная с помощью экспериментальной установки. Тип и номер возбуждаемых в пластине у.з. волн Лэмба определялись по методике, предложенной авторами в работе [3]. Из результатов экспериментов и расчетов следует, что при лазерной генерации акустических волн в тонкой металлической пластине широкополосный ЭМА-приёмник регистрирует импульсы, наведенные симметричными s_0 и антисимметричными a_0 волнами Лэмба нулевых номеров. Для оценки и сравнения формы, максимальной амплитуды U , длительности τ и частоты колебаний ν этих импульсов на рис. 3 и 4 приведены их осциллограммы с меньшей временной разверткой.

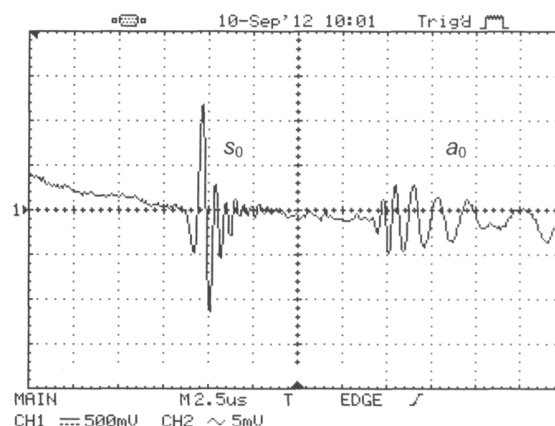


Рис. 2. Электромагнитные импульсы, наведенные волнами Лэмба: s_0 – симметричные волны, a_0 – антисимметричные волны

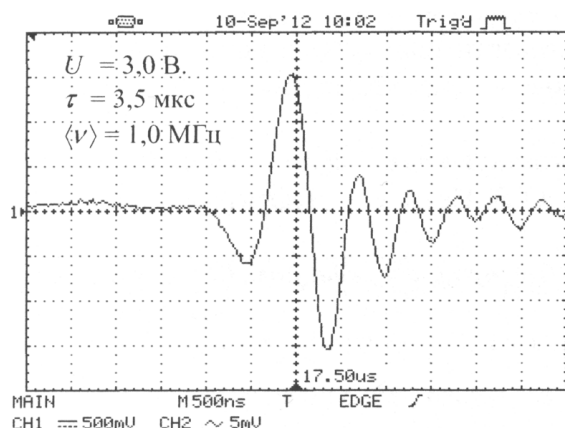


Рис. 3. Электромагнитный импульс, наведенный симметричной волной s_0 Лэмба

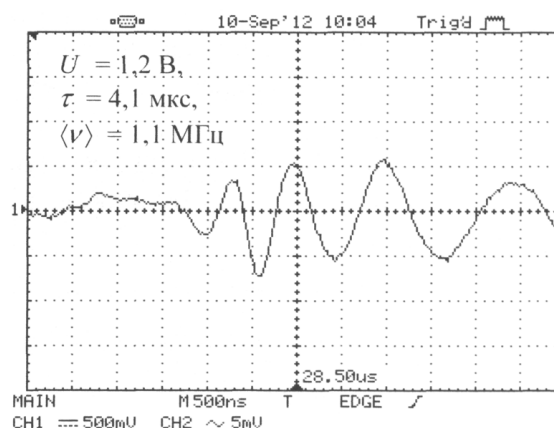


Рис. 4. Электромагнитный импульс, наведенный антисимметричной волной a_0 Лэмба

Наблюдаемые отличия связаны, очевидно, с особенностями лазерной генерации волн Лэмба. Для оценки ширины частотного спектра возбуждаемых лазером у.з. импульсов, с помощью Фурье-преобразования был рассчитан спектр электромагнитного импульса, наведенного симметричными s_0 волнами (рис. 5).

Видно, что вся энергия у.з. импульса, длительность которого равна 3,5 мкс, практически заключена в пределах от 0 до 1,75 МГц с максимумом амплитуды на частоте $\approx 1,0$ МГц. В то же время у оптического импульса, длительность которого ≈ 30 нс, верхний предел частотного диапазона ограничивается ≈ 30 МГц. Такое уменьшение частоты означает, что металл хорошо пропускает низкочастотную часть спектра у.з. импульса (до 2,5 МГц) и интенсивно поглощает его высокочастотную (больше 2,5 МГц) часть.

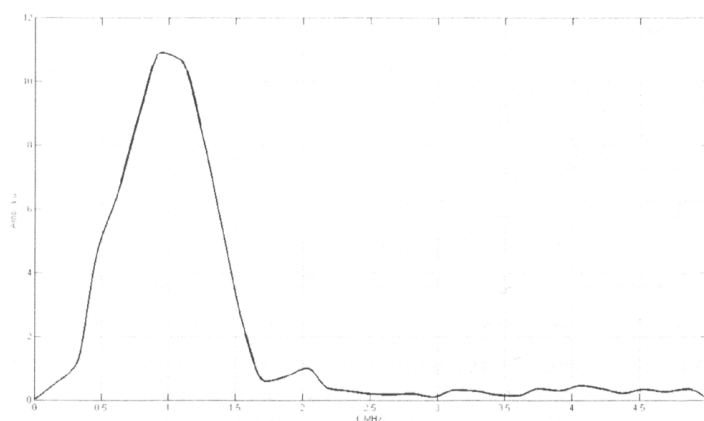


Рис. 5. Спектр электромагнитного импульса, наведенного симметричными волнами s_0 Лэмба

В случае, когда необходимо получить максимальную амплитуду у.з. импульса, например, для реализации эхо- или эхо-зеркального методов у.з. контроля, целесообразнее использовать резонансный ЭМА-приёмник. Его высокочастотный индуктор выполняется в виде многовитковой противофазной рамки или решетки из нескольких последовательно соединенных рамок и настраивается на резонансную частоту спектра [4].

Информацию, полученную в результате дальнейших исследований на созданной установке, можно использовать для разработки оптимальных бесконтактных методов и средств ультразвукового контроля, когда излучателем ультразвука является импульсный лазер, а приемником — электромагнитно-акустический преобразователь.

Литература

1. Электромагнитно-акустический преобразователь для регистрации упругих волн, возбуждаемых лучом лазера / Ю.В. Петров, В.Н. Уманец, В.Ю. Тросман, В.А. Ершов // Дефектоскопия. — 1989. — № 11. — С. 89–91.
2. Комаров, В.А. Теория физических полей: в 3 т. Т. III. Связанные поля / В.А. Комаров, В.Ф. Мужичкий, С.Ю. Гуревич. — Челябинск–Ижевск: Издательство ЮУрГУ, 2000. — 627 с.
3. Гуревич, С.Ю. Исследование температурной зависимости параметров волн при их лазерной генерации / С.Ю. Гуревич, Е.В. Голубев, Ю.В. Петров. — Дефектоскопия. — 2011. — № 8. — С. 29–38.
4. Буденков, Г.А. Регистрация наклонных ультразвуковых волн электромагнитно-акустическим способом / Г.А. Буденков, З.Д. Головачева, Ю.В. Петров. — Дефектоскопия. — 1974, — № 2. — С. 62–70.

Поступила в редакцию 12 октября 2012 г.

EXPERIMENTAL SETUP FOR REGISTRATION PULSED ELECTROMAGNETIC FIELDS, EXCITED BY LAMB WAVES IN MAGNETICALLY POLARIZED METAL PLATE

S.Yu. Gurevich¹, Yu.V. Petrov², E.V. Golubev³, A.A. Shulginov⁴

Registration of ultrasound excited by a laser in a metal plate with a broad-band EMA receiver is studied experimentally. The results can be used to create a non-contact methods of ultrasonic testing of sheet metal products.

Keywords laser excitation, ultrasonic Lamb waves, EMA-wideband receiver, range, ferromagnetic metal

References

1. Petrov Yu.V., Umanets V N , Trosman V Yu., Ershov V.A. *Defektoskopia* 1989. no 11. p 89–91 (in Russ.).
2. Komarov V A , Muzhitskii V.F., Gurevich S.Yu. *Teoriya fizicheskikh poлей. T. III Sviazannye po-
lia* (Field Theory Vol. III. Related fields). Cheliabinsk–Izhevsk: Izdatel'stvo YuUrGU. 2000. 627 p. (in
Russ.).
3. Gurevich S Yu., Golubev E.V., Petrov Yu.V. *Defektoskopia* 2011. no 8. pp 29–38. (in Russ.).
4. Budenkov G.A., Golovacheva Z.D., Petrov Yu.V. *Defektoskopia*. 1974. no. 2. p. 62–70. (in
Russ.).

¹ Gurevich Sergei Yurevich is Dr. Sc. (Engineering), Professor General and Experimental Physics Department South Ural State University
E-mail: sergur@susu.ac.ru

Petrov Yuriy Vladimirovich is Cand. Sc. (Engineering) Associate Professor, General and Experimental Physics Department, South Ural State
University

Golubev Evgeniy Valerievich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor General and Experimental Physics Department,
South Ural State University

⁴ Shulginov Alexandr Anatolievich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor General and Experimental Physics Depart-
ment South Ural State University

E-mail: saafa@susu.ac.ru

ОБ ОДНОЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ИГРЕ С ФИКСИРОВАННЫМ МОМЕНТОМ ОКОНЧАНИЯ И С ИНТЕГРАЛЬНОЙ ПЛАТОЙ

Д.В. Гущин¹

Найдены оптимальные управления в дифференциальной игре, в которой управляемая точка переменного состава осуществляет встречу в заданный момент времени с точкой, управляемое движение которой происходит с ограниченной по величине скоростью.

Ключевые слова: дифференциальная игра, оптимальное управление.

1. Введение

В монографии [1] рассматривается дифференциальная игра «изотропные ракеты», в которой первый игрок управляет ограниченной по величине силой, приложенной к движущейся материальной точке. Второй игрок управляет ограниченной по величине скоростью другой точки. В данной работе первый игрок, управляя реактивной силой точки переменного состава, стремится осуществить встречу со второй точкой в заданный момент времени, расходуя при этом как можно меньше ресурсов.

2. Постановка задачи

Движение точки переменного состава описывается уравнением Мещерского [2, с. 25]

$\ddot{x} = -C + w \frac{\dot{m}(t)}{m(t)}$, $x \in R^n$, $C = \text{const}$. Считаем, что норма $\|w\|$ относительной скорости $w \in R^n$ от-

деляющихся частиц является постоянной, а тяга ограничена заданным числом $\gamma > 0$, т.е.

$-\|w\| \frac{\dot{m}(t)}{m(t)} \leq \gamma$. Второй игрок управляет точкой, которая движется с ограниченной скоростью

$\|\dot{y}\| \leq b$. Цель первого игрока заключается в том, чтобы осуществить в заданный момент времени

p встречу $\|y(p) - x(p)\| \leq \varepsilon$, ($\varepsilon > 0$) и израсходовать как можно меньше топлива.

Обозначим $z = y - x - (p-t)\dot{x} - C \frac{(p-t)^2}{2}$, $u = \frac{w}{\gamma} \frac{\dot{m}(t)}{m(t)}$, $v = \frac{1}{b} \dot{y}$. Получим эквивалентную дифференциальную игру

$$\dot{z} = -(p-t)\gamma u + bv, \|u\| \leq 1, \|v\| \leq 1, \|z(p)\| \leq \varepsilon, \int_{t_0}^p \|u(t)\| dt \rightarrow \min_u. \quad (1)$$

3. Построение оптимальных управлений

В работе [3] показано, что для дифференциальной игры вида (1) оптимальные управления

игроков имеют вид $u_0(t, z) = \varphi_0(t)w(z)$, $v_0(t, z) = w(z)$, где $w(z) = \frac{z}{\|z\|}$ при $z \neq 0$ и любое $\|w\|=1$ при $z=0$.

Достаточные условия для нахождения функции $\varphi_0(t)$ из работы [3] для рассматриваемого примера принимают вид

$$\varphi_0(t) = \begin{cases} 1 & \text{при } 1 < (\psi(t) + \lambda)(p-t)\gamma, \\ 0 & \text{при } 1 > (\psi(t) + \lambda)(p-t)\gamma, \\ \forall \varphi_0 \in [0, 1] & \text{при } 1 = (\psi(t) + \lambda)(p-t)\gamma. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь число $\lambda \geq 0$ и неубывающая функция $\psi(t)$, $\psi(0) = 0$ удовлетворяют условиям:

¹ Гущин Денис Васильевич – математик учебно-научной лаборатории методов оптимизации и моделирования игровых ситуаций, кафедра теории управления и оптимизации, Челябинский государственный университет.

E-mail: off_side@mail.ru

$$\int_t^p (b - (p-r)\gamma\varphi_0(r))dr \leq \varepsilon \quad \text{при } t_0 \leq t \leq p; \quad \int_{t_0}^p (b - (p-r)\gamma\varphi_0(r))dr + \|z_0\| \leq \varepsilon; \quad (3)$$

$$\int_{t_0}^p \psi(r)(b - (p-r)\gamma\varphi_0(r))dr = \psi(p)\varepsilon; \quad \lambda \left(\int_{t_0}^p (b - (p-r)\gamma\varphi_0(r))dr + \|z_0\| - \varepsilon \right) = 0.$$

Обозначим $g(t) = (p-t)b - \frac{\gamma}{2}(p-t)^2$, $G(t) = \max_{t \leq r \leq p} g(r)$. Условия совместности первых двух связей в (3) принимают вид $G(t_0) \leq \varepsilon, \|z_0\| \leq \varepsilon - g(t_0)$.

Приведем вид функции $\varphi_0(t)$ в зависимости от начальных условий $\|z_0\|$ и $t_0 < p$.

Случай 1. Пусть $\frac{\varepsilon}{b} \geq \frac{b}{\gamma}$. Разобьем полу-
плоскость с координатами $t, \|z\|$ на три об-
ласти (рис. 1).

Если начальное условие $(t_0, \|z_0\|) \in I$, то $\varphi_0(t) = 0$. Если $(t_0, \|z_0\|) \in II$, то $\varphi_0(t) = 1$ при $t_0 \leq t \leq q_1$, $\varphi_0(t) = \frac{b}{\gamma(p-t)}$ при $q_1 \leq t \leq p - \frac{\varepsilon}{b}$ и $\varphi_0(t) = 0$ при $p - \frac{\varepsilon}{b} \leq t \leq p$. Здесь

$$q_1 = p - \frac{b}{\gamma} - \sqrt{\frac{2}{\gamma} \left(\frac{b^2}{2\gamma} - \|z_0\| - g(t_0) \right)}. \quad \text{Если}$$

$(t_0, \|z_0\|) \in III$, то

$$\varphi_0(t) = 1 \text{ при } t_0 \leq t \leq q_2, \varphi_0(t) = 0 \text{ при } q_2 \leq t \leq p, \quad q_2 = p - \sqrt{\frac{2}{\gamma} (\varepsilon - \|z_0\| - g(t_0))}. \quad (4)$$

Случай 2. Пусть $\frac{b}{2\gamma} \geq \frac{\varepsilon}{b}$. Тогда из ус-
ловий совместности следует, что началь-
ное состояние принадлежит либо области
I, либо области II из рис. 2.

Если $(t_0, \|z_0\|) \in I$, то $\varphi_0(t) = 0$. Если $(t_0, \|z_0\|) \in II$, то $\varphi_0(t)$ задается формулой (4).

Случай 3. Пусть $\frac{b}{\gamma} > \frac{\varepsilon}{b} > \frac{b}{2\gamma}$. Полу-
плоскость $(t, \|z\|)$ разделим на четыре об-
ласти (рис. 3).

Если начальное условие $(t_0, \|z_0\|) \in I$,
то $\varphi_0(t) = 0$. Если $(t_0, \|z_0\|) \in II$, то
 $\varphi_0(t) = 1$ при $t_0 \leq t \leq q_3$, $\varphi_0(t) = \frac{b}{\gamma(p-t)}$

при $q_3 \leq t \leq p - \frac{b}{\gamma}$ и $\varphi_0(t) = 0$ при $p - \frac{b}{\gamma} \leq t \leq p$. Здесь $q_3 = p - \frac{b}{\gamma} - \sqrt{\frac{2}{\gamma} \left(\varepsilon - \frac{b^2}{2\gamma} - \|z_0\| - g(t_0) \right)}$. Если

$(t_0, \|z_0\|) \in III$, то $\varphi_0(t) = 1$ при $t_0 \leq t \leq q_4$, $\varphi_0(t) = \frac{b}{\gamma(p-t)}$ при $q_4 \leq t \leq p - \frac{b}{\gamma}$, $\varphi_0(t) = 1$ при

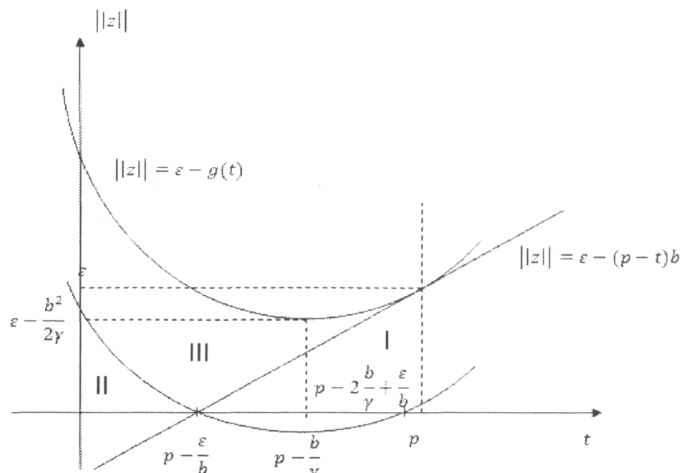


Рис. 1

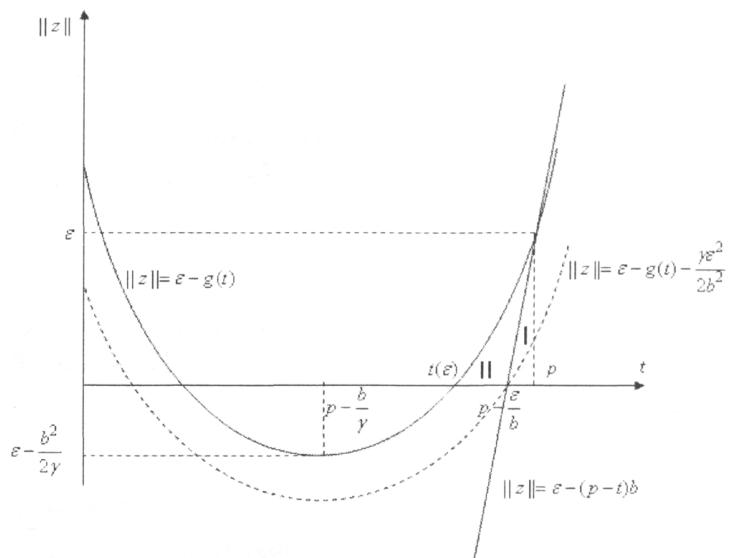


Рис. 2

$p - \frac{b}{\gamma} \leq t \leq \tau$, и $\varphi_0(t) = 0$ при $\tau \leq t \leq p$. Здесь $q_4 = p - \frac{b}{\gamma} - \sqrt{\frac{2}{\gamma} \left(\frac{b^2}{2\gamma} - \|z_0\| - g(t_0) \right)}$ и $\tau = p - \sqrt{\frac{2}{\gamma} \left(\varepsilon - \frac{b^2}{2\gamma} \right)}$. Если $(t_0, \|z_0\|) \in IV$, то $\varphi_0(t)$ задается формулой (4).

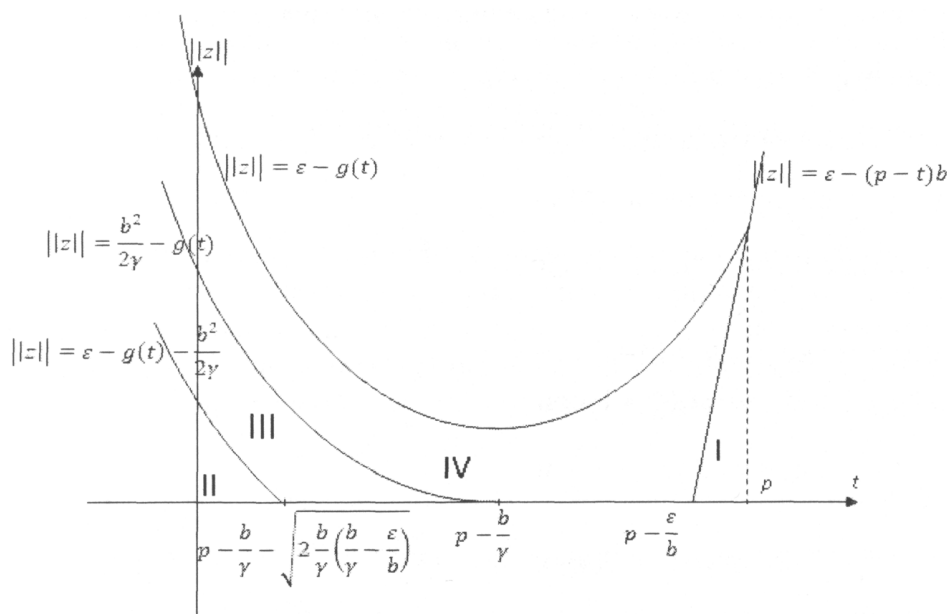


Рис. 3

Литература

1. Айзекс, Р. Дифференциальные игры / Р. Айзекс. – М.: Мир, 1967. – 479 с.
2. Красовский, Н.Н. Теория управления движением / Н.Н. Красовский. – М.: Наука, 1968. – 175 с.
3. Ухоботов, В.И. Однотипные дифференциальные игры с выпуклой интегральной платой / В.И. Ухоботов, Д.В. Гущин // Труды ин-та математики и механики УрО РАН. – 2011. – Т. 17, № 1. – С. 251–258.

Поступила в редакцию 28 сентября 2012 г.

ABOUT ONE DIFFERENTIAL GAME WITH FIXED TIME OF THE TERMINATION AND WITH THE INTEGRATED PRICE

D.V. Gushchin¹

Optimal controls are founded in differential games where the controlled point with variable structure meets another point on a fixed time. The controlled movement of the second point has a limited speed.

Keywords: differential game, optimal control.

References

1. Aizeks R. *Differentsial'nye igry* (Differential Games). Moscow: Mir, 1967. 479 p. (in Russ.).
2. Krasovskii N.N. *Teoriia upravleniia dvizheniem* (The Theory of Motion Control). Moscow: Nauka, 1968. 175 pp.
3. Ukhobotov V.I., Gushchin D.V. *Trudy instituta matematiki i mekhaniki UrO RAN*. 2011. Vol. 17, no. 1. pp. 251–258.

¹ Gushchin Denis Vasilevich is mathematician on optimization methods and modeling of game situation scientific laboratory, Theory of Control and Optimization Department, Chelyabinsk State University.
E-mail: off_side@mail.ru

ОБ ОДНОЙ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННОЙ СИСТЕМЕ ТРЕХ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПЕРВОГО ПОРЯДКА

Е.А. Деркунова¹

Построена и обоснована асимптотика решения сингулярно возмущенной системы, состоящей из трех уравнений в частных производных первого порядка. Малый параметр входит в систему таким образом, что образуются разномасштабные операторы левых частей уравнений. Применяется метод пограничных функций построения асимптотики, что, в частности, сводит систему к стандартным линейным начальным задачам с уравнениями в частных производных. При доказательстве теоремы об оценке остаточных членов используется уже известная схема, сочетающая своеобразный принцип максимума с введением нестандартных членов погранслошной части асимптотики.

Ключевые слова: сингулярно возмущенные задачи, асимптотика, метод пограничных функций, дифференциальные уравнения в частных производных первого порядка.

I. Постановка задачи. Рассмотрим систему вида ($\varepsilon > 0$ – малый параметр)

$$\begin{aligned}\varepsilon^2 \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \varepsilon b_1(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) &= a_{11}(x, t)u + a_{12}(x, t)v + a_{13}(x, t)w + f_1(x, t, \varepsilon), \\ \varepsilon \left(\frac{\partial v}{\partial t} + \varepsilon b_2(x) \frac{\partial v}{\partial x} \right) &= a_{21}(x, t)u + a_{22}(x, t)v + a_{23}(x, t)w + f_2(x, t, \varepsilon), \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \varepsilon b_3(x) \frac{\partial w}{\partial x} &= a_{31}(x, t)u + a_{32}(x, t)v + a_{33}(x, t)w + f_3(x, t, \varepsilon)\end{aligned}\quad (1)$$

в области $G = (0 < x \leq X) \times (0 < t \leq T)$ с граничными условиями

$$u|_{t=0} = u|_{x=0} = v|_{t=0} = v|_{x=0} = w|_{t=0} = w|_{x=0} = 0. \quad (2)$$

Потребуем выполнения следующих условий (см. статью [1]).

Условие 1. Пусть $f_i(0, 0, \varepsilon) = 0$, $\frac{\partial f_i}{\partial x}(0, 0, \varepsilon) = 0$, $\frac{\partial f_i}{\partial t}(0, 0, \varepsilon) = 0$, $i = 1, 2, 3$.

В [1] требовались лишь условия согласования нулевого порядка. Здесь же для построения непрерывной асимптотики погранслошного типа достаточно потребовать также условий на первые производные в угловой точке.

Условие 2. Пусть функции $b_i(x)$, $a_{ij}(x, t)$, $f_i(x, t, \varepsilon)$ дважды непрерывно дифференцируемы в области $\bar{G} \times [0, \varepsilon_0]$.

Условие 3. Пусть $b_i(x) > 0$, $0 \leq x \leq X$, $i = 1, 2, 3$.

Условие 4. $a_{11} + |a_{12}| + |a_{13}| < -\alpha$, $|a_{21}| + a_{22} + |a_{23}| < -\alpha$, $|a_{31}| + |a_{32}| + a_{33} < -\alpha$, где $\alpha > 0$ – некоторое число.

Отметим, что из условия 4 следует, что $a_{11}(x, t) < 0$, $a_{22}(x, t) < 0$, $a_{33}(x, t) < 0$, $\Delta(x, t) < 0$.

Асимптотическое разложение строим в виде ряда по степеням ε , состоящего из регулярной части, пяти обычных и шести угловых пограничных функций [2]:

$$\begin{aligned}u(x, t, \varepsilon) &= \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i (\bar{u}_i(x, t) + \Pi_i u(x, \tau) + \Omega_i u(x, \theta) + Q_i u(\xi, t) + R_i u(\zeta, t) + K_i u(\eta, t) + \\ &+ P_i u(\xi, \tau) + S_i u(\xi, \theta) + T_i u(\zeta, \tau) + H_i u(\zeta, \theta) + M_i u(\eta, \tau) + N_i u(\eta, \theta)),\end{aligned}$$

¹ Деркунова Елена Анатольевна – доцент, кандидат физико-математических наук, кафедра общей математики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: elena.derkunova@rambler.ru

$$v(x, t, \varepsilon) = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i (\bar{v}_i(x, t) + \Pi_i v(x, \tau) + \Omega_i v(x, \theta) + Q_i v(\xi, t) + R_i v(\zeta, t) + K_i v(\eta, t) + \\ + P_i v(\xi, \tau) + S_i v(\xi, \theta) + T_i v(\zeta, \tau) + H_i v(\zeta, \theta) + M_i v(\eta, \tau) + N_i v(\eta, \theta)),$$

$$w(x, t, \varepsilon) = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i (\bar{w}_i(x, t) + \Pi_i w(x, \tau) + \Omega_i w(x, \theta) + Q_i w(\xi, t) + R_i w(\zeta, t) + K_i w(\eta, t) + \\ + P_i w(\xi, \tau) + S_i w(\xi, \theta) + T_i w(\zeta, \tau) + H_i w(\zeta, \theta) + M_i w(\eta, \tau) + N_i w(\eta, \theta)).$$

Здесь $\tau = t/\varepsilon$, $\theta = t/\varepsilon^2$, $\xi = x/\varepsilon$, $\zeta = x/\varepsilon^2$, $\eta = x/\varepsilon^3$ – погранслоиные переменные.

II. Построение асимптотики первого порядка

2.1. Регулярная часть. Функции нулевого и первого порядка ($i = 0, 1$) регулярной части асимптотики получаются из уравнений (здесь и ниже функции с отрицательными индексами считаем равными нулю):

$$a_{11}(x, t)\bar{u}_i + a_{12}(x, t)\bar{v}_i + a_{13}(x, t)\bar{w}_i + f_{1i}(x, t) = 0, \\ a_{21}(x, t)\bar{u}_i + a_{22}(x, t)\bar{v}_i + a_{23}(x, t)\bar{w}_i + f_{2i}(x, t) = \frac{\partial \bar{v}_{i-1}}{\partial t}, \\ \frac{\partial \bar{w}_i}{\partial t} = a_{31}(x, t)\bar{u}_i + a_{32}(x, t)\bar{v}_i + a_{33}(x, t)\bar{w}_i + f_{3i}(x, t) - b_3(x) \frac{\partial \bar{w}_{i-1}}{\partial x}$$

с начальным условием $\bar{w}_i(x, 0) = 0$.

Решение задачи для $\bar{w}_i$ имеет вид

$$\bar{w}_i(x, t) = \int_0^t \frac{\Delta_F(x, t')}{M_{33}(x, t')} e^{\int_0^{t'} M_{33}(x, t'') dt''} dt',$$

тогда получим $\bar{u}_i = \frac{1}{M_{33}(x, t)} (M_{31}(x, t)\bar{w}_i + M_{F31}(x, t))$, $\bar{v}_i = -\frac{1}{M_{33}(x, t)} (M_{32}(x, t)\bar{w}_i + M_{F32}(x, t))$,

где M_{pl} – миноры определителя $\Delta(x, t)$, составленного из коэффициентов a_{pl} ($p, l = 1, 2, 3$) правых частей уравнений исходной системы, а M_{Fpl} – миноры определителя

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & F_{11} \\ a_{21} & a_{22} & F_{21} \\ a_{31} & a_{32} & F_{31} \end{vmatrix} = \Delta_F(x, t), \text{ причем } F_{1i} = f_{1i}, \quad F_{2i} = f_{2i} - \frac{\partial \bar{v}_{i-1}}{\partial t}, \quad F_{3i} = f_{3i} - b_3(x) \frac{\partial \bar{w}_{i-1}}{\partial x}. \text{ Функции}$$

$\bar{u}_i(x, t)$, $\bar{v}_i(x, t)$ вносят невязку на стороны $x = 0$ и $t = 0$, а функции $\bar{w}_i(x, t)$ – на сторону $x = 0$.

2.2. Погранслои вблизи $x = 0$. Функции $Q_i u(\xi, t)$, $Q_i v(\xi, t)$ выражаются через $Q_i w(\xi, t)$ следующим образом:

$$Q_i u(\xi, t) = \frac{1}{M_{33}(0, t)} (M_{31}(0, t)Q_i w(\xi, t) - M_{q31}(\xi, t)), \\ Q_i v(\xi, t) = -\frac{1}{M_{33}(0, t)} (M_{32}(0, t)Q_i w(\xi, t) - M_{q32}(\xi, t)),$$

где M_{pl} – миноры определителя $\Delta(0, t)$, M_{qpl} – миноры определителя

$$\begin{vmatrix} a_{11}(0, t) & a_{12}(0, t) & q_1^{(i)}(\xi, t) \\ a_{21}(0, t) & a_{22}(0, t) & q_2^{(i)}(\xi, t) \\ a_{31}(0, t) & a_{32}(0, t) & q_3^{(i)}(\xi, t) \end{vmatrix} = \Delta_q(\xi, t),$$

где функции $q_p^{(i)}(\xi, t)$, ($p = 1, 2, 3$) рекуррентно выражаются через $Q_{i-1} u(\xi, t)$, $Q_{i-1} v(\xi, t)$, $Q_{i-1} w(\xi, t)$.

Решая уравнение для $Q_i w(\xi, t)$ с известными краевыми условиями, получаем:

$$Q_i w(\xi, t) = \begin{cases} -\bar{w}_i(0, t - \frac{\xi}{b_3(0)}) e^{\int_0^{\xi} \frac{\Delta(0, t - \frac{\xi - \xi'}{b_3(0)})}{b_3(0) M_{33}(0, t - \frac{\xi - \xi'}{b_3(0)})} d\xi'} + \frac{1}{b_3(0)} \int_0^{\xi} \frac{\Delta_q(\xi', t - \frac{\xi - \xi'}{b_3(0)})}{M_{33}(\xi', t - \frac{\xi - \xi'}{b_3(0)})} e^{\int_{\xi'}^{\xi} \frac{\Delta(0, t - \frac{\xi - \xi''}{b_3(0)})}{b_3(0) M_{33}(0, t - \frac{\xi - \xi''}{b_3(0)})} d\xi''} d\xi', & 0 \leq \xi \leq b_3(0)t, \\ \int_0^t \frac{\Delta_q(\xi - b_3(0)(t - t'), t')}{M_{33}(\xi - b_3(0)(t - t'), t')} e^{\int_0^{t'} \frac{\Delta(0, t'')}{M_{33}(0, t'')} dt''} dt', & 0 \leq t \leq \frac{\xi}{b_3(0)}. \end{cases}$$

Заметим, что решение $Q_i v$, а значит и $Q_i u$, не являются, вообще говоря, гладкими на характеристике $\xi = b_3(0)t$. Функции $Q_i u(\xi, t)$, $Q_i v(\xi, t)$ имеют экспоненциальную оценку по переменной ξ .

Решением задач для $R_i w(\varsigma, t)$, $R_i v(\varsigma, t)$ ($i = 0, 1$) будут функции:

$$R_i w(\varsigma, t) = \frac{1}{b_3(0)} \int_{-\infty}^{\varsigma} r_3^{(i)}(\varsigma', t) d\varsigma',$$

$$R_i v(\varsigma, t) = (-\bar{v}_i(0, t) - Q_i v(0, t)) e^{\frac{M_{33}(0, t)}{b_2(0)a_{11}(0, t)}\varsigma} + \frac{1}{b_2(0)} \int_0^{\varsigma} \tilde{r}_2^{(i)}(\varsigma', t) e^{\frac{M_{33}(0, t)}{b_2(0)a_{11}(0, t)}(\varsigma - \varsigma')} d\varsigma',$$

а $R_i u(\varsigma, t)$ выражается через $R_i v(\varsigma, t)$ следующим образом:

$$R_i u = \frac{1}{a_{11}(0, t)} (-a_{12}(0, t) R_i v + r_1^{(i)}(\varsigma, t)).$$

Без труда строятся функции $K_i u(\eta, t)$, $K_i v(\eta, t)$, $K_i w(\eta, t)$.

2.3. Погранслои вблизи $t = 0$. Функции $\Pi_i u(x, \tau)$, $\Pi_i v(x, \tau)$, $\Pi_i w(x, \tau)$, $i = 0, 1$ имеют вид:

$$\Pi_i w(x, \tau) = \int_{-\infty}^{\tau} \pi_3^{(i)}(x, \tau') d\tau', \quad \Pi_i v(x, \tau) = -\bar{v}_i(x, 0) e^{\frac{M_{33}(x, 0)}{a_{11}(x, 0)}\tau} + \int_0^{\tau} \tilde{\pi}_2^{(i)}(x, \tau') e^{\frac{M_{33}(x, 0)}{a_{11}(x, 0)}(\tau - \tau')} d\tau',$$

а функция $\Pi_i u(x, \tau)$ определяется из соотношения

$$\Pi_i u = \frac{1}{a_{11}(x, 0)} (-a_{12}(x, 0) \Pi_i v + \pi_1^{(i)}(x, \tau)).$$

Решение системы для функций $\Omega_i u(x, \theta)$, $\Omega_i v(x, \theta)$, $\Omega_i w(x, \theta)$ ($i = 0, 1$) имеет вид:

$$\Omega_i u(x, \theta) = (-\bar{u}_i(x, 0) - \Pi_i u(x, 0)) e^{a_{11}(x, 0)\theta} + \int_0^{\theta} \omega_1^{(i)}(x, \theta') e^{a_{11}(x, 0)(\theta - \theta')} d\theta',$$

$$\Omega_i v(x, \theta) = \int_{-\infty}^{\theta} \omega_2^{(i)}(x, \theta') d\theta', \quad \Omega_i w(x, \theta) = \int_{-\infty}^{\theta} \omega_3^{(i)}(x, \theta') d\theta'.$$

Все пограничные функции обладают экспоненциальной оценкой.

2.4. Угловой погранслой. Приведем решения системы уравнений для функций $T_i u(\varsigma, \tau)$, $T_i v(\varsigma, \tau)$, $i = 0, 1$, $T_i w(\varsigma, \tau)$, $i = 0, 1$:

$$T_i w(\varsigma, \tau) = \begin{cases} -\Pi_i w(0, \tau - \frac{\varsigma}{b_3(0)}) + \frac{1}{b_3(0)} \int_0^{\varsigma} t_3^{(i)}(\varsigma', \tau - \frac{\varsigma - \varsigma'}{b_3(0)}) d\varsigma', & \varsigma \leq b_3(0)\tau, \\ -R_i w(\varsigma - b_3(0)\tau, 0) + \int_0^{\tau} t_3^{(i)}(\varsigma - b_3(0)(\tau - \tau'), \tau') d\tau', & \tau \leq \frac{\varsigma}{b_3(0)}. \end{cases}$$

Получаем, что $T_i u(\varsigma, \tau) = (-a_{12}(0, 0) T_i v(\varsigma, \tau) + t_1^{(i)}(\varsigma, \tau)) / a_{11}(0, 0)$, а функция $T_i v(\varsigma, \tau)$ выражается следующим образом:

$$T_1 v(\zeta, \tau) = \begin{cases} -P_1 v(0, \tau - \frac{\zeta}{b_2(0)}) e^{\frac{M_{33}(0,0)}{b_2(0)a_{11}(0,0)} \zeta} + \frac{1}{b_2(0)} \int_0^{\zeta} \tilde{t}_2^{(1)}(\zeta', \tau - \frac{\zeta - \zeta'}{b_2(0)}) e^{\frac{M_{33}(0,0)}{b_2(0)a_{11}(0,0)} (\zeta - \zeta')} d\zeta', \zeta \leq b_2(0)\tau, \\ -R_1 v(\zeta - b_2(0)\tau, 0) e^{\frac{M_{33}(0,0)}{a_{11}(0,0)} \tau} + \int_0^{\tau} \tilde{t}_2^{(1)}(\zeta - b_2(0)(\tau - \tau'), \tau') e^{\frac{M_{33}(0,0)}{a_{11}(0,0)} (\tau - \tau')} d\tau', \tau \leq \frac{\zeta}{b_2(0)}. \end{cases}$$

Заметим, что функция $T_1 u$, $T_1 v$ являются, вообще говоря, негладкими на характеристике $x = \varepsilon b_2(0)t$, что препятствует дальнейшему процессу построения стандартных членов асимптотики.

III. Оценка остаточных членов

Обозначим частичные суммы асимптотических рядов первого порядка через U_1 , V_1 , W_1 соответственно. Имеет место следующее утверждение.

Теорема. Для решения задачи (1)–(2) $u(x, t, \varepsilon)$, $v(x, t, \varepsilon)$, $w(x, t, \varepsilon)$ справедливо равномерное в области $\bar{G} = (0 \leq x \leq X) \times (0 \leq t \leq T)$ асимптотическое представление

$$u(x, t, \varepsilon) = U_1 + O(\varepsilon^2), \quad v(x, t, \varepsilon) = V_1 + O(\varepsilon^2), \quad w(x, t, \varepsilon) = W_1 + O(\varepsilon^2).$$

Литература

1. Бутузов, В.Ф. О сингулярно возмущенной системе в частных производных первого порядка с разными степенями малого параметра / В.Ф. Бутузов, Е.А. Деркунова // Дифференциальные уравнения. – 2006. – Т. 42. – С. 775–790.
2. Васильева, А.Б. Асимптотические методы в теории сингулярных возмущений / А.Б. Васильева, В.Ф. Бутузов. – М.: Высшая школа, 1990. – 208 с.

Поступила в редакцию 2 сентября 2012 г.

ON SOME SINGULAR PERTURBED SYSTEM OF THREE EQUATIONS IN PARTIAL DERIVATIVES OF THE FIRST ORDER

E.A. Derkunova¹

The asymptotics of solution of a singular perturbed system consisting of three equations with partial derivatives of the first order is build and founded. The small parameter belongs to the system in such a way that non-uniformly scaled operators of the left parts of equations are formed. We use the boundary functions method asymptotics construction and so in particular reduce the system to standard initial problems with partial equations. When we proof the theorem on residual terms estimate we apply an already known scheme blending together a specific principle of maximum and including non-standard terms of the boundary layers part of asymptotics.

Keywords: singular perturbed problems, asymptotic, boundary functions method, differential equations with partial derivatives of the first order.

References

1. Butuzov V.F., Derkunova E.A. *Differentsial'nye uravneniia*. 2006. Vol. 42. pp. 775–790. (in Russ.).
2. Vasil'eva A.B., Butuzov V.F. *Asimptoticheskie metody v teorii singuliarnykh vozmushchenii* (Asymptotic methods in the theory of singular perturbations). Moscow: Vysshaya shkola, 1990. 208 p. (in Russ.).

¹ Derkunova Elena Anatol'evna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General Mathematics Department, South Ural State University.

E-mail: elena.derkunova@rambler.ru

ОБЛАСТЬ УСТОЙЧИВОСТИ В ПРОСТРАНСТВЕ ПАРАМЕТРОВ РЕКУРСИВНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ С ТОПОЛОГИЕЙ МНОГОМЕРНОГО КУБА¹

С.А. Иванов²

Получены критерии устойчивости дискретных нейронных сетей с топологией многомерного куба. Построены области устойчивости в пространстве параметров для таких сетей. Задача сводится к проблеме устойчивости матричных разностных уравнений высоких порядков с запаздыванием. Основным средством решения проблемы являются конусы устойчивости.

Ключевые слова: нейронные сети, разностные матричные уравнения, устойчивость разностных уравнений, многомерный куб.

Введение

Мы рассматриваем нейронные сети с топологией многомерного куба с одинаковыми запаздываниями во взаимодействии между нейронами в сети. Такие модели сетей используются при построении многопроцессорных вычислительных систем суперкомпьютеров [1].

Сеть с топологией n -мерного куба образуют нейроны с метками, являющимися n -мерными векторами компоненты, которых либо 0, либо 1. Два нейрона сети связаны тогда и только тогда, когда их метки отличаются только одной координатой. Связи для трехмерной сети изображены на рис. 1.

В результате линеаризации вокруг стационарного решения уравнений нейронной сети с топологией n -мерного куба получается линейное матричное разностное уравнение

$$x_s = \gamma I x_{s-1} + Q_n x_{s-k}, \quad s = 1, 2, \dots, \quad (1)$$

где x_s – вектор сигналов нейронов в момент s . Вектор x_s размерности 2^n характеризует отклонения сигналов нейронов от стационарных, I – единичная $2^n \times 2^n$ матрица, γ ($-1 < \gamma < 1$) – коэффициент затухания колебаний нейронов, Q_n – матрица размера $2^n \times 2^n$, характеризующая взаимодействия между нейронами в сети, k – запаздывание во взаимодействии между нейронами.

Уравнение (1) принадлежит классу матричных разностных уравнений вида:

$$x_s = A x_{s-1} + B x_{s-k}, \quad s = 1, 2, \dots, \quad (2)$$

которые обладают важным для нас свойством: матрицы A, B могут быть приведены к треугольному виду одним преобразованием. Поэтому мы имеем возможность применить метод конуса устойчивости [7] для устойчивости этих уравнений.

Пусть z_0 и z_1 – метки связанных между собой нейронов, и одна из координат z_0 равна 0, в то время как соответствующая координата метки z_1 равна 1. Обозначим силу воздействия нейрона с меткой z_0 на нейрон с меткой z_1 посредством a , а силу обратного воздействия посредством b . Тогда блочная $2^n \times 2^n$ матрица Q_n в (1) определяется рекуррентно равенствами:

$$Q_1 = \begin{pmatrix} 0 & b \\ a & 0 \end{pmatrix}, \quad Q_n = \begin{pmatrix} Q_{n-1} & bI \\ aI & Q_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

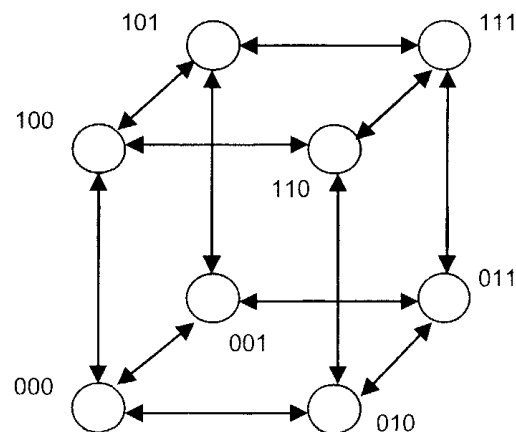


Рис. 1. Нейронная сеть с топологией трехмерного куба

¹ Работа поддержана грантом Министерства образования и науки 1.1711.2011 и грантом для аспирантов Челябинского государственного педагогического университета.

² Иванов Сергей Александрович – аспирант, кафедра математического анализа, Челябинский государственный педагогический университет.

E-mail: ivanovlord@yandex.ru

Мы ставим задачу изучить область устойчивости системы (1) в пространстве параметров γ, a, b, k при разных значениях n .

Конус устойчивости для диагностирования устойчивости нейронных сетей

В работах [7, 8] введены конусы устойчивости для диагностирования устойчивости систем вида (2) с матрицами A, B , одновременно приводимыми к треугольному виду. Аналогичные конусы устойчивости для дифференциальных уравнений введены в [9]. Для решения задачи устойчивости нейронных сетей с топологией связей n -мерного куба нам понадобится техника конусов устойчивости, которую мы здесь изложим.

Определение 1. Конусом устойчивости для уравнения вида (2) для данного k мы называем множество точек $M = (u_1, u_2, u_3) \in R^3$, такое что

$$u_1 + iu_2 = \exp(ik\omega) - h \exp(i(k-1)\omega), u_3 = h, \quad (4)$$

где параметры h, ω связаны соотношениями:

$$0 \leq h \leq \frac{\sin k\omega}{\sin(k-1)\omega}, -\frac{\pi}{k} \leq \omega \leq \frac{\pi}{k}. \quad (5)$$

Теорема 1 [7]. Пусть $A, B, S \in R^{2^n \times 2^n}$ и $S^{-1}AS = A_T, S^{-1}BS = B_T$, где A_T, B_T – треугольные матрицы с диагональными элементами λ_j, μ_j соответственно ($1 \leq j \leq 2^n$). Построим точки $M = (u_1, u_2, u_3) \in R^3$ ($1 \leq j \leq 2^n$) так, что

$$u_{1j} + iu_{2j} = \mu_j \exp(-ik \arg \lambda_j), u_{3j} = |\lambda_j|. \quad (6)$$

Тогда уравнение (2) асимптотически устойчиво, если и только если все точки M_j лежат внутри конуса устойчивости (4), (6) для данного k . Если некоторая точка M_j лежит вне конуса устойчивости, то уравнение (2) неустойчиво.

Теорема 1 сводит задачу диагностирования устойчивости системы (2) порядка $(2^n \times 2^n)$ к геометрической задаче в R^3 : асимптотическая устойчивость системы равносильна условию, что все точки M_j ($1 \leq j \leq 2^n$) лежат внутри конуса устойчивости (4), (6) для данного k .

Собственные значения матрицы Q_n

Теорема 2. Собственные числа μ_{nj} ($1 \leq j \leq 2^n$) матрицы Q_n удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$\mu_{n+1,j} = \begin{cases} \mu_{nj} + \sqrt{ab}, & \text{если } 1 \leq j \leq 2^n \\ \mu_{nj} - \sqrt{ab}, & \text{если } 2^n + 1 \leq j \leq 2^{n+1} \end{cases}, \quad (7)$$

где $\mu_{11} = \sqrt{ab}, \mu_{12} = -\sqrt{ab}$.

Доказательство. Очевидно, $\mu_{11} = \sqrt{ab}, \mu_{12} = -\sqrt{ab}$. Ввиду (3) характеристический многочлен $f_n(\mu)$ для (1) имеет вид

$$f_n(\mu) = \det((\mu I - Q_{n-1})^2 - abI). \quad (8)$$

Из (7), (8) следует

$$f_{n+1}(\mu) = \det((\mu I - Q_n)^2 - abI) = \det(Q_n - I(\mu - \sqrt{ab})) \det(Q_n - I(\mu + \sqrt{ab})).$$

Ввиду (9) уравнение $f_{n+1}(\mu) = 0$ распадается на два уравнения: $f_n(\mu - \sqrt{ab}) = 0$, $f_n(\mu + \sqrt{ab}) = 0$. Теорема 2 доказана.

Диагностирование устойчивости сети с топологией многомерного куба

Определение 2. Овалом устойчивости для уравнений вида (2), для запаздывания $k > 1$ и параметра γ мы называем кривую $M(\omega) = (u_1(\omega), u_2(\omega))$ такую, что

$$u_1(\omega) + iu_2(\omega) = \exp(ik\omega) - |\gamma| \exp(i(k-1)\omega),$$

где $\omega \in (-\omega_1, \omega_1)$, ω_1 – есть наименьший положительный корень уравнения

$$|\gamma| = \frac{\sin k\omega}{\sin(k-1)\omega}.$$

Овал устойчивости для данного запаздывания k и данного γ – это сечение конуса устойчивости (см. определение 1) плоскостью $u_3 = |\gamma|$. Овалы устойчивости при $0 \leq \gamma \leq 1$ рассматривала Е. Каслик [4]. Благодаря теоремам 1, 2 для диагностирования устойчивости уравнения (1) достаточно проверить одну точку $M(u_1, u_2) = u_1 + iu_2 = n\sqrt{ab}$. Поэтому имеют место следующие теоремы.

Теорема 3. Пусть даны произвольные $n, k \in \mathbb{Z}_+, k > 1$. Пусть $0 \leq \gamma \leq 1$. Построим в $\mathbb{R}^2$ овал устойчивости (см. определение 2) для данных k, γ . Построим точку $M = (u_1, u_2) \in \mathbb{R}^2$ так, что

$$u_1 + iu_2 = n\sqrt{ab}.$$

Если точка M лежит внутри овала устойчивости, то система (1) асимптотически устойчива. В противном случае система (1) неустойчива.

Теорема 4. Если $0 < ab < \left(\frac{|1-\gamma|}{n}\right)^2$ или $0 > ab > -\left(\frac{F(\gamma)}{n}\right)^2$, то система (1) асимптотически устойчива. Здесь $F(\gamma) = \frac{\sin \omega(\gamma)}{\cos(k-1)\omega(\gamma)}$,

где $\omega(\gamma)$ есть наименьший неотрицательный корень уравнения

$$|\gamma| = \frac{\sin k\omega}{\cos(k-1)\omega}.$$

Если число ab находится вне границ указанных интервалов, то система (1) неустойчива.

Области устойчивости системы (1) отражены на рис. 2.

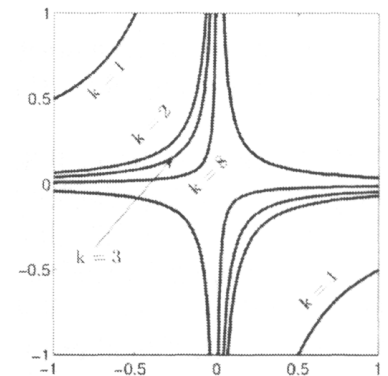


Рис. 2. Область устойчивости системы (1) в плоскости (a, b) при фиксированных $\gamma = 0,4, n = 3$ и переменном запаздывании k

Литература

1. Gonzalez, A. Executing algorithms with hypercube topology on torus multicomputers / A. Gonzalez, M. Valero-Garcia, L. Diaz de Cerio // IEEE Transactions on parallel and distributed systems – 1995. – V. 6, № 8 – P. 803–814.
2. Yuan, Y. Stability and synchronization ring of identical cells with delayed coupling / Y. Yuan, S.A. Campbell // J. of Dynamics and Differential Equations. – 2004. – V. 16. – P. 709–744.
3. Kaslik, E. Dynamics of a discrete-time bidirectional ring of neurons with delay / E. Kaslik // Proceedings of Int. Joint Conf. on neural networks, Atlanta, Georgia, USA, June 14–19. – IEEE Computer society press, 2009. – P. 1539–1546.
4. Kaslik, E. Stability results for a class of difference systems with delay / E. Kaslik // Advances in Difference Equations. – 2009. – P. 1–13. article ID 938492.
5. Botelho, F. Global analysis of planar networks / F. Botelho, V. Gaiko // Nonlinear Analysis. – 2006. – Vol. 64. – Issue 5. – P. 1002–1011.
6. Kokhlova, T.N. Stability of a ring and linear neural networks with a large number of neurons / T.N. Kokhlova, M.M. Kipnis // Applied Mathematics and Computation. – 2012. – P. 1–14.
7. Ivanov, S.A. The stability cone for a difference matrix equation with two delays / S.A. Ivanov, M.M. Kipnis, V.V. Malygina // ISRN J. Applied Mathematics. – 2011. – P. 1–19. article ID 910936.
8. Kipnis, M.M. The stability cone for a matrix delay difference equation / M.M. Kipnis, V.V. Malygina // International J. of Mathematics and Mathematical Sciences. – 2011. – P. 1–15. article ID 860326.
9. Kokhlova, T.N. The stability cone for a delay differential matrix equation / T.N. Khokhlova, M.M. Kipnis, V.V. Malygina // Applied Math. Lett. – 2011 – V. 24 – P. 742–745.

Поступила в редакцию 7 мая 2012 г.

THE STABILITY DOMAIN IN THE PARAMETERS SPACE OF RECURSIVE NEURAL NETWORKS WITH HYPERCUBE TOPOLOGY

S.A. Ivanov¹

The stability conditions are described for the discrete neural networks. The stability domains in the parameters space are constructed. The problem is reduced to the stability problem of finite-difference matrix equations of higher order with delay. The main method to solve the problem is the stability cone.

Keywords: neural networks, finite-difference matrix equations, finite-difference equations stability, hypercube.

References

1. Gonzalez A., Valero-Garcia M., Diaz de Cerio L. Executing algorithms with hypercube topology on torus multicomputers. *IEEE Transactions on parallel and distributed systems*. 1995. Vol. 6, no. 8. pp. 803–814.
2. Yuan Y., Campbell S.A. Stability and synchronization ring of identical cells with delayed coupling. *J. of Dynamics and Differential Equations*. 2004. Vol. 16. pp. 709–744.
3. Kaslik E. Dynamics of a discrete-time bidirectional ring of neurons with delay. *Proceedings of Int. Joint Conf. on neural networks, Atlanta, Georgia, USA, June 14–19*. IEEE Computer society press, 2009. pp. 1539–1546.
4. Kaslik E. Stability results for a class of difference systems with delay. *Advances in Difference Equations*. 2009. pp. 1–13. Article ID 938492.
5. Botelho F., Gaiko V. Global analysis of planar networks. *Nonlinear Analysis*. 2006. Vol. 64, Issue 5. pp. 1002–1011.
6. Kokhlova T.N., Kipnis M.M. Stability of a ring and linear neural networks with a large number of neurons. *Applied Mathematics and Computation*. 2012. pp. 1–14.
7. Ivanov S.A., Kipnis M.M., Malygina V.V. The stability cone for a difference matrix equation with two delays. *ISRN J. Applied Mathematics*. 2011. pp. 1–19. Article ID 910936.
8. Kipnis M.M., Malygina V.V. The stability cone for a matrix delay difference equation. *International J. of Mathematics and Mathematical Sciences*. 2011. pp. 1–15. Article ID 860326.
9. Khokhlova T.N., Kipnis M.M., Malygina V.V. The stability cone for a delay differential matrix equation. *Applied Math. Lett.* 2011. Vol. 24. pp. 742–745.

¹ Ivanov Sergey Alexandrovich is Post-graduate Student, Mathematical Analysis Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.
E-mail: ivanovlord@yandex.ru

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СОЛИТОННОЙ ПАРЫ В ФОТОРЕФРАКТИВНОЙ СРЕДЕ ПРИ СИНХРОННОЙ МОДУЛЯЦИИ ИНТЕНСИВНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ

Н.Д. Кундикова¹, И.В. Новиков²

Исследовано взаимодействие экранированных когерентных солитонных пучков в знакопеременном поле, синхронизированном по фазе с интенсивностью излучения. Экспериментально и численно показано, что увеличение нелокального отклика фоторефрактивной среды с достаточной подвижностью фотозарядов приводит к увеличению эффективности энергообмена между пучками.

Ключевые слова: фоторефрактивный кристалл, пространственный солитон, самофокусировка, перекачка энергии.

Исследованию фоторефрактивных солитонов в настоящее время уделяется большое внимание [1]. Это связано как с особенностями фоторефрактивных сред (для реализации нелинейных эффектов не требуются большие значения интенсивностей), так и особенностями солитонов (возможность формировать индуцированный волноводный режим). Фоторефрактивные солитоны используются в управляемых устройствах сопряжения оптических линий связи, устройствах оптической памяти, оптических переключателях [2] и для формирования волноводов с управляемой структурой [3]. Способы управления волноводным режимом или несколькими волноводами зависят от механизма формирования фоторефрактивного нелинейного отклика. Для увеличения отклика обычно используют знакопеременное или постоянное внешние электрические поля [3]. При использовании внешнего знакопеременного электрического поля, синхронизированного по фазе с глубиной модуляции интенсивности излучения, отклик среды заметно увеличивается [4, 5] и существует простая возможность его регулирования. Цель настоящей работы – исследование возможности регулирования взаимодействия пространственных солитонов варьированием нелинейного отклика среды во внешнем знакопеременном электрическом поле, синхронизированном по фазе с глубиной модуляции интенсивности излучения.

В работе [4] теоретически описан механизм пространственной фазовой самомодуляции света в фоторефрактивном кристалле с группой симметрии $mm2$ с приложенным знакопеременным меандровым электрическим полем $E(x,t) = E_0(x,t)\text{sign}(\cos(\omega t))$ при синхронной модуляции интенсивности излучения $I(x,t) = I_0(x,t)(1 + \text{sign}(\cos(\omega t)))$. Механизм формирования отклика был качественно рассмотрен в работе [5]. Выражение для поля пространственного заряда согласно работе [4] в одномерной модели можно представить в линейном приближении в виде двух слагаемых:

$$E_{sc} = E_{loc} + E_{noloc} = -E \frac{mI}{I + I_d} - \frac{E \cdot L_c}{I + I_d} \frac{dI}{dx}, \quad (1)$$

где E – внешнее поле, направленное по оси x , параллельное оптической оси кристалла, m – глубина модуляции интенсивности луча, $m = (I_{\max} - I_{\min}) / (I_{\max} + I_{\min})$, где $I_{\max}$ и $I_{\min}$ – максимальная и минимальная интенсивности излучения, I и I_d – интенсивность пучка и темновая освещённость, $L_c = \mu\tau_r E$ – дрейфовая длина электрона, $\mu\tau_r$ – произведение подвижности электрона на время рекомбинации носителей заряда, ω – частота внешнего поля.

Первое слагаемое E_{loc} в выражении (1) является локальной компонентой нелинейного отклика, которая может приводить к изменению эффективности самофокусировки луча [6]. Второе

¹ Кундикова Наталья Дмитриевна – доктор физико-математических наук, профессор, декан физического факультета, отдел нелинейной оптики Института электрофизики РАН, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: knd@usu.ac.ru

² Новиков Игорь Владимирович – ассистент, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет.

слагаемое E_{noloc} является нелокальной компонентой, которая может приводить к самоискривлению пучка [4] и энергообмену между взаимодействующими пучками. Величину нелокального отклика среды согласно выражению (1) ($E_{noloc} \sim \mu\tau, E \sim E^2$) можно регулировать варьированием амплитуды внешнего поля E , а величину локального отклика ($E_{loc} \sim Em$) – варьированием амплитуды внешнего поля E и глубины модуляции интенсивности излучения m . Это даёт простую возможность варьирования нелинейными откликами фоторефрактивной среды.

Экспериментальные исследования проводились в кристалле ниобага-бария-натрия $Ba_2NaNb_5O_{15}$ (BNN). Впервые фоторефрактивный эффект в кристаллах BNN с приложенным знакопеременным электрическим полем при синхронной модуляции интенсивности излучения наблюдался в работе [7]. Влияние нелокального отклика фоторефрактивной среды на формирование солитонного режима исследовалось в работе [6]. В работе [6] экспериментально показано, что солитонный режим формируется при одинаковых значениях локального отклика $E_{loc} \sim Em = 6,5$ кВ/см. Кристалл был вырезан по орторомбическим осям $a \times b \times c = 6 \times 3,5 \times 3$ мм³, величина $\mu\tau_i \approx 10^{-13}$ м²/В. Два когерентных пучка с примерно одинаковыми интенсивностями и радиусами $r_0 = 19$ мкм и 20 мкм сводились под углом $\beta = 2,7^\circ$ в кристалле, а расстояние между их центрами на входной грани кристалла составляло $d = 60$ мкм.

Экспериментально определялась степень энергообмена солитонных пучков $\gamma = I_1 / (I_2 + I_1)$ при различных значениях внешнего поля E и глубины модуляции интенсивности излучения m , где I_1 – интегральная интенсивность усиливающегося пучка, а I_2 – интегральная интенсивность пучка, теряющего энергию. Величина внешнего поля E варьировалась от 6,5 кВ/см до 9,5 кВ/см с шагом 1,5 кВ/см, а глубина модуляции m изменялась в пределах от 0,68 до 1 таким образом, что всегда выполнялось условие формирования солитонного режима: $Em = \text{const} = 6,5$ кВ/см [6].

На рисунке приведена экспериментальная зависимость степени энергообмена солитонных пучков от величины внешнего поля E , необходимого для формирования солитонного режима.

Из рисунка следует, что при увеличении внешнего поля E , а значит, и нелокального отклика кристалла ($E_{noloc} \sim E^2$), необходимого для формирования солитонного режима, происходит увеличение эффективности энергообмена между пучками. Зависимость степени энергообмена от величины внешнего поля E носит монотонно возрастающий линейный характер.

Численное моделирование взаимодействия когерентных самофокусирующихся и солитонных пучков проводилось на основе методики, рассмотренной в работе [4]. Использовались следующие значения, характеризующие фоторефрактивный кристалл и огибающую $u(x)$ для солитонного пучка, $\beta = 2,7^\circ$ ($\alpha = 6^\circ$ в вакууме), $d = 60$ мкм, $r_0 = 20$ мкм, $\mu\tau_i = 10^{-13}$ м²/В,

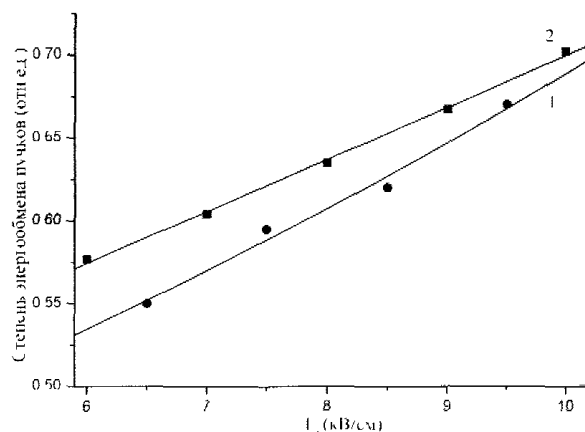
$I_d = 0,001$, $n_0 = 2,221$, $\lambda = 633$ нм, $\varphi = 0$, $r_{eff} = 48 \cdot 10^{-12}$ м/В, $mE_s = 6$ кВ/см. Комплексная амплитуда огибающей двух солитонных пучков на входе в кристалл имела вид

$$A(x, 0) = (u_1(x + d)e^{-ik \sin(\alpha/2)x} + u_2(x - d)e^{ik \sin(\alpha/2)x + i\varphi})\sqrt{I_d}. \quad (2)$$

Огибающая солитонного пучка определялась из следующего уравнения методом Адамса:

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} - u + \delta \frac{u^3}{1 + u^2} = 0, \quad (3)$$

где δ – нелинейный коэффициент, а $\xi \sim x$.



Зависимость степени энергообмена пучков от величины внешнего поля E_s при формировании солитонного режима: 1 – экспериментальные значения; 2 – результаты численного моделирования. Сплошные линии – аппроксимация линейной зависимостью

Укороченное параксиальное уравнение с входными условиями для огибающей двух солитонных пучков решалось разностно-сеточным методом Дугласа [12]. Было установлено, что неупругое взаимодействие пучков может формироваться только при $\mu\tau_r \approx 10^{13} - 10^{14} \text{ м}^2/\text{В}$. Это соответствует значениям в экспериментально исследуемом кристалле.

На рисунке приведена зависимость степени энергообмена от величины внешнего поля при формировании солитонного режима, полученная численным моделированием. Из рисунка видно, что зависимость имеет линейный характер. Экспериментальные и численные результаты хорошо согласуются друг с другом.

Таким образом, в настоящей работе экспериментально и на основе численного моделирования доказано, что увеличение нелокального отклика фоторефрактивной среды приводит к увеличению эффективности энергообмена между когерентными солитонными пучками.

Литература

1. Abbasi, Z. Incoherent interaction between bright–bright photovoltaic soliton in an unbiased series two-photon photorefractive crystal circuit / Z. Abbasi, M. Hatami, A. Keshavarz // Optics and Laser Technology. – 2012. – Vol. 44, № 8. – P. 2413–2417.
2. Chen, Z. Observation of incoherently coupled photorefractive spatial soliton pairs / Z. Chen, M. Mitchell, M. Segev // Optics Letters. – 1996. – Vol. 21, № 18. – P. 1436–1438.
3. Frejlich, J. Photorefractive materials. Fundamental concepts. Holographic, Recording and Materials / J. Frejlich. – WILEY, 2007. – 309 p.
4. Фролова, М.Н. Самовоздействие светового пучка в фоторефрактивном кристалле с приложенным знакопеременным электрическим полем при синхронной модуляции интенсивности / М.Н. Фролова, С.М. Шандаров, М.В. Бородин // Квантовая электроника. – 2002. – Т. 32, № 1. – С. 45–48.
5. Пространственная фазовая самомодуляция света в фоторефрактивном кристалле во внешнем поле / Б.Я. Зельдович, Н.Г. Катаевский, Н.Д. Кундикова, И.И. Наумова // Квантовая электроника. – 1995. – Т. 22, № 11. – С. 1161–1162.
6. Ассельборн, С.А. Роль локального отклика фоторефрактивной среды в формировании пространственного экранированного солитона / С.А. Ассельборн, Н.Д. Кундикова, И.В. Новиков // Квантовая электроника. – 2008. – Т. 38, № 9. – С. 859–861.
7. Ассельборн, С.А. Экспериментальное исследование самовоздействия светового пучка в фоторефрактивном кристалле во внешнем знакопеременном электрическом поле / С.А. Ассельборн, Н.Д. Кундикова, И.В. Новиков // Письма в ЖТФ. – 2008. – Т. 34, № 4. – С. 50–57.

Поступила в редакцию 6 сентября 2012 г.

SOLITON PAIR INTERACTION IN A PHOTOREFRACTIVE MEDIUM AT SYNCHRONOUS MODULATION OF LIGHT INTENSITY

N.D. Kundikova¹, I.V. Novikov²

The interaction of shielded coherent soliton beams in an alternating field, phase-locked to the intensity of the light, is analyzed. It is experimentally and numerically shown that the increase of non-local response of a photorefractive medium with the sufficient mobility of photoinduced charges increases the efficiency of energy transfer between the beams.

Keywords: photorefractive crystal, spatial soliton, self-focusing, the energy transfer.

References

1. Abbasi Z., Hatami M., Keshavarz A. Incoherent interaction between bright–bright photovoltaic soliton in an unbiased series two-photon photorefractive crystal circuit. *Optics and Laser Technology*. 2012. Vol. 44, no. 8. pp. 2413–2417.
2. Chen Z., Mitchell M., Segev M. Observation of incoherently coupled photorefractive spatial soliton pairs. *Optics Letters*. 1996. Vol. 21, no. 18. pp. 1436–1438.
3. Frejlich J. *Photorefractive materials. Fundamental concepts. Holographic, Recording and Materials*. Wiley, 2007. 309 p.
4. Frolova M.N., Shandarov S.M., Borodin M.V. Self-action of a light beam in a photorefractive crystal in an alternating electric field upon synchronous intensity modulation. *Quantum electron*. 2002. Vol.32, no. 1. pp. 45–48. DOI: 10.1070/QE2002v032n01ABEH002124.
5. Zel'dovich B.Ya., Kataevskii N.G., Kundikova N. D., Naumova I.I., Spatial self-phase-modulation of light in a photorefractive crystal subjected to an external alternating field. *Quantum electron*. 1995. Vol. 25, no. 11. pp. 1125–1126. DOI: 10.1070/QE1995v025n11ABEH000547.
6. Assel'born S. A., Kundikova N.D., Novikov I.V. Role of the local response of a photorefractive medium in the formation of a spatial screened soliton. *Quantum electron*. 2008. Vol. 38, no. 9. pp. 859–861. DOI: 10.1070/QE2008v038n09ABEH013734.
7. Assel'born S.A., Kundikova N.D., Novikov I.V. *Pis'ma v ZhTF*. 2008. Vol. 34, no. 4. pp. 50–57. (in Russ.).

¹ Kundikova Nataliya Dmitrievna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Dean of Physics Faculty, Joint Nonlinear Optics Laboratory of IEF RAS, Optics and Spectroscopy Department, South Ural State University.

E-mail: knd@susu.ac.ru

² Novikov Igor Vladimirovich is Assistant, General and Experimental Physics Department, South Ural State University.

ПОВЕДЕНИЕ ПОЛИНОМОВ ГРОНУОЛЛА НА ГРАНИЦЕ ОБЛАСТИ СУММИРУЕМОСТИ

Л.В. Матвеева¹

Линейные методы суммирования позволяют аналитически продолжать функцию вне области сходимости степенного ряда. Для практики полезно знать оценку скорости сходимости полученной последовательности полиномов Гронуолла. В настоящей работе оценивается скорость сходимости на границе области суммирования.

Ключевые слова: методы суммирования, полиномы Гронуолла, скорость сходимости.

Пусть однозначная функция $f(z)$ аналитична в некоторой окрестности начала координат. Тогда функция $f(z)$ раскладывается в степенной ряд $\sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$. Обозначим n -ую частичную сумму этого ряда через $s_m^f = \sum_{k=0}^m a_k z^k$, через S_f – множество особых точек функции $f(z)$ и через A_f – максимальную область, в которую продолжается $f(z)$. Частичную сумму ряда функции $\frac{1}{1-z}$ обозначим через $\sigma_n(z)$.

Определение. Линейный метод B , определяемый бесконечной матрицей $(b_{m,n})$, суммирует ряд $\sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$ к $f(z)$ равномерно внутри области $D \subset \mathbb{C}$, если существует такой номер m_0 , что для любого компакта $Q \subset D$ и для всех $m \geq m_0$ ряды $\sum_{k=0}^{\infty} b_{m,k} s_k^f(z)$ равномерно сходятся к функции $f(z)$ на Q .

Определение. Область $U \subset A_f$ назовем C -областью функции $f(z)$, аналитичной в некоторой окрестности начала координат, если существует линейный метод, суммирующий последовательность $\{s_m^f(z)\}$ к $f(z)$ равномерно внутри U .

Естественно рассматривать такие линейные методы, максимальные C -области которых включают в себя круг сходимости степенного ряда $\sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$.

В работе [1] показано, что если метод $(b_{m,n})$ суммирует $\sum_{k=0}^{\infty} z^k$ к $1/(1-z)$ в некоторой области D , то можно описать область D_f , в которой этот метод будет суммировать $\sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$ к $f(z)$. Поэтому изучение C -областей метода суммирования достаточно провести для геометрического ряда $\sum_{k=0}^{\infty} z^k$.

Гронуолл в работе [4] описал широкий класс методов суммирования расходящихся рядов. Метод Гронуолла $[F(w); 1/(1-w)]$ задается отображающей функцией $F(w) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k w^k$ ($c_1 \neq 0$) и весовой функцией $1/(1-w)$, и элементы его матрицы определяются по формулам

$$c_{m,n}^F = \frac{1}{2\pi} \oint \frac{(1-F(w))F^n(w)}{(1-w)w^{m+1}} dw \quad (m, n \geq 0),$$

где интегрирование ведется по γ – простому достаточно малому контуру вокруг начала координат. На отображающую функцию $F(w)$ в работе [1] накладываются три условия: 1) $F(w)$ аналитична в некоторой окрестности начала координат, 2) $F(w) \neq 1/(1-w)$ в этой окрестности, 3) $F(w) \neq 1/(1-w)$ на границе области суммируемости.

¹ Матвеева Любовь Васильевна – кандидат физико-математических наук, профессор, кафедра математического анализа, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: lvmatveeva@gmail.com

тична в замкнутом единичном круге $\bar{K}$, исключая, может быть, точку $w=1$, и однолистка в K ; 2) $F(w)$ непрерывна в $\bar{K}$, $F(0)=0$, $F(1)=1$, $F(K) \subseteq K$; 3) ряд Тейлора $F(w)$ абсолютно сходится при $w=1$.

Определение. Полином $P_m^F(z) = \sum_{n=0}^m c_{m,n}^F \left(\sum_{k=0}^n z^k \right)$ будем называть m -м полиномом Гронуолла метода $[F(w); 1/(1-w)]$.

Из условия $F(0)=0$ следует, что $c_{m,n}^F=0$ при $n>m$, поэтому степень m -го полинома Гронуолла не превосходит m . Область $T(F)$, ограниченную кусочно-гладкой кривой $\tau(F) = \{z: z = [F(e^{i\alpha})]^{-1}, \alpha \in [0; 2\pi]\}$ назовем областью суммируемости метода $[F(w); 1/(1-w)]$.

Как доказано в работах [2] и [3] метод $[F(w); 1/(1-w)]$ суммирует ряд $\sum_{k=0}^{\infty} z^k$ к $1/(1-z)$ в области

$T(F)$. Вне этой области последовательность $P_m^F(z)$ расходится. Условие $F(K) \subseteq K$ означает, что область суммируемости метода $[F(w); 1/(1-w)]$ включает область сходимости степенного ряда $\sum_{k=0}^{\infty} z^k$.

В работе [2] рассматривается скорость сходимости полиномов Гронуолла в случае аналитической отображающей функции внутри области $T(F)$.

Легко видеть, что последовательность $P_m^F(z)$ не обязана сходиться к $1/(1-z)$ на границе области $T(F)$. Для $F(w)=w$, например, последовательность $P_m^w(z) = \frac{1-z^m}{1-z}$ не сходится к $\frac{1}{1-z}$ ни для какого z , лежащего на границе области $T(F)$, равной единичному кругу. Тем не менее последовательность $\{P_m^w(z)\}$ ограничена для каждого $z \neq 1$. Аналогичный факт имеет место и в общем случае.

Теорема. Если отображающая функция $F(w)$ имеет ограниченное изменение на единичной окружности и ее производная не равна 0 на единичной окружности, то для каждого $z \in \tau(F) \setminus \{1\}$ последовательность $\{P_m^F(z)\}$ ограничена.

Доказательство. В работе [1] показано, что

$$P_m^F = \frac{1}{1-z} - \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{(1-F(w))dw}{(1-zF(w))(1-w)w^{m+1}}.$$

Поэтому достаточно для оценки полинома $P_m^F(z)$ оценить интеграл

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{(1-F(w))dw}{(1-zF(w))(1-w)w^{m+1}},$$

т.е. коэффициент при w^m в разложении в степенной ряд функции $\frac{1-F(w)}{(1-zF(w))(1-w)}$. Так как $z \in \tau(F) \setminus \{1\}$, то $z = 1/F(w_0)$ для некоторого $w_0 = e^{i\alpha_0}$, где $\alpha_0 \in (0; 2\pi)$. Рассмотрим функцию

$$\varphi(w) = \begin{cases} \frac{(1-F(w))(w_0-w)}{1-zF(w)}, & \text{если } w \neq w_0, \\ \frac{(1-F(w))F(w_0)}{F'(w_0)}, & \text{если } w = w_0. \end{cases}$$

Докажем, что степенной ряд функции $\varphi(w)$ абсолютно сходится при $w=1$. Выберем такое число $\beta > 0$, что $\alpha_0 \in (\beta, 2\pi - \beta)$. Так как функция $F(w)$ имеет ограниченное изменение на единичной окружности, то и $\operatorname{Re}(\varphi(e^{i\alpha}))$, и $\operatorname{Im}(\varphi(e^{i\alpha}))$ также имеют ограниченное изменение на отрезках $[0, \beta]$ и $[2\pi - \beta, 2\pi]$ как дробно-рациональные функции от функций с ограниченным из-

менением. Так как $(1 - zF(w))'_{w=w_0} = -zF'(w_0) \neq 0$, то функция $\frac{1-F(w)}{1-zF(w)}$ имеет в w_0 простой полюс, и функция $\varphi(w)$ аналитична в w_0 . Отсюда вытекает, что $\operatorname{Re}(\varphi(e^{i\alpha}))$ и $\operatorname{Im}(\varphi(e^{i\alpha}))$ имеют ограниченное изменение на отрезке $[\beta, 2\pi - \beta]$. Следовательно, $\operatorname{Re}(\varphi(e^{i\alpha}))$ и $\operatorname{Im}(\varphi(e^{i\alpha}))$ имеют ограниченное изменение на всем отрезке $[0, 2\pi]$ и по теореме Харди–Литтлвуда степенной ряд $\varphi(w)$ абсолютно сходится при $w=1$. Представим функцию $\frac{1-F(w)}{(1-zF(w))(1-w)}$ в виде произведения $\varphi(w)$ на $\frac{1}{(w_0-w)(1-w)}$. Перемножим степенные ряды $\frac{1}{(w_0-w)} = \frac{1}{w_0} \sum_{k=0}^{\infty} w_0^k w^k$ и $\frac{1}{1-w} = \sum_{n=0}^{\infty} w^n$:

$$\frac{1}{(w_0-w)(1-w)} = \frac{1}{w_0} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^n \frac{1}{w_0^k} \right) w^n = \frac{1}{w_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1 - \frac{1}{w_0^{n+1}}}{1 - \frac{1}{w_0}} w^n.$$

Перемножим степенные ряды

$$\varphi(w) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n w^n \text{ и } \frac{1}{(w_0-w)(1-w)} = \frac{1}{w_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1 - \frac{1}{w_0^{n+1}}}{1 - \frac{1}{w_0}} w^n.$$

Получим

$$\frac{\varphi(w)}{(w_0-w)(1-w)} = \frac{1}{w_0-1} \sum_{m=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^m b_k - \sum_{k=0}^m \frac{b_k}{w_0^{m+1-k}} \right) w^m.$$

Обозначим $\sum_{k=0}^{\infty} |b_k| = C$. Тогда

$$\left| \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{(1-F(w))dw}{(1-zF(w))(1-w)w^{m+1}} \right| = \left| \frac{1}{w_0-1} \left(\sum_{k=0}^m b_k - \sum_{k=0}^m \frac{b_k}{w_0^{m+1-k}} \right) \right| \leq \frac{2C}{|w_0-1|}.$$

Таким образом, $|P_m^F(z)| \leq \left| \frac{1}{1-z} \right| + \left| \frac{z}{1-z} \right| \frac{2C}{|w_0-1|}$. И правая часть выражения не зависит от m . Теорема доказана.

Литература

1. Матвеева, Л.В. Оценка скорости сходимости последовательности полиномов Гронуолла / Л.В. Матвеева // Исслед. по функцион. анализу: сб. науч. тр. – Свердловск: Ур. гос. ун-т. – 1978. – С. 49–64.
2. Матвеева, Л.В. Полиномы Гронуолла с аналитической отображающей функцией / Л.В. Матвеева // Наука ЮУрГУ: сб. науч. тр. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ. – 2009. – Т. 2. – С. 153–156.
3. Матвеева Л.В. Области равномерной сходимости и теорема Окада / Л.В. Матвеева // Наука ЮУрГУ: сб. науч. тр. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ. – 2011. – Т. 3. – С. 149–152.
4. Gronwall, T.H., Summation of series and conformal mapping / T.H. Gronwall // Ann. Math. – 1932. – Т. 33, № 2. – P. 101–117.
5. Birindelli, C. Contributo all'analisi dei metodi di sommazione di Gronwall / C. Birindelli // Rend. del Circolo Matematico di Palermo. – 1937. – V. 61. – P. 157–176.

Поступила в редакцию 2 октября 2012 г.

BEHAVIOR OF GRONWALL POLYNOMIALS ON THE BOUNDARY OF SUMMABILITY DOMAIN

L.V. Matveeva¹

Linear summation methods can analytically continue the function outside the region of convergence of the power series. To practice is useful to know the rate of convergence obtained sequence of polynomials Gronwall. In this paper we estimated the rate of convergence on the boundary of the summation.

References

1. Matveeva L.V. *Issled. po funktsion. analizu: sb. nauch. tr.* Sverdlovsk: Ur. gos. un-t. 1978. pp. 49–64. (in Russ.).
2. Matveeva L.V. *Nauka YuUrGU: sb. nauch. tr.* Cheliabinsk: Izdatel'stvo YuUrGU. 2009. Vol. 2. pp. 153–156. (in Russ.).
3. Matveeva L.V. *Nauka YuUrGU: sb. nauch. tr.* Cheliabinsk: Izdatel'stvo YuUrGU. 2011. Vol. 3. pp. 149–152. (in Russ.).
4. Gronwall T.H. Summation of series and conformal mapping. *Ann. Math.* 1932. Vol. 33, no. 2. pp. 101–117.
5. Birindelli C. Contributo all' analisi dei metodi di sommazione di Gronwall. *Rendic. del Circolo Matemat. de Palermo.* 1937. Vol. 61. pp. 157–176.

¹ Matveeva Liubov Vasilievna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Mathematical Analysis Department, South Ural State University.

E-mail: lvmatveeva@gmail.com

ФАЗООБРАЗОВАНИЕ В СИСТЕМЕ $\text{FeSO}_4 - \text{KOH} - \text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}_2$ В.Ш. Мирасов¹, И.В. Кривцов², Д.А. Жеребцов³, Д.Г. Клещев⁴, Ю.И. Рябков⁵

Изучены закономерности фазообразования при окислении водных растворов FeSO_4 и (или) суспензий $\text{Fe}(\text{OH})_2$ при квазипостоянных значениях температуры и pH. Полученные нанодисперсные материалы исследованы методами рентгенофазового и рентгенофлуоресцентного анализов, ИК-спектроскопии, растровой электронной микроскопии, термогравиметрии и масс-спектрометрии. Выявлены зависимости фазового и дисперсного составов образующихся продуктов от параметров синтеза.

Ключевые слова: фазообразование, нанодисперсные, оксидгидроксиды железа(III).

Введение

При окислении растворов солей железа(II) и (или) суспензий гидроксида железа(II) формируются труднорастворимые нанодисперсные соединения железа(III), обладающие уникальными ионообменными, сорбционными, магнитными, каталитическими и др. свойствами [1–3]. Известно [4–7], что фазовый и дисперсный состав образующихся соединений железа(III) зависит от многочисленных параметров синтеза: температуры и pH реакционной среды, концентрации ионов железа(II) в растворе или $\text{Fe}(\text{OH})_2$ в суспензии, природы аниона соли и катиона щелочного агента, скорости подачи окислителя и его активности и т.д.

Целью работы являлось уточнение закономерностей фазообразования при окислении водных растворов FeSO_4 и (или) суспензий $\text{Fe}(\text{OH})_2$ при квазипостоянных значениях температуры, суммарной концентрации железа(II) в растворе (суспензии), pH реакционной среды и скорости окисления с использованием в качестве щелочного и окисляющего агентов водных растворов KOH и H_2O_2 соответственно (в дальнейшем, система $\text{FeSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - \text{KOH} - \text{H}_2\text{O}_2$).

Экспериментальная часть и обсуждение результатов

При синтезе использовали следующие реагенты квалификации «хч» в виде растворов в дистиллированной воде: 1,1 М раствор FeSO_4 , предварительно восстановленный железным порошком; растворы 3,8 М KOH и 0,9 М H_2O_2 . Окисление проводили в реакторе объемом 0,5 дм³, снабженном перемешивающим устройством, системами электронагрева и термостатирования, дозирования в непрерывном режиме растворов KOH и H_2O_2 и измерения pH среды.

Во всех опытах поддерживали постоянными среднюю скорость окисления ионов железа(II) – 15 ± 1 ммоль/(дм³·мин) и суммарную концентрацию Fe(II) и Fe(III) в окисленной суспензии – $0,51 \pm 0,02$ моль/дм³, а варьировали температуру t и величину pH, при которых проводились эксперименты. Опыты проводили в следующей последовательности. В реактор заливали расчетное количество раствора FeSO_4 , нагревали до заданной температуры t (20, 40, 60, или 85 °С) и подачей раствора KOH достигали необходимого значения pH реакционной среды (4,0; 5,5; 6,5; 8,5; 10,5 или 13,0). После этого в реактор начинали с постоянной скоростью дозировать раствор H_2O_2 , а в интервале значений $4,0 \leq \text{pH} < 9,0$ для поддержания квазипостоянного значения pH ($\pm 0,25$ ед.) и раствор KOH. По окончании процесса окисления осадок отделяли на воронке Бюхнера от маточного раствора, отмывали водой до отсутствия в фильтрате сульфат-ионов, высушивали до постоянной массы при ~ 50 °С и измельчали.

Все полученные образцы исследовали методом рентгенофазового анализа (РФА; рентгеновский аппарат ДРОН-3М; фильтрованное $\text{CoK}\alpha$ -излучение; использовали электронную базу данных порошковой дифрактометрии ICSD). Средний размер кристаллов осадка d рассчитывали по фор-

¹ Мирасов Вадим Шафикович – аспирант, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: mirasov@gmail.com

² Кривцов Игорь Владимирович – кандидат химических наук, кафедра экологии и природопользования, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: zapasoul@gmail.com

³ Жеребцов Дмитрий Анатольевич – кандидат химических наук, доцент, кафедра физической химии, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: zherebtsov_da@yahoo.com

⁴ Клещев Дмитрий Георгиевич – доктор химических наук, профессор, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: dgk@susu.ac.ru

⁵ Рябков Юрий Иванович – доктор химических наук, профессор, Институт химии Коми Научного центра УрО РАН. E-mail: ryab2007@rambler.ru

муле Селякова–Шерера по величине физического уширения рефлексов. Образцы, полученные при фиксированных значениях температуры $t = 40\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($4,0 \leq \text{pH} \leq 13,0$) и $\text{pH} = 6,5$ ($20\text{ }^{\circ}\text{C} \leq t \leq 85\text{ }^{\circ}\text{C}$), исследовали также на элементный (метод рентгенофлуоресцентного спектрального анализа – РСА) и дисперсный (метод растровой электронной микроскопии – РЭМ) составы на растровом электронном микроскопе JEOL JSM-7001F с энергодисперсионным спектрометром Oxford INCA X-max 80, а также методами термогравиметрии и масс-спектропии (синхронный анализатор Netzsch STA 449C Jupiter, совмещённый с масс-спектрометром Netzsch QMS 403C Acolos) и ИК-спектропии (Фурье ИК-спектрометр Bruker Tensor-27).

По данным РФА в исследуемой системе в зависимости от температуры и pH могут образовываться следующие нанодисперсные фазы: $\alpha\text{-FeOOH}$ – формируется во всем исследованном интервале pH; $\gamma\text{-FeOOH}$ – при $5,5 \leq \text{pH} < 9,0$; $\delta\text{-FeOOH}$ – при $\text{pH} \geq 10,5$; $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ – в интервале pH 5,5 – 13,0. При этом с ростом температуры для $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ и $\alpha\text{-FeOOH}$ наблюдается расширение, а для γ - и $\delta\text{-FeOOH}$, напротив, – сужение областей pH, при которых образуются эти фазы. С ростом температуры отмечено уменьшение полуширины $\Delta 2\theta$ рефлексов соответствующих фаз, свидетельствующее об увеличении среднего размера d их кристаллов.

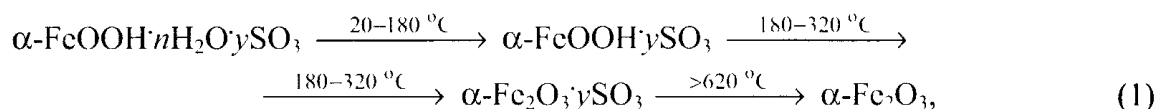
Из результатов РЭМ-исследований следует, что для каждой из синтезированных фаз присуща определенная морфология кристаллов, средний размер которых зависит от параметров процесса окисления. В частности, фазы $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ и $\delta\text{-FeOOH}$ имеют изометричную (близкую к сферической) форму кристаллов. Для кристаллов α - и $\gamma\text{-FeOOH}$ характерны соответственно игольчатая и пластинчатая ростовые формы. Отметим, что средний размер кристаллов, определенный из данных РЭМ, удовлетворительно согласуется с рентгенографическими данными.

Из данных РСА следует, что все синтезированные образцы в основном состоят из железа и кислорода, но в значительно меньших количествах включают также атомы калия и серы. Примененный метод РСА позволяет определить элементы с атомным номером $z \geq 5$. Поэтому следует допустить наличие в исследованных образцах наряду с вышеуказанными элементами также и водорода.

Данные о фазовом и химическом составе образцов подтверждаются данными ИК-спектроскопических и термогравиметрических исследований. В частности, ИК-спектр однофазного образца $\alpha\text{-FeOOH}$ содержит: узкие полосы поглощения связей Fe–O с волновыми числами ν 407, 462 и 631 см^{-1} ; колебаний OH-групп (797 и $893\text{ }1787\text{ см}^{-1}$); деформационных колебаний H_2O (1645 см^{-1}), а также широкую полосу поглощения с максимумом при 3158 валентных колебаний связей H–O. Кроме того, в спектре этого образца присутствуют более слабые полосы поглощения с волновыми числами 1053, 1137 и 1160 см^{-1} , которые можно отнести к валентным колебаниям SO_4^{2-} -ионов [8]. В ИК-спектрах образцов, представляющих собой бинарные смеси α - + $\gamma\text{-FeOOH}$ и α - + $\delta\text{-FeOOH}$ наряду с полосами поглощения, характерными для $\alpha\text{-FeOOH}$, присутствуют дополнительные полосы поглощения с волновыми числами 1022 см^{-1} и 1050, 1530 см^{-1} , которые следует отнести к колебаниям OH- групп в γ - и $\delta\text{-FeOOH}$, соответственно. ИК-спектры однофазных образцов $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ содержат полосы поглощения связей Fe–O с волновыми числами 447, 581 и 626 см^{-1} , характерные для Fe_2O_3 , деформационных колебаний H_2O (1625 см^{-1}), широкую полосу поглощения с максимумом при 3441 валентных колебаний связей H–O, а также слабые полосы поглощения валентных колебаний SO_4^{2-} -ионов.

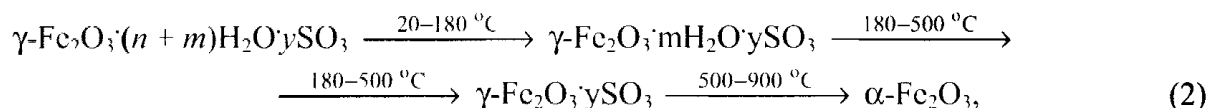
Термограммы образцов FeOOH во многом схожи, поэтому их удобно рассмотреть на примере термических превращений однофазного $\alpha\text{-FeOOH}$. По данным ТГ относительное изменение массы в интервале $20\text{--}900\text{ }^{\circ}\text{C}$ $\Delta m_{20-900}/m_0$ этого образца составляет 16,49 %. На кривой дифференциального термического анализа (ДТА) фиксируются три эндотекста с максимумами при температурах 80, 270 и $750\text{ }^{\circ}\text{C}$, сопровождающиеся уменьшением массы. Масс-спектрометрические исследования состава газовой фазы показали, что первый и второй эндотекст обусловлен дегидратацией, а третий – процессом разложения сульфат-ионов. По данным РФА, образец $\alpha\text{-FeOOH}$ при температурах выше $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ испытывает превращение в $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Из сопоставления полученных данных с литературными [4, 6], можно заключить, что при первом и втором эндотекстах из образца удаляется соответственно физически адсорбированная и конституционная вода (OH-группы). Тогда эмпирическую структурную формулу FeOOH можно представить в виде

$\text{FeOOH} \cdot n\text{H}_2\text{O} \cdot y\text{SO}_3$, а термические превращения $\alpha\text{-FeOOH}$ при термообработке – в виде следующей схемы:



где n и y – содержание в образце адсорбированной воды и SO_4^{2-} -ионов, в пересчете на FeOOH . Из данных ТГ по изменению массы образцов FeOOH на каждой стадии термического превращения, рассчитаны величины n и y , а с учетом структурной формулы – и соотношения Fe/O и S/O в исходных образцах. Данные о химическом составе образцов FeOOH , полученные двумя независимыми методами исследования (РСА и ТГ), совпадают между собой в рамках погрешностей экспериментальных результатов.

На ДТА-кривых однофазных образцов $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ фиксируются два эндоэффекта с максимумами при температурах 80 и 260 $^\circ\text{C}$, обусловленные процессами удаления физически адсорбированной и конституционной воды и сопровождающиеся потерей массы, а также ярко выраженный экзотермический эффект при 560 $^\circ\text{C}$, протекающий без заметных изменений массы образца (уменьшение массы образца в интервале температур 500–900 $^\circ\text{C}$ составляет ~0,2 %). По данным РФА экзотермический эффект обусловлен фазовым переходом $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ в $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Полагая, что изменения массы образцов Fe_2O_3 при температурах выше 500 $^\circ\text{C}$, как и в случае FeOOH , обусловлены процессом десульфатизации, структурную формулу Fe_2O_3 можно представить в виде $\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O} \cdot y\text{SO}_3$, а его термические превращения при термообработке в виде следующей схемы:



где n , m и y – содержание в образце адсорбированной, конституционной воды и SO_4^{2-} -ионов, в пересчете на Fe_2O_3 . Как и в случае термических превращений FeOOH из данных ТГ, рассчитаны величины m , n и y , а с учетом структурной формулы – и соотношения Fe/O и S/O в исходных образцах. Установлено, что метод РСА по сравнению с ТГ дает несколько заниженные результаты по соотношению Fe/O в образцах $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$.

Обнаруженная зависимость фазового и дисперсного состава осадка, формирующегося в системе $\text{FeSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - \text{KOH} - \text{H}_2\text{O}_2$, от параметров процесса окисления в целом согласуется с результатами исследования аналогичных систем [4–7] и свидетельствует о том, что рост кристаллов при окислении водных растворов солей железа(II) и (или) суспензий гидроксида железа (II), особенно в области низких температур, протекает в условиях высоких пересыщений. Следствием этого является уменьшение среднего размера кристаллов, возрастание их дефектности, образование фаз с неупорядоченной кристаллической структурой, в частности, фазы $\delta\text{-FeOOH}$.

В заключение обратимся к рассмотрению вопроса о природе конституционной воды в $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Согласно [9] $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ имеет дефектную структуру типа шпинели и регулярные дефекты в катионной подрешетке. Структурная формула имеет вид $\text{Fe}_{8-2/67}\text{Fe}_{13/33}\text{O}_{32}$, где знак $-$ означает вакансии в октаэдрических катионных позициях. В процессе реакции окисления молекулы воды раствора могут занимать вакантные позиции, образуя с анионами кислорода водородные связи, и тем самым стабилизируют решетку $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Этим объясняются более высокие по сравнению с адсорбированной водой температуры удаления конституционной воды на термограммах $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (выше 200 $^\circ\text{C}$).

Литература

1. Шабанова, Н.А. Химия и технология нанодисперсных оксидов / Н.А. Шабанова, В.В. Попов, П.Д. Саркисов. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 309 с.
2. Некоторые аспекты выбора состава железоксидных каталитических систем для дегидрирования углеводородов / А.А. Емексев, О.И. Ахматов, Г.И. Федоров, Х.Э. Харлампиди // Вестн. Казан. технол. ун-та. – 2008. – № 2. – С. 61–63.
3. Novel high dielectric constant nanocomposites of polyaniline dispersed with $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ nanoparticles / N.N. Mallikarjuna, S.K. Manohar, P.V. Kulkarni *et al.* // J. Appl. Polym. Sci. – 2005 – V. 97, № 5. – P. 1868–1874.
4. Клещев, Д.Г. Влияние среды на фазовые и химические превращения в дисперсных системах / Д.Г. Клещев, А.И. Шейнкман, Р.Н. Плетнев. – Свердловск: УрО АН СССР. – 1990. – 248 с.

5. Kijama, M. Conditions for the formation of Fe_3O_4 by the air oxidation of $\text{Fe}(\text{OH})_2$ suspensions / M. Kijama // *Bull. Chem. Soc. Japan.* – 1974. – V. 47, № 7. – P. 1646–1650.
6. Datta, N.C. Chemistry of iron (III) oxides and oxyhydroxide / N.C. Datta // *J. Sci. Industr. Res.* – 1981. – V. 40, № 9. – P. 571–583.
7. Temperature and pH effect on composition precipitate formed in $\text{FeSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - \text{H}^+/\text{OH}^- - \text{H}_2\text{O}_2$ system / A.V. Tolchev, D.G. Kleshev, R.R. Bagautdinova, V.Yu. Pervushin // *Mat. Chem. Phys.* – 2002. – V. 74, № 1. – P. 336–339.
8. Особенности превращения гидратированный диоксид титана – анатаз при гидротермальной обработке в водных растворах / Д.А. Жеребцов, С.А. Сюткин, В.Ю. Первушин и др. // *Журн. неорган. хим.* – 2010. – Т. 55, № 8. – С. 1–6.
9. Gallagher, K.S. Mechanism of oxidation of magnetite to $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ / K.S. Gallagher, W. Feitknecht, U. Mannweiler // *Nature.* – 1968. – V. 127, № 5134. – P. 1118–1121.

Поступила в редакцию 6 сентября 2012 г.

PHASE FORMATION IN THE SYSTEM $\text{FeSO}_4 - \text{KOH} - \text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}_2$

V.S. Mirasov¹, I.V. Krivtsov², D.A. Zherebtsov³, D.G. Kleshev⁴, Yu.I. Ryabkov⁵

Mechanism of phase formation at oxidation of water solutions FeSO_4 and (or) suspensions $\text{Fe}(\text{OH})_2$ at quasi-constant temperature and pH values is analyzed. Obtained nanodispersed materials are studied by means of X-ray phase analysis, X-ray fluorescence analysis, infrared spectroscopy, raster electron microscopy, thermogravimetric analysis and mass-spectrometry. Dependence of phase and disperse product content on parameters of synthesis is determined.

Keywords: phase formation, nanodispersed, oxy hydroxides of ferrum (III).

References

1. Shabanova N.A., Popov V.V., Sarkisov P.D. *Khimiia i tekhnologiia nanodispersnykh oksidov* (Chemistry and technology of nanodispersed oxides). Moscow: IKTs «Akademkniga», 2006. 309 p.
2. Emekeev A.A., Akhmerov O.I., Fedorov G.I., Kharlampidi Kh.E. *Vestn. Kazan. tekhnol. un-ta.* 2008. no. 2. pp. 61–63. (in Russ.).
3. Mallikarjuna N.N., Manohar S.K., Kulkarni P.V. *et al.* Novel high dielectric constant nanocomposites of polyaniline dispersed with $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ nanoparticles. *J. Appl. Polym. Sci.* 2005. Vol. 97. no. 5. pp. 1868–1874.
4. Kleshchev D.G., Sheinkman A.I., Pletnev R.N. *Vliianie sredy na fazovye i khimicheskie prevrashcheniia v dispersnykh sistemakh* (Influence of the environment on the phase and chemical transformations in disperse systems). Sverdlovsk: UrO AN SSSR. 1990. 248 p. (in Russ.).
5. Kijama M. Conditions for the formation of Fe_3O_4 by the air oxidation of $\text{Fe}(\text{OH})_2$ suspensions. *Bull. Chem. Soc. Japan.* 1974. Vol. 47. no. 7. pp. 1646–1650.
6. Datta N.C. Chemistry of iron (III) oxides and oxyhydroxide. *J. Sci. Industr. Res.* 1981. Vol. 40. no. 9. pp. 571–583.
7. Tolchev A.V., Kleshev D.G., Bagautdinova R.R., Pervushin V.Yu. Temperature and pH effect on composition precipitate formed in $\text{FeSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - \text{H}^+/\text{OH}^- - \text{H}_2\text{O}_2$ system. *Mat. Chem. Phys.* 2002. Vol. 74. no. 1. pp. 336–339.
8. Zherebtsov D.A., Siutkin S.A., Pervushin V.Yu. *et al.* *Zhurn. Neorgan. khim.* 2010. Vol. 55. no. 8. pp. 1–6. (in Russ.).
9. Gallagher K.S., Feitknecht W., Mannweiler U. Mechanism of oxidation of magnetite to $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$. *Nature.* 1968. Vol. 127. no. 5134. pp. 1118–1121. DOI:10.1038/2171118a0

¹ Mirasov Vadim Shafikovich is Post-graduate student, General and Experimental Physics Department, South Ural State University.
E-mail: mirasov@ugmail.com

² Krivtsov Igor Vladimirovich is Cand. Sc. (Chemistry), Ecology and Nature Management Department, South Ural State University.
E-mail: zapasoul@gmail.com

³ Zherebtsov Dmitry Anatolyevich is Cand. Sc. (Chemistry), Associate Professor, Physical Chemistry Department, South Ural State University.
E-mail: zherebtsov_da@yahoo.com

⁴ Kleshev Dmitry Georgievich is Dr. Sc. (Chemistry), Professor, General and Experimental Physics Department, South Ural State University.
E-mail: dgk@susu.ac.ru

⁵ Ryabkov Yuri Ivanovich is Dr. Sc. (Chemistry), Institute of Chemistry, Komi Scientific Center of UB RAS.
E-mail: ryab2007@rambler.ru

ВЛИЯНИЕ КАСАТЕЛЬНОГО НАПРЯЖЕНИЯ НА ВОЛНОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЖИДКОЙ ПЛЕНКИ

Л.А. Прокудина¹, Е.А. Саламатов²

Исследовано влияние газового потока на волновые характеристики жидкой пленки в диапазоне чисел Рейнольдса $Re < 15$. Рассмотрены оптимальные режимы течения жидкой пленки в условиях противотока. Рассчитаны формы волн на свободной поверхности жидкой пленки в нелинейном приближении.

Ключевые слова: жидкая пленка, режим противотока, касательное напряжение, свободная поверхность, волновые характеристики.

Исследование течений тонких слоев вязких жидкостей (жидких пленок) имеет практический и теоретический интерес, так как течения жидких пленок являются основой многих технологических процессов в нефтехимической, металлургической, энергетической и других отраслях промышленности. Широкое использование контактных устройств пленочного типа обусловлено их эффективностью, экономичностью, высоким качеством получаемых продуктов. Результаты исследований пленочных течений используются при проектировании технологических установок, разработке эффективных методов расчета контактных устройств пленочного типа [1, 2].

Рассмотрим волновое течение тонкого слоя вязкой однородной несжимаемой жидкости в диапазоне чисел Рейнольдса $Re < 15$. Жидкая пленка стекает под действием силы тяжести по вертикальной плоской гладкой непроницаемой поверхности (стенке). Параллельно стенке в режиме противотока движется газовый поток, обтекающий жидкую пленку и создающий на ее свободной поверхности постоянное касательное напряжение.

Уравнение свободной поверхности жидкой пленки [1]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} = & b_1 \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} + b_2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + b_3 \frac{\partial \psi}{\partial x} + b_4 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial t} + b_5 \psi \frac{\partial \psi}{\partial x} + b_6 \psi \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + b_7 \psi \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} + b_8 \psi \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial t} + \\ & + b_9 \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} + b_{10} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + b_{11} \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $b_1 = -\frac{Re\sigma}{3}$, $b_2 = \frac{3}{40} Re^3 F (F - \tau)$, $b_3 = -Re(F - \tau)$, $b_4 = \frac{5}{27} Re^2 F$, $b_5 = -2ReF + Re\tau$,

$b_6 = \frac{3}{8} Re^3 F \tau + \frac{9}{20} Re^3 F^2$, $b_7 = 3b_1$, $b_8 = 4b_4$, $b_9 = b_8$, $b_{10} = b_6$, $b_{11} = 3b_1$, σ – параметр поверхностного натяжения, F – число Фруда, τ – параметр касательного напряжения, $\psi(x, t)$ – отклонение свободной поверхности жидкой пленки от невозмущенного состояния.

Изучено развитие периодических возмущений в жидкой пленке при обдуве ее свободной поверхности газовым потоком. Расчеты [3] осуществлены в линейном приближении (учтены члены при коэффициентах b_1 , b_2 , b_3 , b_4) и в нелинейном приближении (уравнение (1) в полной форме).

Исследованы оптимальные режимы течения, с наибольшей вероятностью реализующиеся в эксперименте [4], соответствующие максимальным скоростям роста амплитуд волн на свободной поверхности пленки. Для оптимальных режимов течения рассчитаны волновые характеристики жидкой пленки в условиях противотока (см. таблицу): волновое число k , инкремент ω_i , частота ω , фазовая скорость $C = \omega_i / k$.

Газовый поток оказывает существенное влияние на волновые характеристики жидкой пленки. Чем больше величина касательного напряжения τ , тем больше значения волновых чисел k ,

¹ Прокудина Людмила Александровна – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра прикладной математики, Южно-Уральский государственный университет.

² Саламатов Евгений Александрович – аспирант, кафедра прикладной математики, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: salamatov(a)gmx.com

Волновые характеристики жидкой пленки в условиях противотока (оптимальные режимы)

τ	k	ω_i	ω_r	C
$Re = 7$				
0	0,09332	0,03376	0,26618	2,852
0,05	0,10161	0,04745	0,29782	2,931
0,10	0,10861	0,06194	0,32411	2,984
0,15	0,11442	0,07629	0,34508	3,097
$Re = 10$				
0	0,11629	0,06419	0,30222	2,599
0,05	0,12512	0,08611	0,32256	2,578
0,10	0,13072	0,10247	0,33194	2,539
0,15	0,13419	0,11378	0,33620	2,505

частот ω , инкрементов ω_i . Для чисел Рейнольдса $Re < 9$ при увеличении касательного напряжения τ наблюдается увеличение фазовых скоростей C ; для $Re > 9$ увеличение касательного напряжения τ способствует уменьшению фазовых скоростей C (см. таблицу).

В рамках вычислительного эксперимента [3] рассчитаны формы волн на свободной поверхности жидкой пленки (рис. 1, 2), $\psi_{\max}$, $\psi_{\min}$, амплитуды

$$A = \frac{\psi_{\max} + |\psi_{\min}|}{2}. \quad (2)$$

Касательное напряжение τ в режиме противотока способствует увеличению амплитуд на свободной поверхности жидкой пленки. Например, для $Re = 7$ к моменту времени $t = 6$ амплитуда волны при $\tau = 0,15$ на 20 % больше, чем амплитуда волны в режиме свободного стекания ($\tau = 0$).

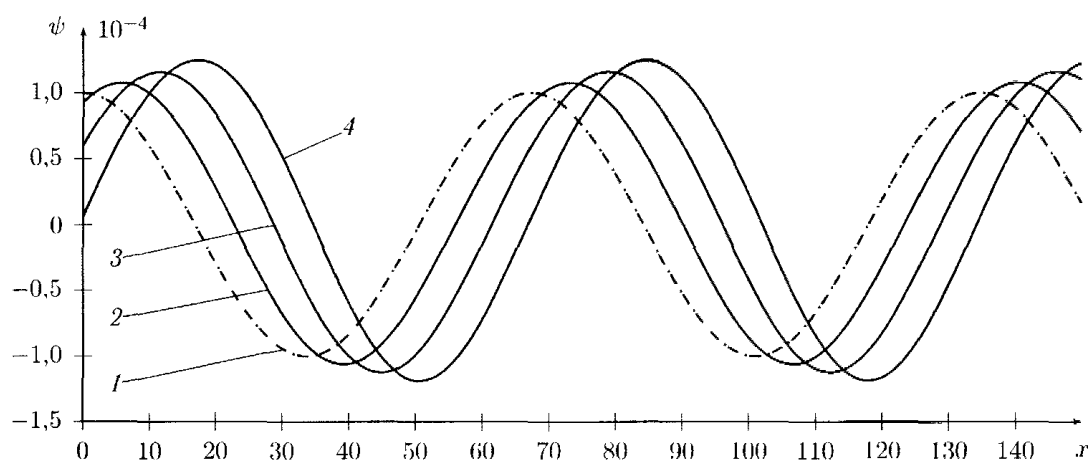


Рис. 1. Состояние свободной поверхности жидкой пленки ($Re = 7$, $\tau = 0$):
1 – $t = 0$; 2 – $t = 2$; 3 – $t = 4$; 4 – $t = 6$

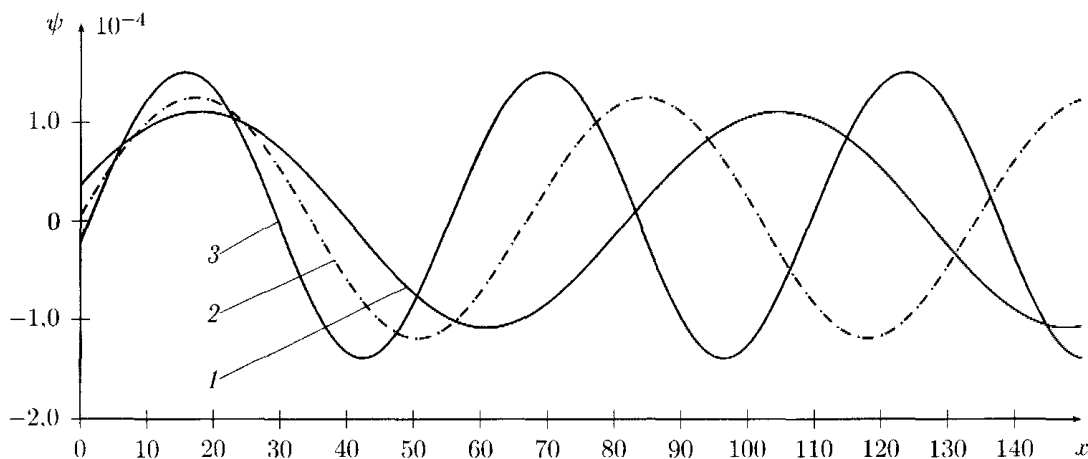


Рис. 2. Состояние свободной поверхности жидкой пленки
к моменту времени $t = 6$ ($Re = 7$): 1 – $\tau = 0$; 2 – $\tau = 0,05$; 3 – $\tau = 0,15$

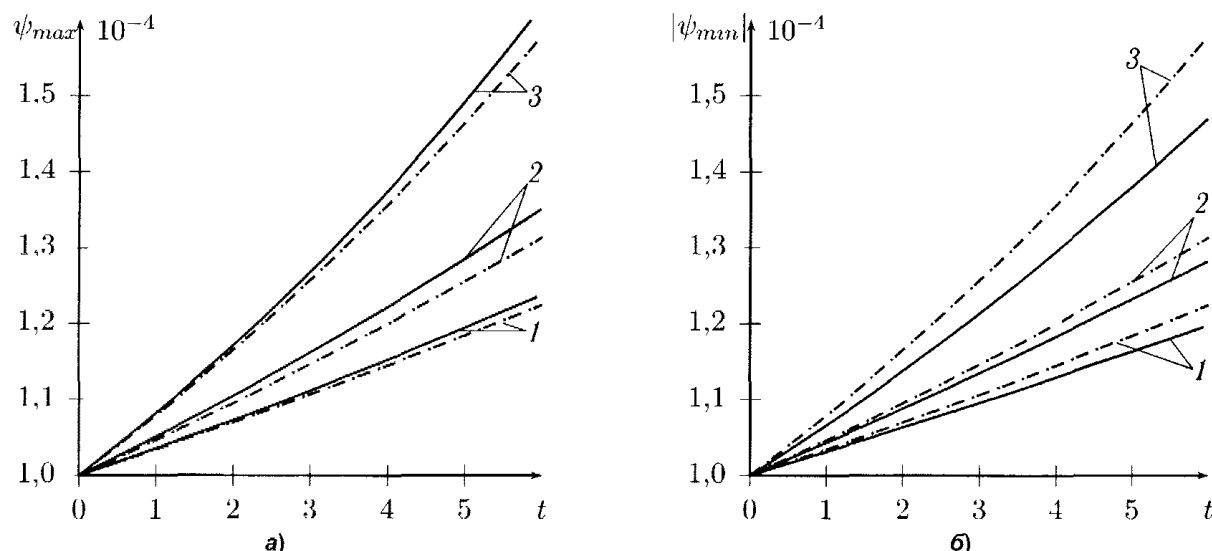


Рис. 3. Изменение величин $\psi_{\max}$ и $|\psi_{\min}|$ с течением времени ($Re = 7$):

1 – $\tau = 0$; 2 – $\tau = 0,05$; 3 – $\tau = 0,15$;

сплошные кривые – расчет в нелинейном приближении [3];

пунктирные кривые – расчет в линейном приближении

Уточнено поведение величин $\psi_{\max}$, $\psi_{\min}$, A с течением времени (рис. 3, 4).

В нелинейном приближении величина $\psi_{\max}$ больше, чем величина $\psi_{\max}$ в линейном приближении (рис. 3, а), расхождение достигает 4 %.

Величина $|\psi_{\min}|$ в нелинейном приближении меньше по сравнению с линейным приближением (рис. 3, б), расхождение достигает 8 %.

Чем больше значение касательного напряжения τ , тем больше расхождение между линейным и нелинейным приближениями для величин $\psi_{\max}$, $|\psi_{\min}|$, A (рис. 3, 4).

Таким образом, при изменении касательного напряжения τ наблюдается увеличение волновых чисел k , частот ω , инкрементов ω_i , возмущений, развивающихся на свободной поверхности жидкой пленки. При $Re < 9$ увеличение касательного напряжения приводит к увеличению фазовых скоростей C возмущений, при $Re > 9$ – к уменьшению фазовых скоростей C .

Чем больше значение касательного напряжения τ , тем больше амплитуды волн A на свободной поверхности жидкой пленки, что приводит к увеличению поверхности раздела газ-жидкость, повышению эффективности контактных устройств пленочного типа.

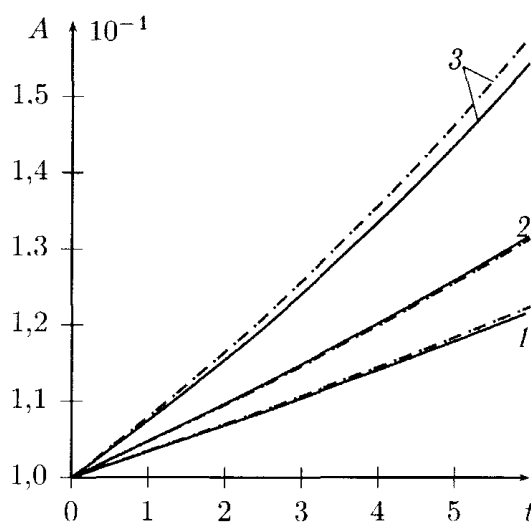


Рис. 4. Амплитуды волн

на свободной поверхности пленки ($Re = 7$):

1 – $\tau = 0$; 2 – $\tau = 0,05$; 3 – $\tau = 0,15$;

сплошные кривые – нелинейное приближение;
пунктирные кривые – линейное приближение

Литература

1. Прокудина, Л.А. Волновое течение неізотермической жидкой пленки: препринт / Л.А. Прокудина, Г.П. Вяткин. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 1998. – 42 с.
2. Прокудина, Л.А. Моделирование оптимальных режимов течения жидкой пленки в контакте с газовым потоком / Л.А. Прокудина, Е.А. Саламатов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2010. – Вып. 3. – № 30(206). – С. 79–82.
3. Прокудина, Л.А. Нелинейные волны на поверхности неізотермической жидкой пленки: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011617666 / Л.А. Прокудина, Е.А. Саламатов. – № 2011615884; заявл. 03.08.2011; зарег. 30.09.2011.
4. Алексеев, С.В. Волновое течение пленок жидкости / С.В. Алексеев, В.Е. Накоряков, Б.Г. Покусасев. – М.: Наука, 1992. – 256 с.

Поступила в редакцию 5 сентября 2012 г.

L.A. Prokudina¹, E.A. Salamatov²

The influence of gas flow on wave characteristics of liquid film for $Re < 15$ is studied. Optimal modes of liquid film flow in terms of countercurrent are considered. Wave shapes on free surface of liquid film in nonlinear approach are calculated.

Keywords: liquid film, countercurrent, shear stress, free surface, wave characteristics.

References

1. Prokudina L.A., Viatkin G.P. *Volnovoe techenie neizotermicheskoi zhidkoi plenki: preprint* (Wave flow of nonisothermal liquid film: preprint). Cheliabinsk: Izd-vo YuUrGU, 1998. 42 p. (in Russ.).
2. Prokudina L.A., Salamatov E.A. Modelirovanie optimal'nykh rezhimov techeniya zhidkoi plenki v kontakte s gazovym potokom (Modeling of optimal modes of liquid film flow in contact with gas stream). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2010. Issue 3. no. 30(206). pp. 79–82. (in Russ.).
3. Prokudina L.A., Salamatov E.A. *Nelineinye volny na poverkhnosti neizotermicheskoi zhidkoi plenki: svidetel'stvo o gosudarstvennoi registratsii programmy dlia EVM № 2011617666* (Nonlinear waves on the surface of nonisothermal liquid film: certificate of state registration of computer program No.2011617666). no. 2011615884; zaiavl. 03.08.2011; zareg. 30.09.2011.
4. Alekseenko S.V., Nakoryakov V.E., Pokusacv B.G. *Wave Flow of Liquid Films*. New York: Beggel House, 1994. 313 p.

¹ Prokudina Lyudmila Alexandrovna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Applied Mathematics Department, South Ural State University.

² Salamatov Evgeny Alexandrovich is Post-graduate student, Applied Mathematics Department, South Ural State University.
E-mail: salamatov@gmh.com

ОСОБЕННОСТИ РАЗРУШЕНИЯ ПЛАСТИНЫ ИЗ ХРУПКОГО МАТЕРИАЛА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С УДАРНИКОМ

С.Б. Сапожников¹, О.А. Кудрявцев²

Рассмотрены аспекты повреждения пластин из хрупкого материала при высокоскоростном ударе. Численный анализ напряженного состояния пластины при ударе показал, что в зоне контакта возникают значительные растягивающие напряжения, определяющие возможность откола и образования радиальных трещин. На основании модели эквивалентной пробки построена аналитическая зависимость, позволяющая оценить скорость ударника после пробоя пластины из хрупкого материала.

Ключевые слова: напряженное состояние, керамика, удар, пробой, стекло.

Введение

Основным механизмом разрушения пластин из хрупких материалов при взаимодействии с твердым ударником является образование развитой системы радиальных трещин и коноида в месте контакта [1]. Для толстых пластин из малопластичных материалов, например броневых сталей, характерно выбивание пробки и отсутствие радиальных трещин, поскольку трещиностойкость сталей существенно превышает трещиностойкость современных технических керамик [1]. Поэтому для металлов механизм разрушения по схеме выбивания пробки считается классическим, на котором основаны даже численные оценки сопротивления преград пробиванию твердыми ударниками [2]. Ситуация с численным моделированием разрушения керамик намного сложнее, в работах [1, 3–5] предлагаются схемы метода конечных элементов с уничтожением элементов, с двойными узлами и их разделением по аналогии с адгезионными процессами при склейке, что приводит к возникновению дефекта массы, к существенному возрастанию размерности задачи при расчетах. Здесь следует также заметить, что в литературе для хрупких материалов нет даже приближенных методов оценки сопротивления пробоем. Данная статья является попыткой восполнить этот пробел на примере модельного материала – силикатного стекла.

Определение механических свойств стекла

Для типичного силикатного стекла механические свойства хорошо изучены: модуль упругости равен 70–75 ГПа, а предел прочности на растяжение – величина, существенно зависящая от степени дефектности поверхности и лежащая в достаточно широких пределах: 15–150 МПа [6, 7]. Следы реза стекла создают на кромках острые микротрещины, поэтому испытания на растяжение стандартных образцов-полосок не могут дать корректных результатов. В данной работе предложен способ определения предела прочности стекла при растяжении $\sigma_{вр}$, реализующий изгиб пластины размерами 100×100×5,6 мм: образец устанавливается на кольцо внутренним диаметром 70 мм и нагружается в центре усилием P . Диаметр опорного кольца был подобран из соображения минимизации влияния красных дефектов вырезки пластины на результаты испытаний с использованием зависимостей теории круглых пластин [8].

При таком нагружении в центре пластины с тыльной стороны создается двухосное растяжение. Зная из эксперимента на изгиб нагрузку разрушения пластины, можно, используя теорию круглых пластин, определить максимальное главное напряжение (предел прочности по первой теории). Для рассматриваемого в данной работе стекла значение предела прочности составило 120–150 МПа (испытано 10 образцов).

Ударные испытания

Испытания проводили на настольном разгонном стенде ЮУрГУ, в котором шар диаметром 8 мм из стали ШХ15 ускорялся энергией газов монтажного патрона при движении по каналу длиной 150 мм. Скорость шара на выходе из канала измеряли хронографом с точностью до 1 м/с. После пробоя мишени шар попадает во фрикционный тормоз – стальную грубку, заполненную

¹ Сапожников Сергей Борисович – профессор, доктор технических наук, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: ssb@usu.ac.ru

² Кудрявцев Олег Александрович – студент-дипломник, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

тканевой набивкой, и останавливается, передавая остаточный импульс трубке. Последняя смещается на некоторое расстояние, преодолевая силы трения с опорой. Проведенная предварительно тарировка фрикционного тормоза позволяет далее по его смещению определять остаточную скорость шара после пробоя мишени.

В первой серии испытаний стеклянные пластины пробивали, фиксируя начальную и остаточную скорости шара (рис. 1, точки 3). Из пластины выбивается часть материала, в окружающей зоне возникает система трещин.

Для приближенных вычислений остаточной скорости сделана замена выбитой части пластины эквивалентной в энергетическом смысле срезанной по диаметру ударника цилиндрической пробкой, подобно тому, как это делалось для преград из пластичных материалов. На основании закона сохранения энергии получена приближенная расчетная зависимость скорости шара после пробивания образца от его начальной скорости:

$$V_r = \sqrt{\frac{2E - 2A}{M}} = \sqrt{\frac{mV_0^2 - \tau^* \pi d h^2}{m + \rho \frac{\pi d^2}{4} h}}, \quad (1)$$

где E – кинетическая энергия снаряда до удара; A – работа на преодоление сил трения на поверхности пробки; $M = m + m_p$ – суммарная масса ударника и пробки; V_0 – скорость снаряда до удара; τ^* – сдвиговые напряжения, препятствующие выбиванию пробки; d – диаметр ударника; h – толщина пластины; ρ – плотность материала пластины; V_r – скорость снаряда после пробивания.

Расчеты остаточной скорости по формуле (1) удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными (рис. 1, кривая 2) при $\tau^* = 120$ МПа, т.е. сдвиговое напряжение при пробое равно пределу прочности стекла при растяжении $\sigma_{вр}$; масса шарика 2,2 г; плотность стекла 2500 кг/м³. Для пластичного материала мишени напряжение сдвига обычно составляют половину предела текучести при растяжении – в этом основное отличие хрупкого материала от пластичного при пробое. Расчетная величина баллистического предела (215 м/с) показана на рис. 1 звездочкой.

На рис. 2 представлены два механизма разрушения образцов: со сквозной пенетрацией (б) и без нее (а). При рассмотрении фотографий можно сделать вывод о наличии четкой тенденции к изменению характера повреждаемости материала при увеличении энергии ударника. При малых скоростях выбивается коноид (пунктир на рис. 2, а), поглощая основную часть энергии, а оставшаяся часть, связанная с изгибом пластины, рассеивается системой радиальных трещин. При высоких скоростях ударника выбитый коноид может поглотить небольшую часть энергии, а основная рассеивается плотной системой трещин (преимущественно радиальных).

В предлагаемой модели эквивалентной пробки энергия, затраченная на ее сдвиг, является суммарной энергией образования новых поверхностей в системе густых трещин.

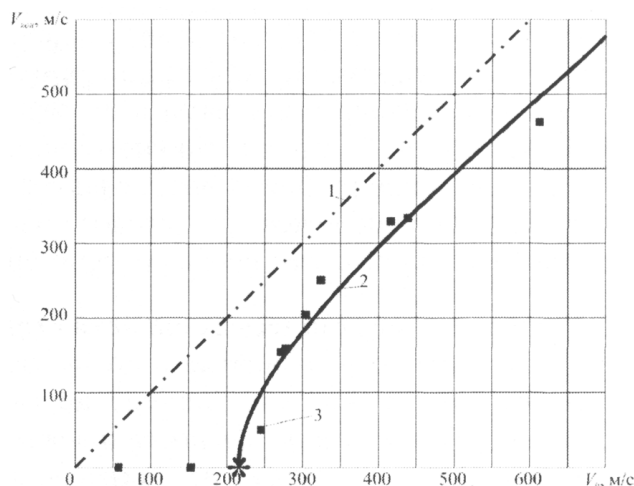


Рис. 1. Зависимость скорости ударника после пробоя от начальной скорости: 1 – отсутствие мишени; 2 – аналитическая зависимость (1); 3 – эксперимент

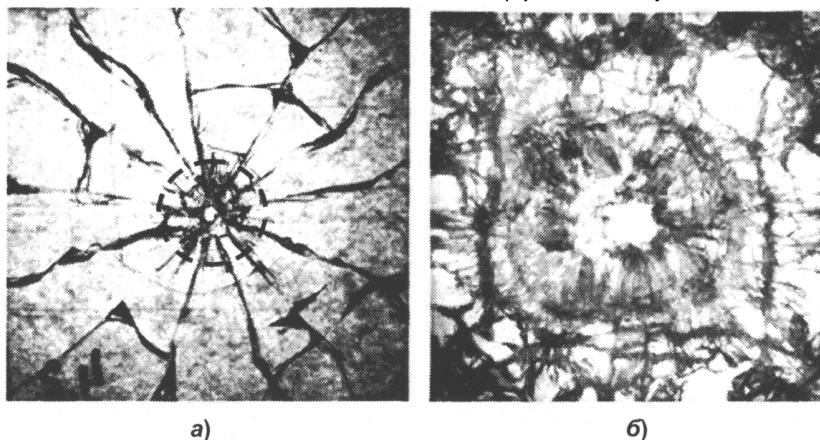


Рис. 2. Характер разрушения образцов: а) без сквозной пенетрации ($V_0 < 200$ м/с); б) сквозная пенетрация ($V_0 > 200$ м/с)

Расчетная часть

Попадание снаряда в преграду вызывает в ней сложные волновые явления (волны Римана, Лэмба, сдвиговые и др.), которые оказывают влияние на механизм разрушения керамики. Чтобы получить представление о распространении волн (на примере стеклянной пластины при ударе стальным шариком) в пакете ANSYS, реализующем метод конечных элементов, была решена соответствующая задача (рис. 3). Материал ударника и пластины принимали идеально упругим; пластину считали незакрепленной. В зоне контакта сетка конечных элементов (восьми-узловых тетраэдров) была измельченной до 0,25 мм, во внешней части элементы имели размер около 1 мм.

Анализ напряженного состояния пластины показал, что в зоне контакта развиваются высокие напряжения сжатия, а на границе контактной зоны – напряжения растяжения в окружном направлении, которые приводят к генерации радиальных трещин на ударной поверхности. Импульс сжатия достаточно быстро достигает тыльной стороны пластины и отражается, вызывая появление квазистатических напряжений изгиба в пластине, подобно нагружению сосредоточенной силой на упругом основании.

Волновые процессы в радиальном направлении протекают медленнее и волна изгиба создаст на лицевой и тыльной поверхностях в радиальном направлении волны растяжения-сжатия. При рассмотрении двух равноудаленных от центра точек А и В (рис. 3), находящихся на лицевой и тыльной поверхностях пластины на расстоянии 15 мм от точки удара, видно, что в то время как в радиальном направлении на лицевой стороне идет фаза растяжения, на тыльной стороне начинается сжатие (рис. 4); растяжение здесь начинается лишь спустя 10 мкс.

Кинетика напряжений (рис. 4) иллюстрирует наличие волны изгиба, амплитуда которой нерегулярно осциллирует. Следует отметить, что радиус пластины равен 50 мм и волна Римана дойдет до границы пластины за 10 мкс и вернется в тт. А и В через 17 мкс. Далее начнется общее движение пластины на фоне волн изгиба с меньшей амплитудой. В зоне контакта максимальные растягивающие напряжения в стекле достигают величины 6 ГПа, а сжимающие – 18 ГПа, что гарантирует разрушение материала.

При меньших скоростях соударения (менее 300 м/с) зона высоких напряжений очень ограничена, что может привести к отсутствию сквозной пенетрации пластины ударником. В зоне контакта ударника по толщине на оси симметрии пластины напряжения растяжения все еще будут достаточны для разрушения материала (рис. 5). Наибольшие значения напряжений развиваются в момент времени 12–17 мкс (скорости 300–50 м/с), когда шар начинает отрываться от пластины.

В подповерхностной зоне пластины нормальные напряжения в этот момент времени инициируют коническую трещину, распространяющуюся к тыльной стороне благодаря напряжениям сдвига, которая формирует коноид разрушения. Анализ графиков на рис. 5 показывает, что предел прочности стекла на растяжение дос-

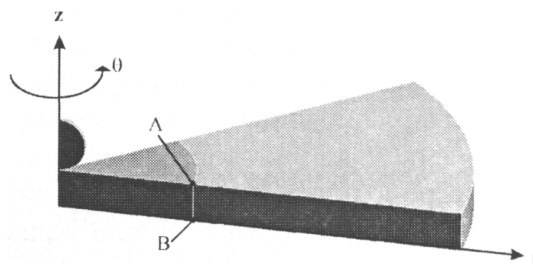


Рис. 3. Модель для расчета упругого удара шара по пластине. Скорость шара 300 м/с

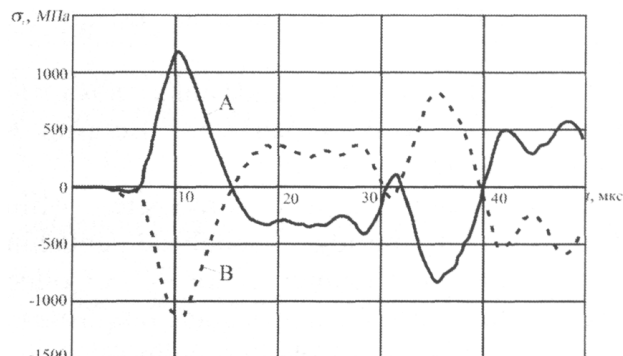


Рис. 4. Зависимость радиальных растягивающих напряжений в точках А и В от времени

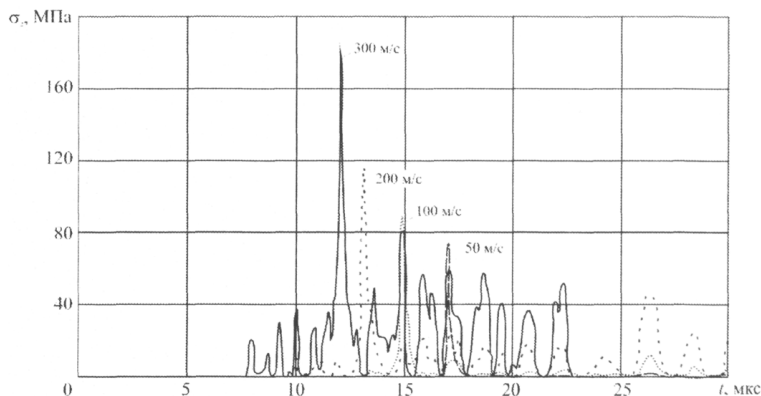


Рис. 5. Изменение во времени растягивающих напряжений σ_z на оси симметрии пластины при различных скоростях ударника

тигается при скорости удара 200–250 м/с, что хорошо согласуется с экспериментально полученной величиной баллистического предела – 215 м/с, рис. 1.

За время контакта пластины и шара последний передаст получившемуся коноиду импульс, достаточный для его выбивания из пластины. В соответствии с законом сохранения импульса при упругом ударе ударник отлетает от пластины в противоположную сторону. Таким образом, на ударной стороне пластины образуется лишь небольшое отверстие, а на тыльной поверхности повреждения намного больше. Число радиальных трещин при таком типе разрушения невелико (рис. 2, а) и зависит от энергии, переданной ударником преграде.

Выводы

Для оценки прочности на растяжение хрупких материалов в виде пластин предложен способ нагружения, в котором дефекты на кромках не оказывают влияния на измеряемую механическую характеристику. Предложена модель сквозного пробоя индентором пластины из хрупкого материала на основе эквивалентной «пробки», получена аналитическая зависимость для оценки скорости ударника после пробоя пластины из хрупкого материала с напряжениями сдвига, равными пределу прочности материала мишени на растяжение. Это даст возможность определять баллистический предел расчетным путем. Анализ напряженного состояния пластины при ударе с разными скоростями показал качественное и количественное соответствие с результатами экспериментов на пробой.

Литература

1. Hazell, P.J. Ceramic armour: Design and Defeat Mechanisms / P.J. Hazell. – Canberra: Argos Press, 2006. – 168 p.
2. Форенталь М.В. Динамика локального деформирования и разрушения металлической пластины / М.В. Форенталь // Вестник ЮУрГУ. Серия «Машиностроение». – 2009. – Вып. 14. – № 33 (166). – С. 4–11.
3. Lightweight ballistic composites. Military and law-enforcement applications / Edited by A. Bhatnagar. – Cambridge: Woodhead publishing limited, 2006. – 429 p.
4. Advances in Ceramic Armor IV. A Collection of Papers Presented at the 32nd International Conference on Advanced Ceramics and Composites January 27-February 1, 2008, Daytona Beach, Florida / Edited by L.P.Franks. – Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2009. – 230 p.
5. Advances in Ceramic Armor VII. A Collection of Papers Presented at the 35nd International Conference on Advanced Ceramics and Composites January 22-28, 2011, Daytona Beach, Florida / Edited by J.J. Swab. – Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2011. – 272 p.
6. <http://ru.wikipedia.org/wiki/Стекло.html>.
7. ГОСТ 111-2001. Стекло листовое. Технические условия. – М.: ГУП ЦПП, 2002. – 41 с.
8. Тимошенко, С.П. Пластинки и оболочки / С.П. Тимошенко, С. Войновский-Кригер; под ред. Г.С. Шапиро. – 2-е изд., стереотипное. – М.: Наука, 1966. – 636 с.

Поступила в редакцию 6 августа 2012 г.

ASPECTS OF BRITTLE PLATE FRACTURE DUE TO INTERACTION WITH INDENTER

S.B. Sapozhnikov¹, O.A. Kudryavtsev²

In this paper different aspects of brittle material plate fracture at high velocity impact were investigated. Numerical analysis of contact region showed that there are significant tensile stresses may led to dishing and radial cracks. On the base of equivalent plug's model there was developed analytical formula to estimate residual indenter velocity after penetration of plate made from brittle material.

Keywords: stress-strain state, ceramics, impact, penetration, glass.

References

1. Hazell P.J. *Ceramic armour: Design and Defeat Mechanisms*. Canberra: Argos Press, 2006. 168 p.
2. Forental M.V. *Vestnik YuUrGU. Seriya «Mashinostroenie»*. 2009. Issue 14. no. 33(166). pp. 4–11. (in Russ.).
3. Bhatnagar A. (ed.) *Lightweight ballistic composites. Military and law-enforcement applications*. Cambridge: Woodhead publishing limited, 2006. 429 p.
4. Franks L.P.(ed.) *Advances in Ceramic Armor IV. A Collection of Papers Presented at the 32nd International Conference on Advanced Ceramics and Composites*. January 27 – February 1, 2008, Daytona Beach, Florida. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2009. 230 p.
5. Swab J.J. (Ed.) *Advances in Ceramic Armor VII. A Collection of Papers Presented at the 35nd International Conference on Advanced Ceramics and Composites*. January 22–28, 2011, Daytona Beach, Florida. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2011. 272 p.
6. <http://ru.wikipedia.org/wiki/Стекло.html>
7. *GOST 111-2001. Steklo listovoe. Tekhnicheskie usloviia* (Sheet glass. Technical specifications). Moscow: GUP TsPP, 2002. 41 p. (in Russ.).
8. Timoshenko S.P., Voinovskii-Kriger S. *Plastinki i obolochki*. Moscow: Nauka, 1966. 636 p. (in Russ.).

¹ Sapozhnikov Sergei Borisovich is Dr Sc (Engineering), Professor, Applies Mechanics, Dynamic and Strength of Machines Department, South Ural State University

E-mail: ssb@susu.ac.ru, sbsapozhnikov@mail.ru

² Kudryavtsev Oleg Alexandrovich is Graduate student, Applies Mechanics, Dynamic and Strength of Machines Department, South Ural State University

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ (7,7) С ОДИНОЧНЫМИ АТОМАМИ *Li*, *Na*, *S* И *Se*¹

С.А. Созыкин², В.П. Бескачко³

Рассматриваются экзо- и эндодральные комплексы углеродных нанотрубок (7,7) с адсорбированными на их поверхности атомами лития, натрия, серы и селена при малых концентрациях последних (менее ~1 ат.%). Методами первопринципного моделирования с использованием теории функционала электронной плотности рассчитаны равновесные конфигурации этих комплексов, а также их механические свойства (упругие модули, предел прочности и удлинение при разрыве). Продемонстрирована разница во влиянии атомов щелочных металлов и атомов халькогенов на структуру и свойства сорбционных комплексов.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, модуль Юнга, модуль сдвига, предел прочности, теория функционала плотности.

Введение

Интерес к экзо- и эндодральным комплексам углеродных нанотрубок (УНТ) вызван тем, что их свойства могут заметно отличаться от свойств чистых УНТ. Между тем в эксперименте УНТ практически всегда содержат неуглеродные частицы (материал катода или катализатора). Ранее нами были определены структуры эндодральных комплексов УНТ с одиночными атомами лития, натрия, магния, алюминия, кремния и хлора и распределения электронной плотности в них [1]. Для всех комплексов было обнаружено перераспределение зарядовой плотности между стенкой УНТ и адсорбированными атомами. Это должно приводить к отличию механических свойств комплексов от свойств чистых нанотрубок. В данной работе представлены результаты неэмпирического моделирования процессов растяжения экзо- и эндодральных комплексов УНТ (7,7) с атомами лития, натрия, серы и селена.

Описание модели и метода моделирования

Конечный радиус инкапсулируемых атомов накладывает ограничение на минимальный диаметр углеродного каркаса УНТ. Полость УНТ (7,7) имеет размер достаточный для размещения атомов лития, натрия, серы и селена. При моделировании механических свойств УНТ распространена модель молекулярного кластера, в которой рассматривается небольшой фрагмент длинной нанотрубки. Возникающие при этом граничные эффекты были изучены в работе [2], на основании которой можно заключить, что для УНТ (7,7) достаточная длина фрагмента составляет 2,1 нм (196 атома углерода и 24 атома водорода на торцах модели).

В качестве инструмента моделирования использовался квантово-химический пакет Firefly [3], реализующий метод функционала плотности. Выбирался гибридный обменно-корреляционный функционал B3LYP и валентно-расщепленный базисный набор Попла 6-31G. При поиске равновесной ненапряженной конфигурации комплексов варьировались координаты всех атомов. Процесс растяжения моделировался последовательным удлинением комплексов на 1 % с оптимизацией геометрии, в ходе которой фиксировались компоненты координат концевых атомов углерода в направлении оси УНТ.

Результаты и их обсуждение

Опишем вначале атомную структуру рассматриваемых комплексов УНТ. Существует как минимум две работы, в которых определялась полная энергия системы как функция расстояния атома лития до стенки нанотрубки [4, 5], которые, однако, противоречат друг другу. В первой из них сообщается о практически одинаковых положениях минимумов энергии внутри и снаружи

¹ Работа выполнялась при финансовой поддержке Минобрнауки (государственное задание № 2012065).

² Созыкин Сергей Анатольевич – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, физический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: sergey.sozykin@gmail.com

³ Бескачко Валерий Петрович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, физический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

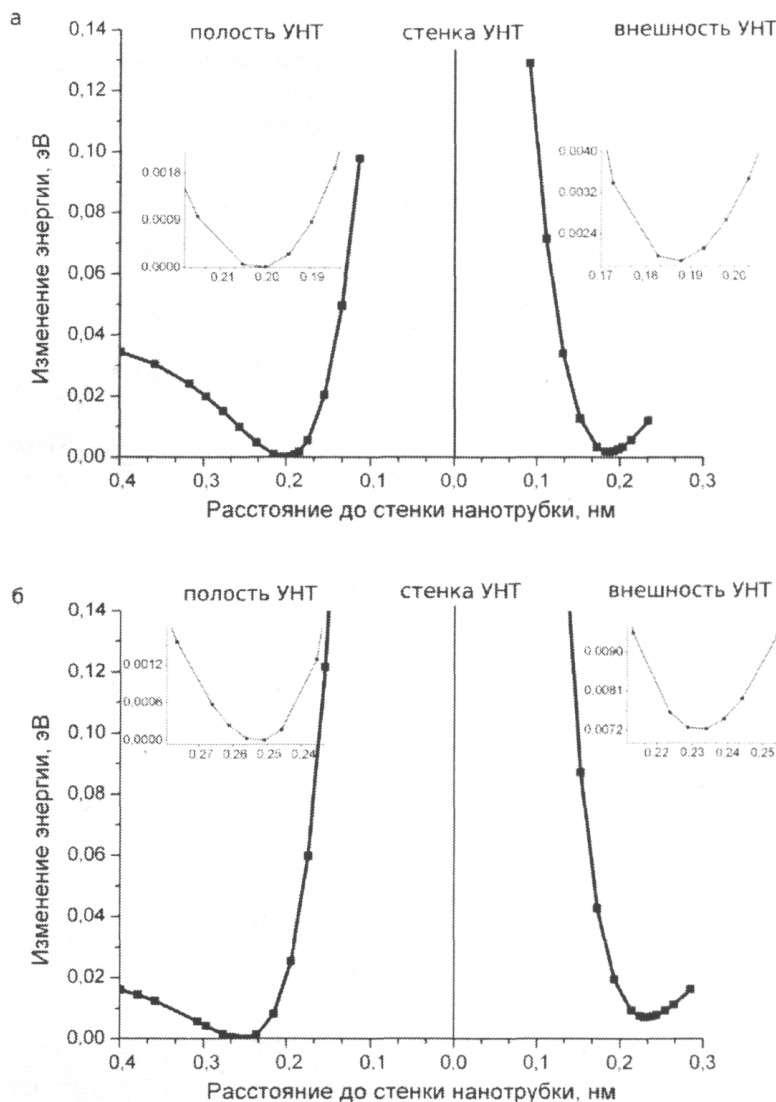
нанотрубки (0,21 нм). Во второй статье числовое значение не приводится, но из представленного в ней рисунка можно заключить, что в диапазоне расстояний до стенки нанотрубки от 0,17 до 0,19 нм энергия системы практически не изменяется. В работе [6] сообщается о расстояниях между атомом лития и каркасом нанотрубки величиной 0,187 нм и 0,170 нм при размещении этого атома в полости и на внешней поверхности соответственно. Для сравнения нами был определен профиль полной энергии системы при радиальном перемещении внедренных атомов вдоль оси, проходящей через центр шестиугольника углеродного каркаса трубки. Расчет энергии для каждого положения атома проводился без оптимизации геометрии системы. Результаты приведены на рисунке. Полученное положение минимума энергии для лития (0,20 нм при размещении в полости и 0,19 нм при размещении на внешней поверхности) согласуется с диапазоном значений этой величины, приведенным в работах [4–6] (0,17–0,21 нм). Для натрия соответствующие значения оказались равными 0,25 нм и 0,23 нм. К сожалению, литературные данные для сравнения отсутствуют.

Из рисунка видно, что и для лития, и для натрия разность энергий в конфигурациях, отвечающих положению устойчивого равновесия атома в полости и на внешней поверхности, менее 0,01 эВ, причем положение внутри нанотрубки энергетически несколько более выгодное. При приближении атомов щелочного металла к стенке УНТ энергия системы быстро возрастает, свидетельствуя о невозможности проникновения атомов через стенку УНТ при их тепловом движении.

Подобный же расчет для атомов серы и селена не проводился по причине того, что размещение этих атомов вблизи стенки УНТ приводит к существенным деформациям каркаса с изменением длин связей С–С в окрестности адсорбирующегося атома. Это означает, что расчеты, не учитывающие релаксацию геометрии нанотрубки, будут приводить к заведомо ложным результатам.

На следующем этапе, выбрав в качестве стартовых положений для атомов лития и натрия те, что получены при расчете профилей энергии, а для атомов серы и селена – несколько различных начальных положений вблизи каркаса трубки, была проведена полная оптимизация геометрии комплексов. Для атомов щелочных металлов она не привела к заметным изменениям геометрии.

Энергетически наиболее выгодным положением для атомов халькогенов оказалось их размещение над серединой связи С–С. Для атома серы в этом положении расстояния до ближайшей пары атомов углерода составляют 0,20 нм и 0,28 нм при адсорбции на внешней и внутренней поверхности нанотрубки соответственно. Для селена эти значения оказались равны 0,21 нм и 0,25 нм. При адсорбции атомов серы и селена на внешней поверхности длина связи С–С, над которой они располагаются, увеличивается на 0,01 нм, а связи этой пары атомов углерода с другими атомами углерода в нанотрубке удлиняются на 0,003 нм. Заметных изменений длин связей при размещении атомов халькогена на внутренней поверхности трубки обнаружено не было.



Изменение полной энергии системы как функция расстояния внедренного атома до стенки нанотрубки (7,7):
а – для лития, б – для натрия

В найденных равновесных конфигурациях комплексов происходит перераспределение электрического заряда между адсорбированным атомом и трубкой, что должно сказаться и на механических свойствах системы (модулях Юнга и сдвига, пределе прочности). Рассмотрим эти свойства на примере УНТ (7,7). Результаты расчета представлены в таблице. Для идеальной нанотрубки (без адсорбированных атомов) полученная величина модуля Юнга (1,057 ТПа) хорошо согласуется как с теоретическими предсказаниями, так и с экспериментальными данными [7,8]. Для систем, содержащих атомы Li, Na, S и Se в полости трубки, величина модуля Юнга составила 1,038, 1,037, 1,028 и 1,026 ТПа соответственно (уменьшилась на 1,8 %, 1,9 %, 2,9 % и 2,9 %). При расположении атомов щелочных металлов на внешней поверхности модуль Юнга также уменьшился и примерно на ту же величину, что и при размещении этих атомов в полости. Заметно меньшее влияние на модуль Юнга оказали атомы халькогенов на внешней поверхности. Изменение модуля сдвига оказалось малым (менее 1,5 %) для всех рассмотренных систем. Отметим лишь, что здесь наибольший эффект имеет место при взаимодействии нанотрубки с атомами щелочных металлов.

Механические свойства эндо- и экзоэдральных комплексов УНТ (7,7)

	УНТ	Li(a) УНТ	Na(a) УНТ	S(a) УНТ	Se(a) УНТ	Li+ УНТ	Na+ УНТ	S+ УНТ	Se+ УНТ
E , ТПа	1,057± 0,007	1,038± 0,013	1,037± 0,014	1,028± 0,003	1,026± 0,003	1,040± 0,011	1,034± 0,011	1,055± 0,007	1,055± 0,007
G , ТПа	0,548	0,541	0,541	0,547	0,547	0,540	0,540	0,546	0,545
Разрыв, %	34	27	31	34	22	24	24	26	26
T , ГПа	124	117	122	123	123	118	118	124	122

Из таблицы видно также, что предел прочности (напряжение в момент разрыва) для комплексов УНТ несколько меньше, чем для чистой УНТ. Явной зависимости этой величины от сорта или положения атома проследить не удалось. Можно лишь отметить, что предел прочности уменьшается, но не более чем на 5 %. Более заметно при адсорбции атомов изменилось максимальное удлинение, при котором нанотрубка еще не разрушится. Если для идеальной нанотрубки оно составляло 34 %, то после внесения атомов Li, Na, S и Se в полость УНТ (7,7) это значение уменьшилось до 27 %, 31 %, 34 % и 22 % соответственно. При размещении указанных атомов на внешней поверхности эти значения составили 24 %, 24 %, 26 % и 26 %, соответственно. Следует заметить, что разрушение чистой нанотрубки и комплексов УНТ с халькогенами начиналось на крайних «кольцах» модели, в то время как при взаимодействии с атомами щелочных металлов обрыв связей С-С происходил вблизи этих атомов.

Выводы

Представленные в статье результаты позволяют сделать следующие выводы.

1. При адсорбции атомов щелочных металлов УНТ не испытывает существенных изменений в геометрии. То же относится и к атомам халькогена, располагающимся внутри трубки. При адсорбции последних на внешней поверхности УНТ наблюдается удлинение связей С-С в окрестности адсорбированного атома, достигающее величины ~7 % для ближайшей связи.

2. Все рассмотренные атомы при адсорбции на внешней поверхности УНТ располагаются ближе к ее поверхности, чем при адсорбции внутри трубки, что составляет эффект кривизны поверхности.

3. Малые концентрации адсорбированных атомов (при $c \sim 1/196 < 1$ ат. %) приводят к пропорционально малому изменению всех рассмотренных механических характеристик нанотрубок, за исключением предельного их удлинения при растягивающих напряжениях. Эта величина в присутствии адсорбатов может изменяться на 20 и более процентов.

Литература

1. Созыкин, С.А. Взаимодействие углеродных нанотрубок (7,7) и (8,8) с внедренными атомами / С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2010. – Вып. 2. – № 9(185). – С. 87–91.

2. Бескачко, В.П. Механические свойства однослойных углеродных нанотрубок / В.П. Бескачко, С.А. Созыкин, Е.Р. Соколова // Все материалы. Энциклопедический справочник. – 2010. – № 7. – С. 19–23.
3. Granovsky, Alex A. Firefly version 7.1.G / Alex A. Granovsky. www <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.
4. *Ab initio* investigations of lithium diffusion in carbon nanotube systems / V. Meunier, J. Kephart, C. Roland, J. Bernholc // Physical review letters. – 2002. – Vol. 88. – P. 075506.
5. Interaction and concerted diffusion of lithium in a (5,5) carbon nanotube / M. Khandha, N.A. Cordero, J.A. Alonso *et al.* // Physical review B. – 2008. – Vol. 78. – P. 115430.
6. Theoretical study of adsorption of lithium atom on carbon nanotube / M. Senami, Y. Ikeda, A. Fukushima, A. Tachibana // AIP Advances. – 2011. – Vol. 1. – P. 042106.
7. An energy-equivalent model on studying the mechanical properties of single-walled carbon nanotubes / Y. Wu, X. Zhangb, A. Leunga, A. Zhong // Thin-Walled Structures. – 2006. – Vol. 44. – P. 667–676.
8. Asaka, K. Atomistic dynamics of deformation, fracture, and joining of individual single-walled carbon nanotubes / K. Asaka, T. Kizuka // Physical review B. – 2005. – Vol. 72. – P. 115431.

Поступила в редакцию 18 октября 2012 г.

MECHANICAL PROPERTIES OF THE COMPLEXES OF CARBON NANOTUBE (7,7) WITH SINGLE Li, Na, S AND Se ATOMS

S.A. Sozykin¹, V.P. Beskachko²

Exo- and endohedral complexes of carbon nanotubes (7,7) with small concentration (less than ~1 at. %) of adsorbed atoms of the lithium, sodium, sulfur and selenium on their surface are considered. Equilibrium configurations of these complexes, as well as their mechanical properties (elastic moduli, tensile strength and elongation at break) were calculated by using methods of first-principle simulations and density functional theory. The difference in influence of atoms of alkaline metals and chalcogen atoms on structure and properties of sorption complexes was shown.

Keywords: carbon nanotubes, Young's modulus, shear modulus, tensile strength, density functional theory.

References

1. Sozykin S.A., Beskachko V.P. Vzaimodeistvie uglerodnykh nanotrubok (7,7) i (8,8) s vnedrennymi atomami (Interaction of carbon nanotubes (7,7) and (8,8) with embedded atoms). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2010. Issue 2. no. 9(185). pp. 87–91. (in Russ.).
2. Beskachko V.P., Sozykin S.A., Sokolova E.R. *Mekhanicheskie svoistva odnosloynykh uglerodnykh nanotrubok. Vse materialy. Entsiklopedicheskii spravochnik* (The mechanical properties of single-walled carbon nanotubes. All materials. Encyclopedic Handbook.). 2010. no. 7. pp. 19–23.
3. Granovsky Alex A. Firefly version 7.1.G, www <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.
4. Meunier V., Kephart J., Roland C., Bernholc J. *Ab initio* investigations of lithium diffusion in carbon nanotube systems. *Physical review letters*. 2002. Vol. 88. p. 075506.
5. Khandha M., Cordero N.A., Alonso J.A., Cawkwell M., Girifalco L.A. Interaction and concerted diffusion of lithium in a (5,5) carbon nanotube. *Physical review B*. 2008. Vol. 78. p. 115430.
6. Senami M., Ikeda Y., Fukushima A., Tachibana A. Theoretical study of adsorption of lithium atom on carbon nanotube. *AIP Advances*. 2011. Vol. 1. pp. 042106.
7. Wu Y., Zhangb X., Leunga A., Zhong A. An energy-equivalent model on studying the mechanical properties of single-walled carbon nanotubes. *Thin-Walled Structures*. 2006. Vol. 44. pp. 667–676.
8. Asaka K., Kizuka T. Atomistic dynamics of deformation, fracture, and joining of individual single-walled carbon nanotubes. *Physical review B*. 2005. Vol. 72. pp. 115431.

¹ Sozykin Sergey Anatolevich is Post-graduate student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University
E-mail: sergey_sozykin@gmail.com

² Beskachko Valeriy Petrovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University

АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ ЖИДКОФАЗНОГО МАССОПЕРЕНОСА ВЕЩЕСТВА ПРИ ПЛАЗМЕННОЙ ОБРАБОТКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА¹

К.А. Талала², А.Я. Лейви³, А.П. Яловец⁴

Важным фактором в формировании новых свойств материала являются процессы массопереноса. Среди основных механизмов массопереноса в работе рассматривается неустойчивость Кельвина–Гельмгольца (НКГ). Показано, что развитие НКГ и другие возмущения профиля поверхности создают условия для развития сдвиговой термокапиллярной неустойчивости, а толщина области перемешивания может достигать нескольких мкм, она ограничена толщиной расплава.

Ключевые слова: плазма, плазменная обработка, массоперенос, неустойчивость Кельвина–Гельмгольца, компрессионные плазменные потоки, модификация материала.

Введение

В настоящее время обработка твердотельных мишеней мощными потоками энергии (с плотностью мощности 10^5 – 10^7 Вт/см²) широко используется для модификации свойств. Данные технологии обладают рядом преимуществ перед традиционными: обработка деталей сложной формы, малое время обработки, простота автоматизации процесса.

Перемешивание приповерхностных слоев в системах с покрытием приводит к изменению свойств материала: улучшению коррозионной и механической устойчивости, биосовместимости имплантатов. Рассмотрим процессы массопереноса вещества при обработке материала компрессионными плазменными потоками.

На конечное состояние обрабатываемой мишени влияют параметры обработки и исходное состояние поверхности. При разных режимах обработки может происходить сглаживание рельефа или образование кратеров.

Авторы [1] отмечают, что существует два качественно отличающихся по поведению материала режима обработки: докритический и закритический. Закритический режим обработки характеризуется образованием и интенсивным разлетом плазменного факела, как следствие скорость поверхности мишени достигает 100–1000 м/с, что приводит к развитию неустойчивости Релся–Тейлора (НРТ) и Рихтмайера–Мешкова (НРМ), появлению кратеров на обрабатываемой поверхности. Закритическому режиму предшествует докритический, в этом случае скорость обрабатываемой поверхности составляет 1–10 м/с и, как показано в [1], наблюдается сглаживание микрорельефа. Переход от докритического режима облучения к закритическому носит пороговый характер.

Отличительной особенностью изменения рельефа поверхности материала при воздействии плазменного потока является развитие неустойчивости Кельвина–Гельмгольца (НКГ) [2].

Целью работы является определение режимов обработки материалов, при которых массоперенос наиболее эффективен. А также определение основных механизмов массопереноса.

Основные механизмы массопереноса

Рассмотрим возможные механизмы массопереноса в системах с покрытием при обработке плазменным потоком. Прежде всего, это диффузия. В расплаве коэффициент диффузии составляет $D = 10^{-9}$ м²/с. При обработке плазменным потоком в течение 100 мкс оценим пространст-

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 10-08-00251-а) и научно-исследовательской работы ФГБОУ ВПО «ЮУрГУ» (НИУ), проводимой в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ (№ 2012043-Г304)

² Талала Ксения Анатольевна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: ktalala@yandex.ru

³ Лейви Артем Ячеславович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: leyu@yandex.ru

⁴ Яловец Александр Павлович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: yalovets@physicon.susu.ac.ru

венный масштаб диффузии $l = \sqrt{Dt} = \sqrt{10^{-13}} = 316 \cdot 10^{-9}$ м. Таким образом, за время существования расплава металла глубина диффузионного слоя не превышает 1 мкм, что много меньше глубины перемешивания (10–20 мкм), наблюдаемой в большинстве экспериментов. Роль диффузии существенна в тонких слоях (десятки–сотни нанометров) [3].

Массоперенос также могут вызывать различные гидродинамические неустойчивости. Неустойчивость Релея–Тейлора (НРТ) и неустойчивость Рихтмайера–Мешкова (НРМ) развиваются в системе двух жидкостей. В результате нагрева поверхность раздела движется ускоренно, что создает условие для роста возмущения за счет НРТ. После прекращения воздействия, поверхность раздела движется по инерции и амплитуды возмущений увеличиваются (НРМ). Рост ограничивается кристаллизацией расплава.

В работе [4] было показано, что развитие НРМ контактной границы может приводить к перемешиванию приповерхностных слоев мишени только в случае возмущений поверхности мишени, соответствующих определенному диапазону волновых чисел, который в свою очередь определяется режимом облучения, например, для пары Al и Fe и плотности вложенной энергии $W = 80$ Дж/см² этот диапазон составляет от 19 до 20 мкм. Поэтому для реализации данного механизма перемешивания требуется специальная подготовка поверхности, что является сложной в технологическом смысле задачей и не всегда оправданной.

При неоднородном нагреве мишени возможно возникновение конвективного течения [5]. В проводящем материале возможны два типа конвекции: термокапиллярная и термогравитационная, обусловленная ускорением облучаемой среды. Как показано в работе [6], при нагреве металлической мишени интенсивными потоками энергии развивается только термокапиллярная конвекция, роль термогравитационной неустойчивости мала.

Термокапиллярная неустойчивость развивается, если имеется градиент температуры, направленный внутрь жидкости относительно свободной поверхности. В случае обработки плазмой градиент температуры направлен в противоположную сторону, к свободной поверхности и оказывает стабилизирующее действие на объемное течение. Неоднородность температуры на поверхности также может приводить к возникновению объемного течения в тонком приповерхностном слое, т.е. к термокапиллярной конвекции. Формирование поверхностного градиента температуры осуществляется за счет неоднородностей состава и шероховатости поверхности.

Кроме того, при обработке плазменной струей на границе расплавов плазма имеет разрыв касательных скоростей, что создаст условия для развития неустойчивости Кельвина–Гельмгольца (НКГ). Турбулентная стадия НКГ может приводить к жидкофазному массопереносу. Также развитие НКГ приводит к неоднородному нагреву поверхности расплава, что способствует развитию сдвиговой термокапиллярной конвекции.

Для описания взаимодействия плазменных потоков с веществом была использована математическая модель, описанная в [7]. Такая модель взаимодействия плазменных потоков с веществом включает в себя (для мишени) совместное решение уравнений механики сплошных сред с широкодиапазонными уравнениями состояния. Динамика плазменного потока описывается в рамках двухтемпературной одножидкостной модели. При описании воздействия излучения, генерируемого плазменным потоком, были учтены процессы фоторекомбинации, фотоионизации, тормозного излучения.

Для описания слабонелинейной стадии развития НКГ на поверхности мишени, обрабатываемой компрессионным плазменным потоком, был использован метод локальных преобразований [8]. Данный метод позволяет моделировать динамику поверхности раздела слоев без расчета течения в объеме сред, что значительно сокращает объем вычислений.

Термодинамические параметры материала и плазменного потока, скорость плазмы рассчитывались посредством программного комплекса, описанного в [7].

Результаты моделирования

Воздействие плазменными потоками, как и облучение интенсивными пучками заряженных частиц, приводит к сильному разогреву поверхностного слоя материала, что может сопровождаться его плавлением и испарением. По поведению вещества мишени можно выделить два режима обработки: докритический и закритический [1].

В докритическом режиме облучения вещество мишени плавится, но остается в конденсированном состоянии, а массовая скорость расплава не превышает 10 м/с. В закритическом режиме происходит формирование плазменного факела и его последующий разлет. Скорость свободной поверхности факела достигает более 10^3 м/с, ускорение – 10^9 – 10^{11} м/с². Переход от докритического к закритическому режиму носит пороговый характер. На рис. 1 приведена зависимость толщины расплава от плотности поглощенной энергии и времени воздействия плазменного потока. Закрашенная область относится к закритическому режиму обработки, который в первую очередь характеризуется интенсивным кратерообразованием. Жидкофазный массоперенос здесь затруднен вследствие испарения покрытия. В докритическом режиме обработки происходит сглаживание мелкомасштабных возмущений, а также рост длинноволновых возмущений за счет НКГ, массоперенос, обусловленный вихревой стадией НКГ и термокапиллярной сдвиговой неустойчивостью.

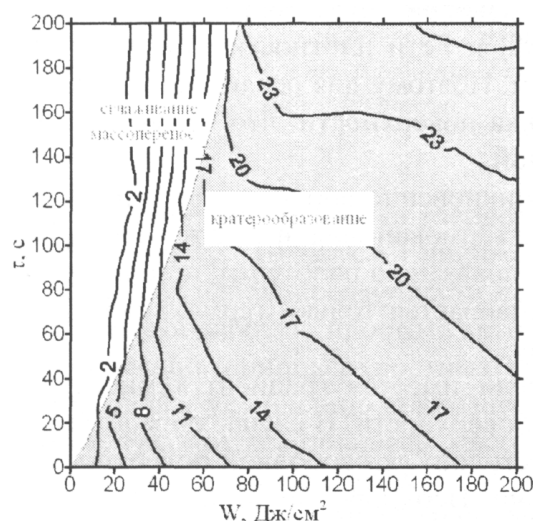


Рис. 1. Зависимость толщины расплава (в мкм) от плотности поглощенной энергии W и времени воздействия плазменного потока

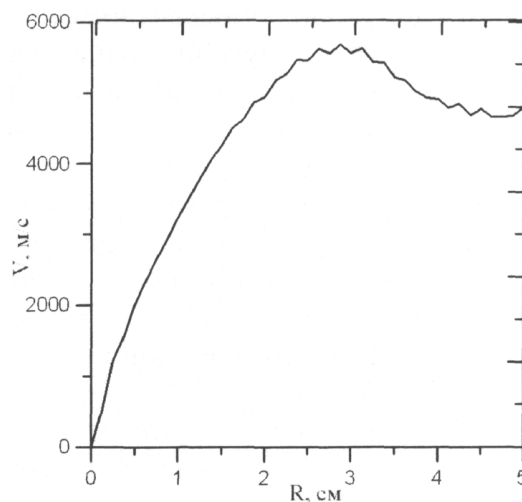


Рис. 2. Зависимость радиальной скорости от радиальной координаты для условий обработки: гелиевая плазма, с начальной скоростью $v_0 = 10^4$ м/с, температурой $T_0 = 2$ эВ и плотностью $\rho = 0,1\rho_0$

Как показано в [7], при длительной обработке материала плазмой устанавливается стационарное состояние плазмы вблизи поверхности. На рис. 2 приведена зависимость радиальной скорости от радиальной координаты. Скорость течения плазмы составляет несколько тысяч м/с при потоке энергии в центре $q = 3 \cdot 10^5$ Вт/см².

Оценим характерное время развития НКГ при таких данных. Плотность плазмы вблизи границы раздела $\rho_1 = 0,1$ кг/м³, плотность расплава алюминия $\rho_2 = 2700$ кг/м³, скорость плазменного потока $v = 3000$ м/с, длина волны $\lambda = 10$ мкм. Найдем число Атвуда $A = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1} = 0,9997$.

Тогда время развития НКГ $\tau = \frac{2}{\sqrt{1 - A^2} kv} = \frac{\lambda}{\sqrt{1 - A^2} \pi v} = 433 \cdot 10^{-8}$ с = 433 нм. Тогда за время обра-

ботки 100 мкс потоками плазмы [5] НКГ перейдет в турбулентную стадию. Стабилизирующими факторами является вязкость, поверхностное натяжение и конечная толщина расплава.

Рассмотрим эволюцию начального гармонического возмущения: начальная амплитуда $a_0 = 0,1$ мкм, длина волны $\lambda = 10$ мкм при условии обработки: гелиевая плазма с начальной скоростью $v_0 = 10^4$ м/с, температурой $T_0 = 1$ эВ и плотностью $\rho = 0,1\rho_0$. Тогда скорость плазменного потока (вдоль поверхности) возьмем $v = 3000$ м/с, плотность плазмы $\rho_1 = 0,1$ кг/м³, плотность расплава алюминия $\rho_2 = 2700$ кг/м³. Данные состояния плазмы получены из программного комплекса BETAIN2P+ [7].

На рис. 3 приведена зависимость амплитуды возмущения от времени. Момент времени 27 мкс соответствует плавлению металлической мишени. Толщина расплава в этом случае со-

ставляет 2–3 мкм. В результате развития НКГ первоначально происходит рост амплитуды. Затем рост амплитуды прекращается, когда она становится близка к глубине расплава. К этому времени формируются вихревые структуры. Метод локальных преобразований, изложенный в данной статье, не позволяет моделировать детали вихревых структур.

Рост амплитуды возмущения поверхности расплава за счет НКГ также приводит к неоднородному нагреву поверхности расплава и создает тем самым условия для развития сдвиговой термокапиллярной неустойчивости. При амплитуде возмущения 1,5 мкм и тепловому потоку, соответствующему обработке гелиевой плазмой с начальной скоростью $v_0 = 10^4$ м/с, температурой $T_0 = 2$ эВ и плотностью $\rho = 0,1\rho_0$, перепад температуры составляет 50 К.

Заключение

Проведено исследование НКГ при плазменной обработке металлических мишеней. Показано, что за время обработки (100 мкс) для диапазона длин волн 5–50 мкм течение становится существенно нелинейным и переходит в турбулентную стадию.

Развитие НКГ и другие возмущения профиля поверхности создают условия для развития сдвиговой термокапиллярной неустойчивости. Толщина области перемешивания может достигать нескольких мкм, она ограничена толщиной расплава.

Литература

1. О механизме образования микрократеров на поверхности мишени, облучаемой мощным электронным пучком / Н.Б. Волков, А.Е. Майер, К.А. Талала, А.П. Яловец // Письма в ЖТФ. – 2006. – Т. 32, № 10. – С. 20–29.
2. Формирование субмикронных цилиндрических структур при воздействии на поверхность кремния компрессионным плазменным потоком / В.В. Углов, В.М. Анищик, В.В. Асташинский и др. // Письма в ЖЭТФ. – 2001. – Т. 74, № 4. – С. 234–236.
3. Импульсное электронно-пучковое легирование сплава БТ6 цирконием путем перемешивания предварительно осажденной многослойной Zr/Ti пленки / В.П. Ротштейн, А.Б. Марков, Н. Шевченко и др. // Письма в ЖТФ. – 2008. – Т. 34, № 20. – С. 65–72.
4. Динамика поверхностных слоев многослойных мишеней облучаемых мощными электронными пучками / Н.Б. Волков, А.Я. Лейви, А.Е. Майер, К.А. Талала, А.П. Яловец // Физика экстремальных состояний вещества. – Черноголовка: ИПХФ РАН, 2007. – С. 70–73.
5. Гершуни, Г.З. Конвективная неустойчивость несжимаемой жидкости / Г.З. Гершуни, Е.М. Жуховицкий. – М.: Наука, 1972. – С. 385.
6. Термокапиллярная конвекция в мишени, облучаемой интенсивным пучком заряженных частиц / Н.Б. Волков, А.Я. Лейви, К.А. Талала, А.П. Яловец // ЖТФ. – 2010. – Т. 80, № 4. – С. 52–58.
7. Leyvi A.Ya. The dynamics of metal target surface at irradiation by intense plasma streams // A.Ya. Leyvi, K.A. Talala, A.P. Yalovets // Proceedings of 10-th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows. – Tomsk, 2010. – P. 173–176.
8. Волков Н.Б. Нелинейная динамика контактной границы сплошных сред с различной плотностью / Н.Б. Волков, А.Е. Майер, А.П. Яловец // ЖТФ. – 2003. – Т. 73, № 3. – С. 1–9.

Поступила в редакцию 11 сентября 2012 г.

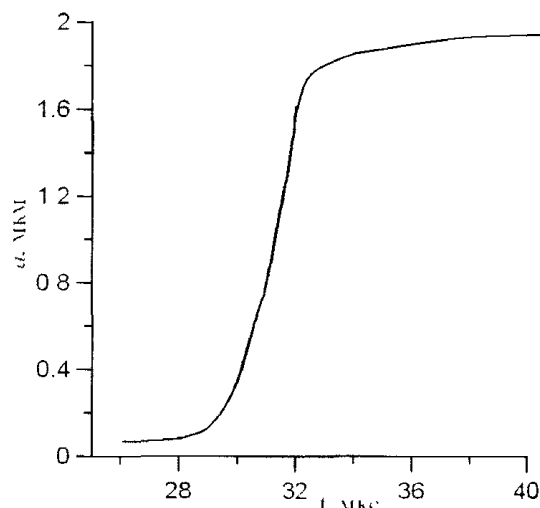


Рис. 3. Зависимость амплитуды возмущения от времени для условий обработки: гелиевая плазма с начальной скоростью $v_0 = 10^4$ м/с, температурой $T_0 = 2$ эВ и плотностью $\rho = 0,1\rho_0$.

MECHANISM ANALYSIS OF A LIQUID-PHASE MASS-TRANSFER SUBSTANCE AT PLASMA PROCESSING OF A SOLID BODY

X.A. Talala¹, A.Ya. Leyvi², A.P. Yalovets³

A Mass-transfer process is an important factor in development of new properties of materials. The article considers Kelvin–Helmholtz instability apart from basic mechanisms of mass-transfer. It is shown that development of Kelvin–Helmholtz instability and blooming create conditions for shift thermocapillary instability development, a depth of a convective zone may reach several microns, it is limited to melt depth.

Keywords: plasma, plasma processing, mass-transfer, Kelvin–Helmholtz instability, compression plasma flows, material modification.

References

1. Volkov N.B., Maier A.E., Talala K.A., Yalovets A.P. *Pis'ma v ZhTF*. 2006. Vol. 32, no. 10. pp. 20–29. (in Russ.).
2. Uglov V.V., Anishchik V.M., Astashinskii V.V. *et al.* *Pis'ma v ZhETF*. 2001. Vol. 74, no. 4. pp. 234–236. (in Russ.).
3. Rotshtein V.P., Markov A.B., Shevchenko N., Reuther H., Oskomov K.V., Shulov V.A. *Pis'ma v ZhTF*. 2008, Vol. 34, no. 20. pp. 65–72. (in Russ.).
4. Volkov N.B., Leivi A.Ya., Maier A.E., Talala K.A., Yalovets A.P. *Fizika ekstremal'nykh sostoyaniy veshchestva*. Chernogolovka: IPKhF RAN, 2007. pp. 70–73. (in Russ.).
5. Gershuni G.Z., Zhukhovitskii E.M. *Konvektivnaya neustoiichivost' neszhimaemoy zhidkosti* (Convective instability of incompressible liquid). Moscow: Nauka, 1972. 385 p. (in Russ.).
6. Volkov N.B., Leivi A.Ya., Talala K.A., Yalovets A.P. *ZhTF*. 2010. Vol. 80, no. 4. pp. 52–58. (in Russ.).
7. Leyvi A.Ya., Talala K.A., Yalovets A.P. The dynamics of metal target surface at irradiation by intense plasma streams. *Proceedings of 10-th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows*. Tomsk. 2010. pp. 173–176.
8. Volkov N.B., Maier A.E., Yalovets A.P. *ZhTF*. 2003. Vol. 73, no. 3. pp. 1–9. (in Russ.).

¹ Talala Xenia Anatoljevna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Department of Optics and Spectroscopy, South Ural State University.
E-mail: ktalala@yandex.ru

² Leyvi Artem Yacheslavovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), General and Experimental Physics Department, South Ural State University.
E-mail: leyvy@mail.ru

³ Yalovets Alexander Pavlovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Department of Optics and Spectroscopy, South Ural State University.
E-mail: yalovets@physicon.susu.ac.ru

СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФТОРИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК¹

К.А. Тельной², С.А. Созыкин³, В.П. Бескачко⁴

Методами квантово-химического моделирования изучаются строение и механические свойства комплексов, состоящих из углеродных нанотрубок с адсорбированными на их внешней поверхности атомами фтора при небольших содержаниях последнего. Обсуждается возможность образования фтором упорядоченных цепочечных структур, возникающих на заключительных этапах процесса фторирования углеродных нанотрубок.

Ключевые слова углеродные нанотрубки, галогенизация, фторирование, механические свойства, теория функционала плотности

Введение

Эксплуатация перспективных свойств углеродных нанотрубок (УНТ) в технических приложениях предполагает эффективную манипуляцию ими. Этому препятствует склонность УНТ к образованию пучков, что при создании нанокомпозитов, например, не позволяет добиться однородного распределения наночастиц по объему образца. Одно из решений проблемы диспергирования УНТ в органических растворителях состоит в модификации нанотрубок – изменения их структуры и свойств путем изменения их химического состава и строения. Примером такого подхода является галогенизация УНТ [1, 2] – синтез соединений УНТ с элементами VII группы таблицы Менделеева, в основном с фтором.

Как показывает эксперимент, максимальная степень фторирования нанотрубок соответствует стехиометрическому соотношению C_2F . В ряде работ [2–5] было показано, что галоген над поверхностью нанотрубки может образовывать упорядоченные структуры. Например, моделируя фторированные зигзаговидную (18,0) и кресловидную (10,10) УНТ, авторы статьи [4] определили наиболее стабильные упорядоченные конфигурации атомов фтора при максимальном его содержании на поверхности трубок. Оказалось, что они имеют цепочечную структуру, причем над поверхностью кресловидной нанотрубки эти цепочки располагаются вдоль оси трубки, а над зигзагообразной – вдоль винтовой линии, навитой на каркас УНТ. Последняя конфигурация менее стабильна, чем первая.

В реальных процессах фторирования насыщение поверхности может достигаться только в их конце, а вначале происходит последовательное и случайное заселение фтором поверхности УНТ. При этом неясно, каким образом изначально неупорядоченная структура из атомов фтора превращается в одну из упомянутых выше упорядоченных цепочечных структур. В частности, неясно, существует ли тенденция к образованию цепочек уже на ранних стадиях фторирования, при малом содержании фтора на поверхности трубки. Независимо от ответа на этот вопрос на любой стадии фторирования в модифицированной нанотрубке происходят изменения ее атомной и электронной структуры. Сейчас неизвестно, как это сказывается на свойствах рассматриваемых объектов и, в первую очередь, на механических свойствах, представляющих практический интерес для технологии нанополимеров. В настоящей работе делается попытка получить ответы на эти вопросы с помощью методов эмпирического компьютерного моделирования.

Модель и методика исследований

В качестве объекта исследования был выбран фрагмент УНТ (6,0) (диаметр углеродного каркаса 0,47 нм) с металлическим типом проводимости. Длина фрагмента равнялась 1,8 нм, что согласно работе [6] обеспечивает малое влияние на результаты граничных эффектов. Моделирование проводилось при помощи *ab initio* и полумэмпирических методов квантовой химии, реализованных в пакете Firefly [7], хорошо зарекомендовавшем себя при расчете свойств больших молекулярных систем.

¹ Работа выполнялась при финансовой поддержке Минобрнауки (государственное задание № 2012065)

² Тельной Константин Александрович – студент кафедры оптики и спектроскопии Южно-Уральского государственного университета
³ Созыкин Сергей Анатольевич – аспирант, кафедра общей и теоретической физики Южно-Уральского государственного университета
 E-mail: sergey.sozykin@gmail.com

⁴ Бескачко Валерий Петрович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики Южно-Уральского государственного университета

Для сокращения времени расчетов проводилась предварительная оптимизация геометрии моделей с помощью «быстрого» полумпирического метода PM3. Конфигурации, которые приводили к образованию связей F–C, окончательно оптимизировались с помощью первопринципного метода функционала электронной плотности с гибридным обменно-корреляционным функционалом B3LYP. С помощью этой процедуры были получены равновесные конфигурации систем «УНТ (6,0) + n атомов фтора», в которых число n варьировалось от одного до трех. Расчет механических свойств также проводился из первых принципов по методике, описанной нами ранее [6].

Оказалось, что вблизи углеродного каркаса атомы фтора находятся в равновесии, располагаясь напротив узлов углеродного каркаса на расстоянии 0,142 нм от атома углерода (в согласии с данными [28] 0,149 нм). Если занумеровать часть узлов, как показано на рис. 1, то положение присоединяемых атомов фтора будет удобно характеризовать указанием списка ($i, k, l, \dots$) номеров атомов углерода, над которыми они находятся. Например, список (1,5,9) означает, что три атома фтора располагаются над 1-м, 5-м и 9-м атомами углерода, показанными на рис. 1.

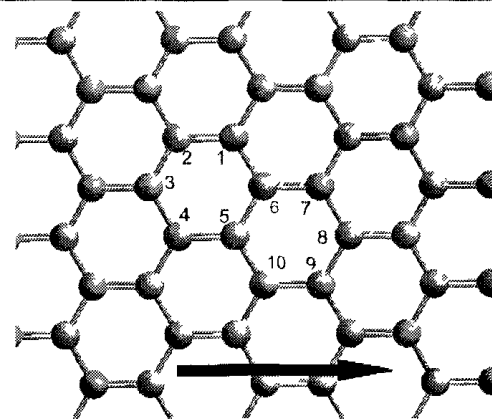


Рис. 1. Развертка моделируемого фрагмента УНТ (6,0) на плоскость. Цифры нумеруют атомы углерода, над которыми располагаются атомы фтора с внешней стороны трубки. Стрелкой обозначено направление оси трубки

Результаты

В табл. 1 представлены характеристики ряда экзодральных комплексов УНТ с одним, двумя и тремя атомами фтора. Здесь приведены разности ΔE_{total} полных энергий рассматриваемой и наиболее стабильной конфигурации атомов фтора при данном их количестве, величина электрического заряда Q_{trans} , перенесенного с трубки на i -й атом фтора (F_i) и изменение $\Delta L_{связи}(i-j)$ длин связей C–C между i -м и j -м атомами углерода в окрестности присоединенного атома фтора в энергетически наиболее выгодных конфигурациях.

Из табл. 1 видно, что если первый присоединенный к трубке атом находится напротив узла (7) углеродного каркаса (будем говорить – в узле (7)), тогда второй предпочитает локализоваться в ближайшем узле (6), связь которого с узлом (7) направлена вдоль оси трубки. Альтернативное его расположение в другом ближайшем узле (8) энергетически невыгодно. Более выгодным даже оказывается его расположение в узле (10), являющемся «третьим» соседом узла (7). Последнее, однако, может означать, что атомы F_7 и F_{10} уже слабо взаимодействуют друг с другом. При добавлении третьего атома к уже образовавшемуся «димеру» (6-7) наиболее выгодной оказывается конфигурация (5-6-7) в которой добавляемый атом является ближайшим соседом уже имеющихся двух. Новая связь (5-6) по необходимости направлена под углом к уже имеющейся связи (6-7). Видно, что образовавшийся «тример» является элементом цепочечных структур, рассмотренных в работах [3, 5, 8].

Величина электрического заряда Q_{trans} , перенесенного с трубки на атом фтора, во всех рассмотренных случаях мало зависит от числа и конфигурации присоединяемых атомов фтора и лежит в интервале (0,42–0,45) $|e|$, что близко к результату работы [8], где для случая адсорбции одного атома фтора она составила 0,41 $|e|$. В связи с этими результатами отметим, что для другого галогена, хлора, адсорбирующегося на внутренней поверхности УНТ, в работе [9] было обнаружено существенно большее перераспределение заряда ($\sim 1 |e|$).

В окрестности присоединенных атомов фтора наблюдается существенное удлинение связей C–C. При этом вблизи единичного атома фтора они удлиняются на 6–8 % (первое число относится к связям, ориентированным вдоль оси трубки, а вторая – под углом к ней), а при адсорбции двух и трех атомов этот диапазон составляет 8–11,5 % и 8–15,6 % соответственно. При адсорбции трех атомов фтора изменение геометрии не является локальным: сечение нанотрубки даже вблизи торцов модели отличается от окружности. Такое изменение длин связей и геометрии трубки в целом не может не повлиять на механические свойства УНТ – модули Юнга и сдвига. Результаты их расчета приведены в табл. 2 для рассмотренных выше равновесных конфигураций комплексов. Для чистой УНТ (6,0) полученное значение модуля Юнга хорошо согласуется с экспериментальными данными (0,95±0,13 ТПа [10]). Его модуль сдвига экспериментально пока не определен.

Теоретические оценки [11] для УНТ малых диаметров дают для модуля сдвига величину $\sim 0,3$ ТПа, которая монотонно увеличивается с увеличением диаметра трубки до значения $\sim 0,5$ ТПа.

Таблица 1

Исследованные состояния фторированной нанотрубки с адатомами фтора

Конфигурация	ΔE_{total} , эВ	Q_{nans} , (по Малликену), e			$\Delta L_{связи}$, %
(7)	0	$F_7 = -0,45$			(6-7) $\sim 6\%$ (7-8) $\sim 8\%$
(3,7)	1,55	$F_3 = -0,46$	$F_7 = -0,45$		
(6,7)	0	$F_6 = -0,44$	$F_7 = -0,43$		(6-7) $\sim 11,5\%$ (7-8) $\sim 8\%$
(8,7)	0,93	$F_7 = -0,43$	$F_8 = -0,42$		
(9,7)	1,96	$F_7 = -0,45$	$F_9 = -0,45$		
(10,7)	0,57	$F_1 = -0,44$	$F_2 = -0,43$		
(2,9)	1,55	$F_1 = -0,45$	$F_2 = -0,45$		
(5,6,7)	0	$F_5 = -0,42$	$F_6 = -0,42$	$F_7 = -0,42$	(6-7) $\sim 11,5\%$ (7-8) $\sim 8\%$ (5-6) $\sim 15,6\%$
(3,6,7)	0,13	$F_3 = -0,43$	$F_6 = -0,41$	$F_7 = -0,42$	
(4,6,7)	1,33	$F_4 = -0,43$	$F_6 = -0,42$	$F_7 = -0,45$	
(10,6,7)	1,17	$F_6 = -0,43$	$F_7 = -0,43$	$F_{10} = -0,44$	

Таблица 2

Модули Юнга и сдвига для наиболее стабильных расположений фтора

Число атомов фтора	Модуль Юнга, ТПа	Модуль сдвига, ТПа
0	1,08	0,500
1	1,06	0,504
2	1,02	0,509
3	1,27	0,383

Из табл. 2 видно, что упругие модули мало изменяются при добавлении к трубке одного-двух атомов фтора (то есть, при концентрации фтора $\sim 1-2$ ат. %). Значительное изменение (увеличение модуля Юнга на 25 % и уменьшение модуля сдвига примерно на ту же величину) начинается при добавлении третьего атома (при c_F 3 ат. %). Такое изменение, очевидно, связано с существенной перестройкой геометрии комплекса, рассмотренной выше.

Заключение

Таким образом, выполненные в настоящей работе расчеты показывают, что:

- 1) уже на начальных этапах процесса фторирования следует ожидать образования на поверхности УНТ кластеров фтора, имеющих геометрию, способствующую дальнейшему формированию цепочечных структур;
- 2) даже при малых содержаниях фтора на поверхности УНТ существенно изменяется ее геометрия и упругие свойства.

Литература

1. Nyden, M.R. Calculations of the energy of mixing carbon nanotubes with polymers / M.R. Nyden, S.I. Stoliarov // Polymer. – 2008. – Vol. 49. – P. 635–541.
2. Margulisa, V.I.A. Chemisorption of single fluorine atoms on the surface of zigzag single-walled carbon nanotubes: A model calculation / V.I.A. Margulisa, E.E. Muryumin // Physica B. – 2007. – Vol. 390. – P. 134–142.
3. Bettinger, H.F. Experimental and computational investigations of the properties of fluorinated single-walled carbon nanotubes / H.F. Bettinger // Physical Chemistry. – 2003. – Vol. 4. – P. 1283–1289.
4. Kudin, K.N. Fluorinated single-wall carbon nanotubes / K.N. Kudin, H.F. Bettinger, G.E. Scuseria // Physical Review B. – 2001. – Vol. 63. – P. 045413.
5. Pattern formation on carbon nanotube surfaces / C.P. Ewels, G.V. Lier, J.-C. Charlier *et al.* // Physical Review Letters. – 2006. – Vol. 96. – P. 216103.

6. Бескачко, В.П. Механические свойства однослойных углеродных нанотрубок / В.П. Бескачко, С.А. Созыкин, Е.Р. Соколова // Все материалы. Энциклопедический справочник. – 2010. – № 7. – С. 19–23.
7. Granovsky, A. A., Firefly version 7.1.G / A. A. Granovsky // [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)
8. Pan, H. *Ab initio* study of F- and Cl-functionalized single wall carbon nanotubes / H. Pan, Y.P. Feng, J.Y. Lin // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2006. – Vol. 18. – P. 5175–5184.
9. Созыкин, С.А. Взаимодействие углеродных нанотрубок (7,7) и (8,8) с внедренными атомами / С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2010. – Вып. 2. – № 9(185). – С. 87–91.
10. Asaka, K. Atomistic dynamics of deformation, fracture, and joining of individual single-walled carbon nanotubes / K. Asaka, T. Kizuka // *Physical review B*. – 2005. – Vol. 72. – P. 115431.
11. Tserpes, K. Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes / K. Tserpes, P. Papanikos // *Composites: Part B*. – 2005. – Vol. 36. – P. 468–477.

Поступила в редакцию 18 октября 2012 г.

STRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF FLUORINATED CARBON NANOTUBES

K.A. Telnoy¹, S.A. Sozykin², V.P. Beskachko³

Structure and mechanical properties of complexes consisting of carbon nanotubes adsorbed on their outer surface small content of fluorine atoms are studied by methods of quantum-chemical modeling. Possibility of fluorine ordered chain structures that arise in the final stages of fluorination of carbon nanotubes is discussed.

Keywords: carbon nanotubes, halogenation, fluorination, mechanical properties, density functional theory.

References

1. Nyden M.R., Stoliarov S.I. Calculations of the energy of mixing carbon nanotubes with polymers. *Polymer*. 2008. Vol. 49. p. 635–541.
2. Margulisa V.I.A., Muryumin E.E. Chemisorption of single fluorine atoms on the surface of zigzag single-walled carbon nanotubes: A model calculation. *Physica B*. 2007. Vol. 390. pp. 134–142.
3. Bettinger H.F. Experimental and computational investigations of the properties of fluorinated single-walled carbon nanotubes. *Physical Chemistry*. 2003. Vol. 4. pp. 1283–1289.
4. Kudin K.N., Bettinger H.F., Scuseria G.E. Fluorinated single-wall carbon nanotubes. *Physical Review B*. 2001. Vol. 63. p. 045413.
5. Ewels C.P., Lier G.V., Charlier J.-C., Heggie M.I., Briddon P.R. Pattern formation on carbon nanotube surfaces. *Physical Review Letters*. 2006. Vol. 96. p. 216103.
6. Beskachko V.P., Sozykin S.A., Sokolova E.R. *Mekhanicheskie svoistva odnosloinykh uglerodnykh nanotrubok. Vse materialy. Entsiklopedicheskiy spravochnik* (The mechanical properties of single-walled carbon nanotubes. All materials. Encyclopedic Handbook.). 2010. no. 7. pp. 19–23.
7. Granovsky A. A. Firefly version 7.1.G. [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)
8. Pan H., Feng Y.P., Lin J.Y. *Ab initio* study of F- and Cl-functionalized single wall carbon nanotubes. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2006. Vol. 18. pp. 5175–5184.
9. Sozykin S.A., Beskachko V.P. Vzaيمodeistvie uglerodnykh nanotrubok (7,7) i (8,8) s vnedrennymi atomami (Interaction of carbon nanotubes (7,7) and (8,8) with embedded atoms). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2010. Issue 2. no. 9(185). pp. 87–91. (in Russ.).
10. Asaka K., Kizuka T. Atomistic dynamics of deformation, fracture, and joining of individual single-walled carbon nanotubes. *Physical review B*. 2005. Vol. 72. pp. 115431.
11. Tserpes K., Papanikos P. Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes. *Composites: Part B*. 2005. Vol. 36. pp. 468–477.

¹ Telnoy Konstantin Aleksandrovich is Undergraduate Student, Department of Optics and Spectroscopy, South Ural State University.

² Sozykin Sergey Anatolevich is Post-graduate student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.
E-mail: sergey.sozykin@gmail.com

³ Beskachko Valeriy Petrovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

УСТОЙЧИВОСТЬ ПОЛНОСВЯЗНОЙ И ЗВЁЗДНОЙ СТРУКТУР НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ¹

Т.Н. Хохлова²

Представлены результаты исследования устойчивости нейронных сетей полносвязной и звёздной структуры, описываемых матричным дифференциальным уравнением с запаздыванием. Посредством метода конуса устойчивости получены теоретические выводы для анализа устойчивости исследуемых моделей в зависимости от значений параметров в случае произвольного количества нейронов в сети.

Ключевые слова: дифференциальное уравнение с запаздыванием, асимптотическая устойчивость, нейронная сеть.

Рассмотрим вопрос об устойчивости таких стандартных конфигураций нейронных сетей, как полносвязная сеть и звезда. Пользуясь методом конуса устойчивости [1], получим для этих моделей необходимые и достаточные условия устойчивости и неустойчивости, определяемые значениями коэффициентов моделей и количеством нейронов в сети. Распространённой моделью, описывающей динамику нейронных сетей, является модель

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

где $x(t)$ – вектор состояния системы, A и B – матрицы размером $n \times n$, $n > 2$, $\tau > 0$ – запаздывание. Метод конуса устойчивости применим для этой модели в случае, если A и B – совместно триангулируемые матрицы.

Это уравнение моделирует динамику нейронных сетей Хопфилда [2]. Матрица A описывает собственную реакцию нейрона на внешнее воздействие, а матрица B характеризует реакцию нейрона, связанную с его взаимодействием с соседними нейронами.

В полносвязной системе нейронов изменение состояния конкретного нейрона зависит от состояния всех остальных нейронов сети. Граф, соответствующий данному соединению нейронов, изображён на рис. 1.

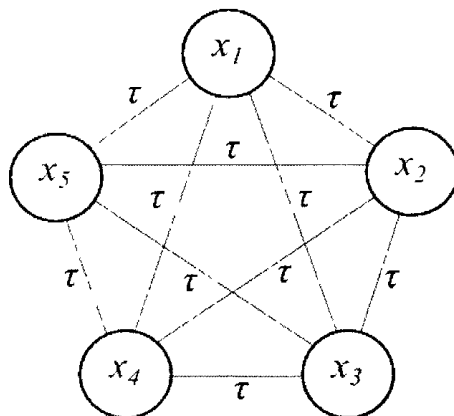


Рис. 1. Полносвязная система нейронов

Полагаем, что взаимодействие нейрона с самим собой происходит мгновенно, а с остальными нейронами сети – с запаздыванием $\tau > 0$. Тогда динамику взаимодействия нейронов в данной сети можно описать уравнением (1) с матрицами

$$A = E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & -b & \dots & -b \\ -b & 0 & \dots & -b \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -b & -b & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

¹ Работа поддержана грантом 1 1711.2011 Министерства образования и науки

² Хохлова Татьяна Наилевна – аспирант кафедры математического анализа, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: tanechkakhokhlova@gmail.com

Для уравнения (1) с матрицами (2) верна следующая теорема.

Теорема 1. Пусть матрицы имеют размер $n \times n, n > 2$.

1. При $-\frac{1}{n-1} < b < \frac{1}{n-1}$ уравнение (1) с матрицами (2) асимптотически устойчиво при любом $\tau > 0$.
2. При $b > \frac{1}{n-1}$ или $b < -1$ уравнение (1) с матрицами (2) неустойчиво при любом $\tau > 0$.
3. При $-1 < b < -\frac{1}{n-1}$ существует $\tau_0 > 0$, такое, что уравнение (1) с матрицами (2) устойчиво при $\tau \in (0, \tau_0)$ и неустойчиво при $\tau \in (\tau_0, +\infty)$.

Теорема 1 позволяет описать области устойчивости и неустойчивости исследуемой сети в зависимости от числа нейронов и запаздывания τ .

Теперь обратимся к звёздной сети. В этом случае в центре находится один нейрон, который связан со всеми остальными, причём сигнал центрального нейрона передаётся к остальным с запаздыванием τ и интенсивностью a , а от периферии к центру с запаздыванием τ и интенсивностью b . Граф, соответствующий данному соединению, изображен на рис. 2.

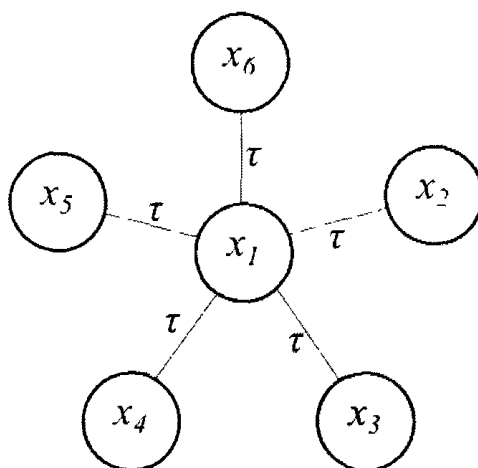


Рис. 2. Соединение нейронов в виде звезды

Данная система n -го порядка описывается уравнением (1) с матрицами

$$A = E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 0 & b & \dots & b \\ a & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Для уравнения (1) с матрицами (3) верна следующая теорема.

Теорема 2. Пусть матрицы имеют размер $n \times n, n > 2$.

1. При $0 < ab < \frac{1}{n-1}$ уравнение (1) с матрицами (3) асимптотически устойчиво при любом $\tau \geq 0$.
2. При $ab > \frac{1}{n-1}$ уравнение (1) с матрицами (3) неустойчиво при любом $\tau \geq 0$.
3. При $ab < 0$ и $\sqrt{(n-1)|ab|} < |\sin \omega(\tau)|$, где $\omega(\tau)$ есть наименьший положительный корень уравнения $\tau = \omega \operatorname{tg}(\omega)$, уравнение (1) с матрицами (3) асимптотически устойчиво.
4. При $ab < 0$ и $\sqrt{(n-1)|ab|} > |\sin \omega(\tau)|$ уравнение (1) с матрицами (3) неустойчиво.

На представленных графиках (рис. 3, 4) в плоскости параметров (a, b) изображены области устойчивости и неустойчивости звёздной конфигурации нейронной сети для различного числа нейронов n . Устойчивость в первой и третьей четвертях диагностируется теоретически, а во второй и четвёртой определяется численно при разных значениях запаздывания.

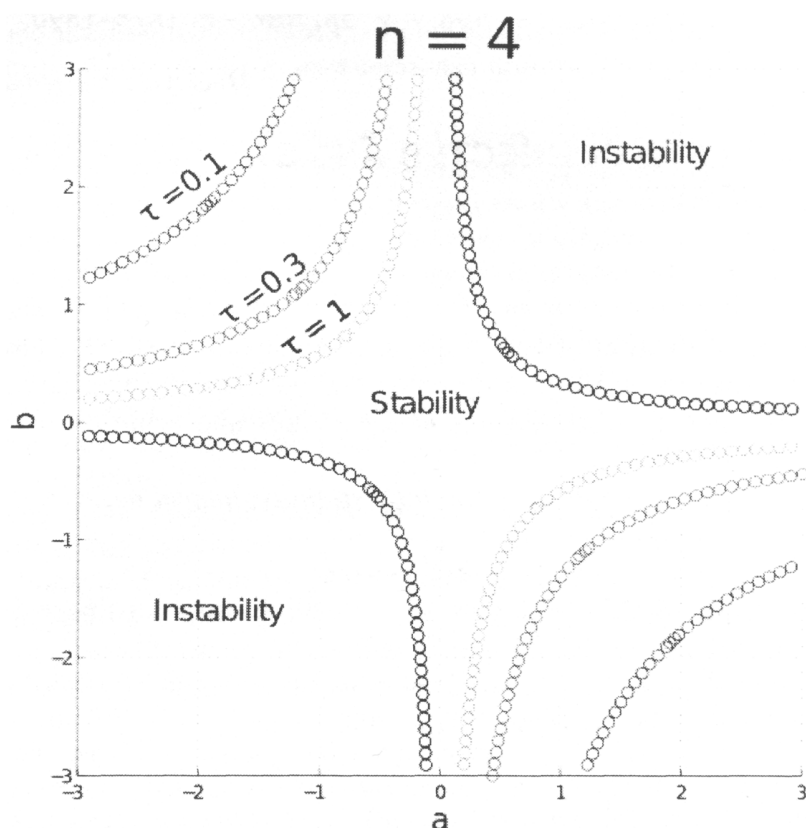


Рис. 3. Области устойчивости звёздной нейронной сети из четырёх нейронов

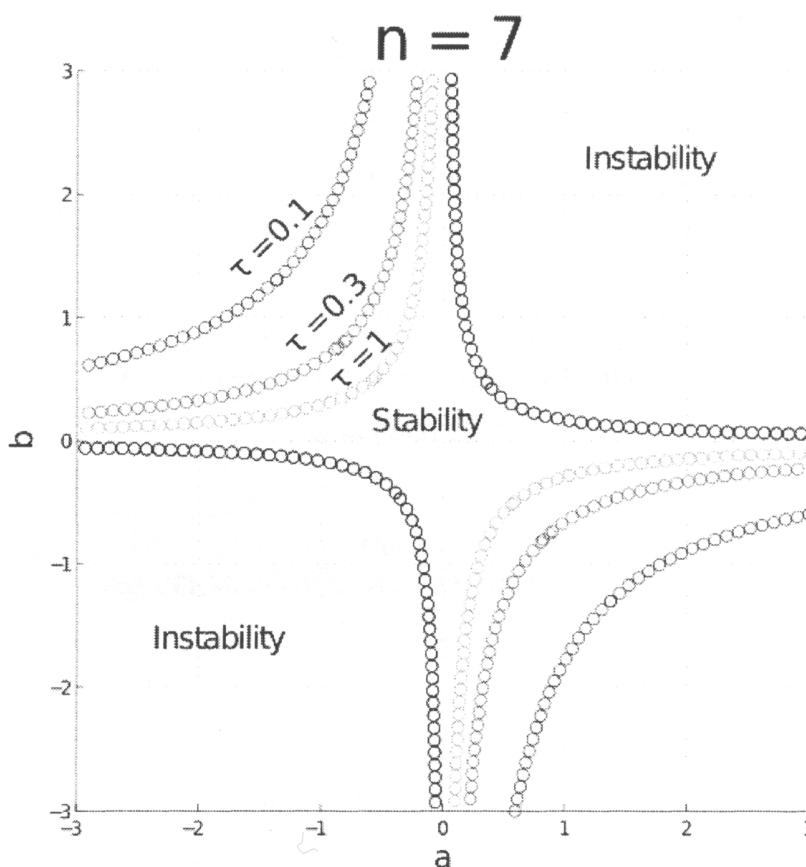


Рис. 4. Области устойчивости звёздной нейронной сети из семи нейронов

Литература

1. Khokhlova, T.N. Stability cone for linear delay differential matrix equation / T.N. Khokhlova, M.M. Kipnis, V.V. Malygina // *Appl. Math. Letters*. – 2011. – V. 24. – P. 742–745.
2. Dreissche, van den P. Global attractivity in delayed Hopfield neural network models / P. van den Dreissche, X. Zou // *SIAM J. Appl. Math.* – 1998. – V. 58, №6. – P. 1878–1890.

Поступила в редакцию 6 сентября 2012 г.

STABILITY OF COMPLETE-CONNECTED AND STELLAR STRUCTURE OF NEURAL NETWORKS

T.N. Khokhlova¹

Results on stability investigation of full graph and star neural networks described by matrix delay differential equation are given. Due to stability cone method theoretical results for stability analysis of models discussed are obtained for different parameter values and arbitrary number of neurons in the network.

Keywords: delay differential equation, asymptotic stability, neural network.

References

1. Khokhlova T.N., Kipnis M.M., Malygina V.V. Stability cone for linear delay differential matrix equation. *Appl. Math. Letters*. 2011. Vol. 24. pp. 742–745.
2. Dreissche, van den P., Zou X. Global attractivity in delayed Hopfield neural network models. *SIAM J. Appl. Math.* 1998. Vol. 58, no. 6. pp. 1878–1890.

¹ Khokhlova Tatyana Nailevna is Post-graduate student, Mathematical Analysis Department, South Ural State University.
E-mail: tanechkakhokhlova@gmail.com

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 8 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 (не более 500 знаков с пробелами), 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, аннотация (или 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, масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации, 11 pt. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 пт, межстрочный интервал – одинарный.

5. Формулы. Стилль 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. Если рисунок создан не средствами MS Office, то 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, физический факультет, кафедра ОиТФ, ответственному редактору профессору Бескачко Валерию Петровичу. [Prof. Beskachko Valeriy Petrovich, General and Theoretical Physics Department, SUSU, 76, Lenin prospekt, Chelyabinsk, Russia, 454080].

8. Адрес электронной почты: vestnik@physics.susu.ac.ru

9. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта ЮУрГУ (<http://www.susu.ac.ru>) следуя ссылкой: «Наука», «Вестник ЮУрГУ», «Серии».

10. Журнал распространяется по подписке. Подписной индекс журнала «Вестник ЮУрГУ», серия «Математика. Механика. Физика»: 29211, каталог «Пресса России». Интернет-каталог агентства «Книга-Сервис», подписной индекс: E29211. Электронная версия: см. www.elibrary.ru.

**ВЕСТНИК
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 34 (293) 2012**

**Серия
«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»
Выпуск 7**

Редактор Н.М. Лезина

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 22.10.2012. Формат 60×84 1/8. Печать графартная.
Усл. печ. л. 23,25. Тираж 500 экз. Заказ 258/511.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.