



# ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

2018 T. 10, №4

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

# СЕРИЯ

# «МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»

## Решением ВАК России включен в Перечень рецензируемых научных изданий

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

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

#### Редакционная коллегия

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

#### Редакционный совет

д.т.н., профессор Богомолов А.В. (Государственный научный центр Российской Федерации – Федеральный медицинский биофизический центр имени А.И. Бурназяна, г. Москва)

- д.ф.-м. н. Бржезинская М.М. (Берлинский центр материалов и энергии им. Гельмгольца, г. Берлин, Германия)
- д.ф.-м.н., профессор Бровко Г.Л. (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва)
- профессор Гуидетти Д. (Болонский университет, г. Болония, Италия)

д.ф.-м.н., профессор **Жуковский В.И.** (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва) к.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Заляпин И.В.** (Университета Невады, г. Рино, США)

д.ф.-м.н., профессор Короткий А.И. (Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, г. Екатеринбург)

д.ф.-м.н., член-корреспондент РАН, профессор Физики и Оптики Зельдович Б.Я. (КРЕОЛ, Университет Центральной Флориды, г. Орландо, США)

Ph. D., профессор Ким Джейван (Kim Jaewan, Корейский институт передовых исследований KIAS, г. Сеул, Южная Корея)

Ph. D., профессор Ким Кишик (Kim Kisik, INHA-Университет, г. Инчон, Южная Корея)

д.ф.-м.н., профессор Кундикова Н.Д. (Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург)

д.ф.-м.н., профессор Меньших В.В. (Воронежский институт МВД Российской Федерации, г. Воронеж)

д.ф.-м.н., профессор Пинчук С.И. (Университет штата Индиана, г. Блумингтон, США)

Ph. D., ассистент-профессор Пузырев Е.С. (Университет Вандербильта, г. Нэшвилл, США)

д.т.н., профессор Равшанов Н.К. (Ташкентский университет информационных технологий, г. Ташкент, Узбекистан)

д.т.н., профессор Уткин Л.В. (Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург) Prof. dr. ir. Ферпуст И. (Католический университет, г. Лёвен, Бельгия)

д.ф.-м.н., Ph. D., профессор Штраус В.А. (Университет Симона Боливара, г. Каракас, Венесуэла)

© Издательский центр ЮУрГУ, 2018



**BULLETIN** of the south ural state university series



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

2018

Vol. 10. no. 4

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

### South Ural State University

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

#### **Editorial Board**

S.A. Zagrebina, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E.V. Golubev, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

V.P. Beskachko, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

V.I. Zalyapin, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

Yu.M. Kovalev, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

#### **Editorial Counsil**

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

# СОДЕРЖАНИЕ

# Математика

ГЕРЕНШТЕЙН А.В., МИДОНОЧЕВА Н.С. Математическая модель движения поршня под воздействием горящего газа с учетом зазора между поршнем и трубой	5
КАРАЧИК В.В. Об одном представлении функции Грина задачи Дирихле для бигармониче- ского уравнения в шаре	13
PYATKOV S.G., KVICH E.S. Recovering of Lower Order Coefficients in Forward-Backward Parabolic Equations	23
SAFONOV E.I. On Determination of Minor Coefficient in a Parabolic Equation of the Second Order	30
УХОБОТОВ В.И., МАКСАКОВА П.И. Об одной игровой задаче управления точками вбли- зи поверхности луны	41

# Механика

Физика	
ХОХЛОВ А.В. Особенности поведения поперечной деформации и коэффициента Пуассона изотропных реономных материалов при ползучести, описываемые линейной теорией вязко- упругости	65
ТАРАНЕНКО П.А., ПРОНИНА Ю.О., БЕРЕЗИН И.Я., АБЫЗОВ А.А. Стендовые исследова- ния виброзащитных устройств при случайном внешнем нагружении	58
КОВАЛЕВ Ю.М., МАГАЗОВ Ф.Г., ШЕСТАКОВСКАЯ Е.С. Равновесная математическая модель многокомпонентных гетерогенных сред	49

ВЕРХОВЫХ А.В., МИРЗОЕВ А.А., МИРЗАЕВ Д.А. Ab initio моделирование влияния крем	1-
ния на образование карбида Fe <sub>3</sub> C в ОЦК-железе	78

# CONTENTS

# **Mathematics**

HERREINSTEIN A.V., MIDONOCHEVA N.S. Mathematical Simulation of Pneumatic System with a Clearance between the Piston and the Pipe
KARACHIK V.V. On Representation of Green's Function of the Dirichlet Problem for Biharmonic Equation in a Ball
PYATKOV S.G., KVICH E.S. Recovering of Lower Order Coefficients in Forward-Backward Parabolic Equations
SAFONOV E.I. On Determination of Minor Coefficient in a Parabolic Equation of the Second Order
UKHOBOTOV V.I., MAKSAKOVA P.I. On a Game Problem for Point Control near the Surface of the Moon

# Mechanics

KOVALEV Yu.M., MAGAZOV F.G., SHESTAKOVSKAYA E.S. Equilibrium Mathematical Model of Multicomponent Heterogeneous Media	9
TARANENKO P.A., PRONINA Yu.O., BEREZIN I.Ya., ABYZOV A.A. Benchmark Trials of Anti-Vibration Devices under Random External Loading	8
KHOKHLOV A.V. Behavior Types and Features of Lateral Strain and Poisson's Ratio of Isotropic Rheonomous Materials under Creep Conditions Described by the Linear Theory of Viscoelasticity 6	5
Physics	

VERKHOVYKH A.V., MIRZOEV A.A.,	MIRZAEV D.A.	Ab Initio	Simulation o	of Silicon	Influ-
ence on Fe <sub>3</sub> C Carbide Formation in BCC-I	ron				

УДК 517.95:532.5 + 532.511

# МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВИЖЕНИЯ ПОРШНЯ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ГОРЯЩЕГО ГАЗА С УЧЕТОМ ЗАЗОРА МЕЖДУ ПОРШНЕМ И ТРУБОЙ

# А.В. Геренштейн, Н.С. Мидоночева

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация E-mail: gerenshteinav@susu.ru

> Рассматриваются математические модели пневматической системы, состоящей из трубки, закрытой с одной стороны и открытой с другой. В трубке находится поршень, ограничивающий некоторый объем сжатого газа. Для нахождения параметров движения поршня под действием давления расширяющегося газа строится математическая модель системы несколькими способами: с помощью обыкновенных дифференциальных уравнений и с помощью уравнений в частных производных. В последнюю включаются такие уравнения, как уравнение движения, уравнение неразрывности и уравнение сохранения энергии, т. е. уравнения газовой динамики. Кроме того, определяются соответствующие краевые условия. При этом учитывается возможный нагрев газа и возможные потери некоторого объема газа сквозь имеющийся зазор между цилиндром и поршнем. Все уравнения, входящие в состав математической модели, приводятся к безразмерной форме. Для выполнения расчетов используются методы конечных разностей и характеристик, при которых все частные производные в уравнениях заменяются конечными разностями в узлах некоторой сетки. По имеющемуся шаблону находится приближенное значение каждого уравнения в каждом узле сетки по пространству, затем происходит переход на следующий временной слой. Расчеты выполняются до тех пор, пока поршень не достиг открытого конца трубы или до тех пор, пока поршень не начал замедляться. Затем проводится сравнение результатов, полученных с помощью рассматриваемых методов, по критериям быстродействия и точности, а также даются рекомендации относительно целесообразности использования каждого метода построения математической модели.

> Ключевые слова: математическая модель; сжатый газ; пневматическая система.

#### Введение

Существующие методы расчета параметров пневматических систем не являются полностью приемлемыми. Связано это с тем, что при расчетах математических моделей точными аналитическими методами можно решить лишь некоторые простейшие задачи. Для решения более сложных задач применяются различные численные методы. Численный метод позволяет получить лишь приближенное решение задачи. Методы сравниваются между собой по критериям точности и быстродействия. Следовательно, некоторые методы решений являются более



предпочтительными, а некоторые – менее предпочтительными. Необходимо исследовать каждый метод и принять решение о его предпочтительности.

В данной работе рассматривается класс систем «поршень-труба» (рис. 1), предназначенных для создания

Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика» 2018, том 10, № 4, С. 5–12

ускоренного движения поршня. В общем виде подобного рода системы состоят из двух основных частей: герметичного с одной стороны цилиндра, который содержит сжатый и подогреваемый газ, и подвижного поршня, который под действием давления сжатого газа приводится в движение внутри цилиндра. В этом случае скорость поршня до достижения им конца цилиндра (до достижения максимальной скорости) имеет принципиальное значение (рис. 1) [1–10].

Кроме того, необходимо учитывать возможный нагрев газа в процессе движения поршня, а также возможный зазор между цилиндром и поршнем.

Цель работы – сравнить результаты, полученные с помощью рассматриваемых методов по критериям быстродействия и точности, и дать рекомендации относительно целесообразности использования каждого метода.

#### 1. Обозначения

u = u(x,t) – смещение частицы смеси в момент времени t.  $\beta = 1 + \partial u/\partial x$  – деформация (удлинение) частицы смеси.  $v = \partial u/\partial t$  – скорость частицы смеси. T – температура газа (Кельвин).  $c_p$  – удельная теплоемкость газа при постоянном давлении.  $c_v$  – удельная теплоемкость газа при постоянном объеме.  $\rho$  – плотность частицы смеси в момент времени t.  $\rho_0$  – плотность частицы смеси в момент времени t = 0,  $\rho\beta = \rho_0$ . p – давление в частице газа в момент времени t.  $R = c_p - c_v$  – универсальная газовая постоянная.  $\gamma = c_p/c_v$  – отношение удельных теплоемкостей. q – удельная мощность тепла, выделяемого сгорающим порохом.  $q_s$  – удельная мощность тепла, выделяемого внешним источником. F – площадь сечения трубы (и поршня). P – давление на поршень справа.  $l_0$  – начальная длина участка трубы, занятой смесью. M – масса поршня. v – доля массы твердой фазы (пороха, v = v(t) – заданная функция времени).

# 2. Математическая модель задачи, построенная с помощью уравнений в частных производных

1.1. С учетом нагрева газа

В основе данной математической модели лежат уравнения газовой динамики [6-10]:

1.1.1. Уравнение неразрывности (совместности)

Имеет место:

$$\beta = 1 + u_x, v = u_t.$$

Ввиду равенства смешанных производных (предполагая их непрерывность) получим

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial x}.$$
(1)

1.1.2. Уравнение движения

$$\rho_0 \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0.$$
<sup>(2)</sup>

1.1.3. Уравнение энергии

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( (1 - \nu) c_{\nu} T \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\nu^2}{2} \right) + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x} (p\nu) = q\nu + q_s.$$
(3)

Учитывая уравнения совместности, движения и Клапейрона, получим

$$\frac{1}{(\gamma-1)}\frac{\partial}{\partial t}(p\beta) + \frac{1}{\rho_0}p\frac{\partial}{\partial t}\beta = q\nu + q_s \tag{4}$$

или, дифференцируя произведение, деля на рв и приводя подобные, получим

$$\frac{\gamma}{\beta}\frac{\partial\beta}{\partial t} + \frac{1}{p}\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\rho_0\left(q\nu + q_s\right)(\gamma - 1)}{p\beta}$$

1.1.4. Начальные и краевые условия

В начальный момент времени (при t=0) в любом сечении плотность, давление и температура одна и та же, а скорость и деформация равны нулю, поэтому (рис. 2)

$$\rho(x,0) = \rho_0, p(x,0) = p_0, v(x,0) = 0, \beta(x,0) = 1$$

На левом конце ( *x* = 0 ) газ прилегает вплотную к закрытому концу трубы и неподвижен:

$$v(0,t) = 0$$



На правом конце (  $x = l_0$  ) поршень движется под действием давления газа и противодавления. Поэтому при  $x = l_0$  имеем

$$\beta = \beta(l_0, t), v = v(l_0, t), p = p(l_0, t)$$
 и  $Mv_t = (p - P)F.$  (6)

1.2. С учетом зазора между цилиндром и поршнем

Рассмотрим пневматическую систему, изображенную на рис. 1. В данной системе поршень неплотно прилегает к стенкам трубки, и возникает промежуток (зазор) между поршнем и трубкой (например, при нарезном канале ствола, поршне нестандартной толщины и др.).

Заметим, что в начальный момент времени газ между поршнем и трубкой не просачивается, эта проблема возникает лишь после начала движения поршня. Имеем, что при движении поршня сквозь зазор в единицу времени просачивается некоторый объем газа. При этом уравнения математической модели не меняются, корректируются лишь методы расчета.

Также необходимо отметить, что расчет параметров движения поршня происходит в одномерном пространстве, и поэтому не учитывается характер течения газа сквозь зазор, а учитываются лишь потери некоторых объемов газа. Так, некоторый объем газа, вытекая через зазор, перестает участвовать в продвижении поршня вперед, и, следовательно, параметры движения поршня меняются.

# 3. Математическая модель задачи, построенная с помощью обыкновенных дифференциальных уравнений

t – время, u – координата поршня (u(0)=1), q=q(t) – мощность тепла, выделяемая единицей массы горящего пороха, v – скорость поршня (v(0)=0), p – давление,  $p(0)=1,c_v$  – удельная теплоемкость при постоянном давлении,  $\gamma$  – отношение удельных теплоемкостей, m – сумма масс газа и пороха, M – масса поршня,  $\mu = m/(\gamma M)$ ,  $p_1$  – противодавление на поршне.  $a^2 = \gamma p/\rho = \gamma p \beta/\rho_0$  – квадрат скорости звука, v – начальная доля массы еще несгоревшего пороха,  $\lambda$  – показатель скорости сгорания пороха, F – площадь сечения трубы.

$$\frac{du}{dt} = v,$$

$$M \frac{dv}{dt} = F(p - p_1).$$
(7)

При равномерном расширении газ рассматривается как единое целое, поэтому применим условие (7) и выразим p через квадрат скорости звука. При этом система уравнений (1)–(3), (6) сводится к уравнению:

(5)

$$\frac{da^2}{dt} = \gamma(\gamma-1)q - (\gamma-1)\frac{a^2v}{u} - \frac{1}{3}\upsilon\mu\left(\frac{a^2}{u}(1-me^{\lambda t}) - p_1\right)\gamma(\gamma-1),$$

с краевыми условиями:

$$v(0,t) = 0,$$
 (8)  
 $Mv_t = (p-P)F.$  (9)

#### 4. Методы вычислений

1.1. Приведение к безразмерному виду Обозначим  $a_0 = \sqrt{\gamma p_0 / \rho_0}$  (исходная скорость звука). Положим

$$t' = \frac{ta_0}{l_0}, x' = \frac{x}{l}, v' = \frac{v}{a_0}, p' = \frac{p}{p_0}, \quad \mu = \frac{\rho_0 F l_0}{M \gamma}, P' = \frac{P}{p_0}, q' = \frac{q l_0 \gamma(\gamma - 1)}{a_0^3}, q'_s = \frac{q s l_0 \gamma(\gamma - 1)}{a_0^3}.$$

Теперь под  $t, x, v, p, q, q_s$  будем подразумевать  $t', x', v', p', q', q'_s$ . В безразмерных переменных получим уравнение совместности:

$$\frac{\partial\beta}{\partial t} = \frac{\partial\nu}{\partial x}c.$$
(10)

Уравнение движения

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial p}{\partial x} = 0.$$
(11)

Уравнение энергии

$$\frac{\gamma}{\beta}\frac{\partial\beta}{\partial t} + \frac{1}{p}\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{q\nu + q_s}{p\beta}.$$
(12)

Начальные условия (при t = 0)

$$p(x,0) = 1, v(x,0) = 0, \beta(x,0) = 1.$$
(13)

Условие на дне трубы (x = 0)

$$v(0,t) = 0.$$

Условие на поршне примет вид (при x = 1):

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \mu \big( p - \Pi \big).$$

После решения задачи (8)–(13) надо параметры t, x, v, p заменить на t', x', v', p', а затем эти «штрихованные» параметры с помощью соотношений (12) снова заменить на исходные параметры t, x, v, a. Эти манипуляции выполняются исключительно для упрощения записей.

Замечание. Обозначим

$$g(t) = \int_0^t \frac{q(\tau)\nu(\tau) + q_s(\tau)}{p(\tau)\beta(\tau)} d\tau.$$

В уравнении (3) перейдем к квадратурам. Получим

$$p = p_0 \left(\frac{\beta_0}{\beta}\right)^{\gamma} e^{g(t)}.$$

Произведя некоторую перегруппировку сомножителей, получим такое представление [1-5]

$$p = \int_{0}^{t} \frac{q(\tau)\nu(\tau) + q_s(\tau)}{\beta(\tau)} d\tau.$$

1.2. Метод конечных разностей

В соответствии с шаблоном (рис. 3) получим следующее соотношение для уравнения совместности:

$$\beta_i = \beta_i + \frac{v_{i+1} - v_{i-1}}{2h}c\tau.$$

Для уравнения движения:

$$v_i = v_i + \frac{p_{i-1} - p_{i+1}}{2h} \frac{\tau}{\gamma}.$$

Уравнение энергии:

$$p = \int_{0}^{t} \frac{q(\tau)\nu(\tau) + q_{s}(\tau)}{\beta(\tau)} d\tau$$

1.3. Учет зазора между поршнем и трубкой

Для выполнения расчетов с учетом зазора между поршнем и трубкой так же строится сетка по методу конечных разностей, то есть полость трубки

разбивается на участки, как показано на рис. 4 Затем на первом шаге работы метода считаем, что

прилегающий к поршню слой под номером n полностью вытек сквозь зазор между поршнем и трубкой. Тогда необходимо скорректировать положение поршня, и, поскольку реальное продвижение поршня в направлении

незакрытого конца трубки меньше рассчитанного, то мы «сдвигаем» поршень в противоположном направлении. То есть новое, скорректированное положение поршня более соответствует действительности.

Затем наступает очередь слоя *n*-1, затем *n*-2 и т. д.

### 5. Сравнение математических моделей

Сравнение математических моделей, в основе которых лежат обыкновенные ДУ и уравнения газовой динамики с учетом нагрева газа (подогрев 2.10<sup>+7</sup> Дж/кг): решение, полученное с помощью обыкновенных дифференциальных уравнений: время 0,00240744 с, деформация 11,5002, путь 0,500009 м, скорость 235,899 м/с, давление 1,65846 атм. Среднее время работы метода 0,06 с.

С помощью уравнений газовой динамики: время 0.00240771 с, деформация 11,5789, путь 0,500003 м, скорость 235,87 м/сек, давление 1,64565 атм. Среднее время работы метода 7 с.

Разность скоростей: 0,02879 м/с, что в процентах составляет: 0,012206 %. Разность путей: 0,006263, что в процентах: 0,001253 %

(рис. 5). Полученные данные показывают, что метод обыкновенных дифференциальных уравнений позволяет получить решение задачи в несколько раз быстрее (в 117 раз для данного примера). При этом метод конечных разностей более предпочтителен, чем метод характеристик.

### 6. Практическая значимость

Применяемые способы математического моделирования применяются к расчету параметров пневматических систем с поршнем.



Рис. 5. График зависимости скорости поршня от времени

## Выводы

– В ходе исследования были рассмотрены методы построения моделей «труба-поршень» и выявлены их недостатки;



n

Рис. 4. Схема расчета

параметров движения поршня

Поршень

Слои газа

 построены математические модели движения поршня в трубе с учетом давления газа при равномерном и неравномерном расширении газа, с учетом нагрева газа и его проникновением в зазор между поршнем и трубой;

– сравнительный анализ математических моделей позволил сделать следующие выводы: решение, полученное в случае уравнений газовой динамики, является более точным, нежели в случае обыкновенных дифференциальных уравнений: отклонения от точных аналитических решений в простых задачах составляют не более 0,4–1,1 % (тогда как в случае обыкновенных дифференциальных уравнений до 1,3 %);

– но при рассмотрении нагрева газа метод обыкновенных дифференциальных уравнений позволяет получить решение почти в 117 раз быстрее, нежели метод уравнений газовой динамики при незначительной разнице в результатах. При этом метод конечных разностей более предпочтителен, чем метод характеристик.

## Литература

1. Клейман, Я.З. Скорость звука в смесях, содержащих взвешенные частицы / Я.З. Клейман // Акустический журнал. – 1961. – Т. 7, № 2. – С. 262–264.

2. Клейман, Я.З. О распространении сильных разрывов в многокомпонентной среде / Я.З. Клейман // Прикл. математика и механика. – 1958. – Т. 22, № 2. – С. 197–205.

3. Клейман Я.З. Некоторые особенности движения смесей / Я.З. Клейман // Акустический журнал. – 1959. – Т. 5, № 2. – С. 157–165.

4. Рахматулин, Х.А. Основы газодинамики взаимопроникающих движений сжимаемых сред / Х.А. Рахматулин // Прикладная математика и механика. – 1956. – Т. 20, № 2. – С. 184–195.

5. Голубятников, А.Н. Интегральные неравенства в задачах газовой динамики / А.Н. Голубятников // Аэромеханика и газовая динамика. – 2001. – № 1. – С. 74–81.

6. Голубятников, А.Н. К оптимизации ускорения тела в классе движений толкающего газа с однородной деформацией / А.Н. Голубятников, Н.Е. Леонтьев // Аэромеханика и газовая динамика. – 2001. – № 2. – С. 27–34.

7. Кушнер, Е.Н. Нормальные формы некоторых уравнений газовой динамики / Е.Н. Кушнер // Научный вестник Московского государственного технического университета гражданской авиации. – 2013. – № 194. – С. 20–23.

 Баутин, С.П. Одно точное стационарное решение системы уравнений газовой динамики / С.П. Баутин, А.Г. Обухов // Известия высших учебных заведений. Нефть и газ. – 2013. – № 4. – С. 81–86.

9. Рылов, А.И. Функциональная зависимость между законами сохранения газовой динамики, отвечающими разделению переменных / А.И. Рылов // Доклады Академии наук. – 2014. – Т. 454, № 6. – С. 647–650.

10. Газодинамические основы внутренней баллистики / С.А. Бетехтин, А.М. Виницкий, М.С. Горохов и др. – М.: Оборонгиз, 1957. – 384 с.

11. Жаровцев, В.В. Математическое моделирование и оптимальное проектирование баллистических установок / В.В. Жаровцев, Л.В. Комаровский, Е.И. Погорелов. – Томск: Издательство Томского университета, 1989. – 253 с.

12. Корнер, Дж. Внутренняя баллистика орудий / Дж. Корнер. – М.: Издательство иностранной литературы, 1953. – 462 с.

13. Геренштейн, А.В. Математическая модель движения поршня в трубе при действии давления газа / А.В. Геренштейн, Н.С. Кастрюлина // XVII Международная научно-практическая конференция: «Научное обозрение физико-математических и технических наук в XXI веке». – 2015. – №5(17). – С. 134–138.

#### Поступила в редакцию 11 октября 2017 г.

Bulletin of the South Ural State University Series "Mathematics. Mechanics. Physics" 2018, vol. 10, no. 4, pp. 5–12

DOI: 10.14529/mmph180401

# MATHEMATICAL SIMULATION OF PNEUMATIC SYSTEM WITH A CLEARANCE BETWEEN THE PISTON AND THE PIPE

# A.V. Herreinstein, N.S. Midonocheva

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation *E-mail:* gerenshteinav@susu.ru

The article regards mathematical models of pneumatic system, consisting of a pipe which is closed from one end and open from the other. In the pipe, there is a piston that limits some volume of compressed gas. In order to determine parameters of the piston's motion under the pressure of expanding gas, mathematical model of the system gets constructed using several methods: with the use of ordinary differential equations, and with the use of partial differential equations. The last method includes such equations as motion equation, continuity equation, and energy conservation equation, i.e. the equations of gas dynamics. Besides, corresponding boundary conditions get determined. At that, possible heating of the gas and probable loss of some volume of the gas through an existing clearance between the cylinder and the piston are taken into account. All equations included into the mathematical model get reduced to the dimensionless form. Methods of finite differences and characteristics are used for calculations, at which all partial derivatives in equations get replaced with finite differences in nodes of a grid. By the existing template, approximate value of each equation gets determined in each node of the grid by the space; then a transition to the next temporal layer takes place. Calculations are being performed either until the piston reaches the open end of the tube or until the piston started to slow down. After that, results obtained with the use of methods under consideration get compared by the criteria of fast operation and accuracy, and recommendations regarding advisability of using each method for construction of a mathematical model get provided.

Keywords: mathematical model; compressed gas; pneumatic system.

# References

1. Kleyman Ya.Z. Akusticheskiy zhurnal, 1961, Vol. 7, no. 2, pp. 262–264. (in Russ.).

2. Kleyman Ya.Z. Prikladnaya matematika i mekhanika, 1958, Vol. 22, no. 2, pp. 197–205. (in Russ.).

3. Kleyman Ya.Z. *Akusticheskiy zhurnal*, 1959, Vol. 5, № 2, pp. 157–165. (in Russ.).

4. Rakhmatulin Kh.A. *Prikladnaya matematika i mekhanika*, 1956, Vol. 20, no. 2, pp. 184–195. (in Russ.).

5. Golubyatnikov A.N. Aeromekhanika i gazovaya dinamika, 2001, no.1, pp. 74-81. (in Russ.).

6. Golubyatnikov A.N., Leont'ev N.E. *Aeromekhanika i gazovaya dinamika*, 2001, no. 2, pp. 27–34. (in Russ.).

7. Kushner E.N. Normal FORMS of Some Gas Dynamics Equations. *Civil Aviation High Technologies*, 2013, no. 194, pp. 20–23. (in Russ.).

8. Bautin S.P., Obukhov A.G. A single exact stationary solution of the gas dynamics equations system. *Proceedings of Higher Educational Establishments. Oil and Gas*, 2013, no. 4, pp. 81–86. (in Russ.).

9. Rylov A.I. *Doklady Akademii nauk*, 2014, Vol. 454, no. 6, pp. 647–650. DOI: 10.7868/S0869565214060073

10. Betekhtin S.A., Vinitskiy A.M., Gorokhov M.S. et al. Gazodinamicheskie osnovy vnutrenney ballistiki (Gas dynamic fundamentals of internal ballistics). Moscow, Oborongiz Publ., 1957, 384 p. (in Russ.).

11. Zharovtsev V.V., Komarovskiy L.V., Pogorelov E.I. *Matematicheskoe modelirovanie i optimal'noe proektirovanie ballisticheskikh ustanovok* (Mathematical modeling and optimal design of ballistic installations). Tomsk, Izdatel'stvo Tomskogo universiteta Publ., 1989, 253 p. (in Russ.).

12. Korner, Dzh. *Vnutrennyaya ballistika orudiy* (Theory of Interior Ballistics of Guns). Moscow, Izdatel'stvo inostrannoy literatury Publ., 1953, 462 p. (in Russ.). [Corner, J., Theory of Interior Ballistics of Guns, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1950, 443 p.]

13. Gerenshteyn A.V., Kastryulina N.S. Matematicheskaya model' dvizheniya porshnya v trube pri deystvii davleniya gaza (Mathematical model of piston motion in a pipe under the action of gas pressure). XVII Mezhdunarodnaya nauchno-prakticheskaya konferentsiya: "Nauchnoe obozrenie fiziko-matematicheskikh i tekhnicheskikh nauk v XXI veke" (Proc. XVII International Scientific and Practical Conference: "Scientific Review of Physical, Mathematical and Technical Sciences in the 21st Century"), 2015, no. 5(17), pp. 134–138. (in Russ.).

Received October 11, 2017

# ОБ ОДНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ ФУНКЦИИ ГРИНА ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ ДЛЯ БИГАРМОНИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ В ШАРЕ

### В.В. Карачик

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация E-mail: karachik@susu.ru

> Аналогично известному элементарному решению уравнения Лапласа вводится элементарное решение бигармонического уравнения. Находится связь этого элементарного решения с элементарным решением уравнения Лапласа. В зависимости от размерности пространства, в котором исследуется краевая задача, через введенное элементарное решение бигармонического уравнения в явном виде определяется некоторая симметричная функция двух переменных. Затем доказывается, что эта функция обладает свойствами функции Грина задачи Дирихле для бигармонического уравнения в единичном шаре. Отдельно исследуются два случая, когда размерность пространства два и когда размерность пространства больше двух. Аналогично функции Грина задачи Дирихле для уравнения Пуассона в шаре находится разложение функции Грина задачи Дирихле для бигармонического уравнения в шаре по полной, ортогональной на единичной сфере системе однородных гармонических многочленов. Это сделано в случае размерности пространства больше четырех. С помощью полученного разложения функции Грина вычисляется интеграл по шару с ядром из функции Грина от однородного гармонического многочлена, умноженного на положительную степень нормы независимой переменной. Полученные результаты согласуются с результатами, известными ранее в этой области.

> Ключевые слова: задача Дирихле; бигармоническое уравнение; функция Грина.

Пусть  $S = \{x \in \mathbb{R}^n : |x| < 1\}$  – *n*-мерный единичный шар в евклидовом пространстве  $\mathbb{R}^n$  с нормой  $|x| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$ , а  $\partial S = \{x \in \mathbb{R}^n : |x| = 1\}$  – единичная сфера. В единичном шаре *S* рассмотрим следующую однородную краевую задачу Дирихле для неоднородного бигармонического уравнения

$$\Delta^2 u = f(x), \quad x \in S , \tag{1}$$

$$u|_{\partial S} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial v}|_{\partial S} = 0,$$
 (2)

где  $\frac{\partial}{\partial v}$  – внешняя нормальная производная к единичной сфере,  $f \in C^1(\overline{S})$  – заданная функция. Найдем явное представление функции Грина этой краевой задачи. Хорошо известно (см., например, [1]), что функция Грина задачи Дирихле для уравнения Пуассона в шаре при  $n \ge 2$  имеет вид

$$G(x,\xi) = E(x,\xi) - E\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right),\tag{3}$$

где

$$E(x,\xi) = \begin{cases} \frac{1}{n-2} |x-\xi|^{2-n}, & n > 2\\ -\ln|x-\xi|, & n = 2 \end{cases}$$
(4)

– элементарное решение уравнения Лапласа [1]. Явная форма функции Грина в секторе для бигармонического и тригармонического уравнений приведена в работах [2, 3]. Функция Грина задачи Неймана для уравнения Пуассона в полупространстве  $\mathbb{R}^n_+$  в явном виде построена в [4], а функция Грина для задачи Робена в круге в работах [5–7]. Отметим также работы [8, 9], которые

посвящены построению функции Грина для задачи Дирихле для полигармонического уравнения в единичном шаре и работы [10, 11], где найден оператор Грина задачи Дирихле для бигармонического и полигармонического уравнения в единичном шаре при полиномиальных данных. В работе [12] найдена функция Грина третьей краевой задачи для уравнения Пуассона. В работах [13, 14] дано представление функции Грина для классических внешней и внутренней задач Неймана для уравнения Пуассона в единичном шаре.

Рассмотрим следующую функцию

$$E_{4}(x,\xi) = \begin{cases} \frac{1}{2(n-2)(n-4)} | x - \xi |^{4-n}, & n > 4, n = 3\\ -\frac{1}{4} \ln | x - \xi |, & n = 4\\ \frac{| x - \xi |^{2}}{4} \left( \ln | x - \xi | - 1 \right), & n = 2 \end{cases}$$
(5)

которую, по аналогии с функцией  $E(x, \xi)$  из (4), назовем элементарным решением бигармонического уравнения.

**Лемма 1.** Функция  $E_4(x,\xi)$ , определенная при  $\xi \neq x$ , удовлетворяет равенствам

$$\Delta_{\xi} E_4(x,\xi) = -E(x,\xi), \quad \Delta_x E_4(x,\xi) = -E(x,\xi)$$

и значит является бигармонической по x и  $\xi$  при  $\xi \neq x$ .

Доказательство. В силу симметричности функции  $E_4(x,\xi)$  достаточно доказать лишь первое равенство. Пусть n > 4 или n = 3. Нетрудно проверить, что

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} |x - \xi|^{4-n} = \left(2 - \frac{n}{2}\right) 2\left(\xi_i - x_i\right) |x - \xi|^{2-n} = (4-n)\left(\xi_i - x_i\right) |x - \xi|^{2-n}$$

и значит

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} |x - \xi|^{4-n} = (4-n) \Big( |x - \xi|^{2-n} + (2-n) \big( \xi_i - x_i \big)^2 |x - \xi|^{-n} \Big).$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \Delta_{\xi} | x - \xi |^{4-n} &= (4-n) \sum_{i=1}^{n} \left( |x - \xi|^{2-n} + (2-n) \left( \xi_{i} - x_{i} \right)^{2} | x - \xi |^{-n} \right) = \\ &= (4-n) \left( n | x - \xi |^{2-n} + (2-n) | x - \xi |^{-n} \sum_{i=1}^{n} \left( \xi_{i} - x_{i} \right)^{2} \right) = 2(4-n) | x - \xi |^{2-n} \end{aligned}$$

Отсюда следует доказываемое равенство

$$\Delta_{\xi} E_4(x,\xi) = -\frac{1}{(n-2)} |x-\xi|^{2-n} = -E(x,\xi).$$

При n = 4 будем иметь

$$\frac{\partial}{\partial \xi_{i}} \ln |x - \xi| = \frac{(\xi_{i} - x_{i})}{|x - \xi|^{2}}, \quad \frac{\partial^{2}}{\partial \xi_{i}^{2}} \ln |x - \xi| = \frac{|x - \xi|^{2} - 2(\xi_{i} - x_{i})^{2}}{|x - \xi|^{4}}$$

и значит

$$\Delta_{\xi} \left( -\frac{1}{4} \ln |x - \xi| \right) = -\frac{1}{4} \frac{2 |x - \xi|^2}{|x - \xi|^4} = -\frac{1}{2} \frac{1}{|x - \xi|^2} = -E(x, \xi).$$

При n = 2 будем иметь

$$\frac{\partial}{\partial \xi_{i}} |x - \xi|^{2} \ln |x - \xi| = 2(\xi_{i} - x_{i}) \ln |x - \xi| + |x - \xi|^{2} \frac{\xi_{i} - x_{i}}{|x - \xi|^{2}},$$
  
$$\frac{\partial^{2}}{\partial \xi_{i}^{2}} |x - \xi|^{2} \ln |x - \xi| = 2\ln |x - \xi| + 4 \frac{(\xi_{i} - x_{i})^{2}}{|x - \xi|^{2}} + |x - \xi|^{2} \frac{|x - \xi|^{2} - 2(\xi_{i} - x_{i})^{2}}{|x - \xi|^{4}}$$

и значит

$$\Delta_{\xi} (|x - \xi|^2 \ln |x - \xi|) = 4 \ln |x - \xi| + 4.$$

Поэтому

$$\Delta_{\xi} E_4(x,\xi) = \Delta_{\xi} \left( \frac{|x-\xi|^2}{4} \left( \ln |x-\xi| - 1 \right) \right) = \ln |x-\xi| + 1 - 1 = -E(x,\xi).$$

Последнее равенство легко также проверить с помощью Mathematica.

В силу свойства элементарного решения  $\Delta_{\xi} E(x,\xi) = 0$  при  $\xi \neq x$  получаем бигармоничность функции  $E_4(x,\xi)$  при  $\xi \neq x$ . Лемма доказана.

Рассмотрим однородный дифференциальный оператор  $\Lambda u = \sum_{k=1}^{n} x_{i} u_{x_{i}}$  [17], который обладает

полезным в дальнейшем свойством

$$\left(\Lambda u - \frac{\partial u}{\partial \nu}\right)\Big|_{\partial S} = 0.$$
(6)

**Теорема 1.** Пусть  $n \ge 3$ . Функция

$$G_4(x,\xi) = E_4(x,\xi) - E_4\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) - \frac{|x|^2 - 1}{2} \frac{|\xi|^2 - 1}{2} E\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right)$$
(7)

является функцией Грина задачи Дирихле (1), (2), а именно функция

$$u(x) = \frac{1}{\omega_n} \int_S G_4(x,\xi) f(\xi) d\xi, \qquad (8)$$

где  $f \in C^1(\overline{S})$  является решением задачи (1), (2). Функция Грина  $G_4(x,\xi)$  симметрична относительно x и  $\xi$  и бигармоническая при  $x, \xi \in S$ ,  $x \neq \xi$ .

*Доказательство*. Пусть n > 4 или n = 3 и  $\xi \in S$  фиксировано. Докажем, что функция  $G_4(x,\xi)$  бигармоническая при  $x, \xi \in S$ ,  $x \neq \xi$  и удовлетворяет однородным условиям (2).

Бигармоничность функции  $E_4(x,\xi)$  доказана в лемме 1. Бигармоничность функции  $E_4(x/|x|,|x|\xi)$  по обеим переменным при  $x,\xi \in S$  следует из равенства

$$|x/|x| - |x|\xi|^{4-n} = |x/|x| - |x|\xi|^{2-n} |x/|x| - |x|\xi|^2,$$

поскольку функция  $|x/|x| - |x| \xi|^{2-n} = E(x/|x|, |x|\xi)$  - гармоническая по  $x, \xi \in S$  (это преобразование Кельвина по x гармонической функции  $E(x,\xi)$  [18]) и

$$\left|\frac{x}{|x|} - \xi |x|\right|^{2} = \frac{|x|^{2}}{|x|^{2}} - 2\left(\frac{x}{|x|}, \xi |x|\right) + |\xi|^{2} |x|^{2} = 1 - 2(x,\xi) + |\xi|^{2} |x|^{2},$$
(9)

а произведение таких функций – бигармоническая функция по  $x, \xi \in S$ . Аналогично функция

$$\frac{|x|^2 - 1}{2} \frac{|\xi|^2 - 1}{2} E\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right)$$

бигармоническая по  $x, \xi \in S$ , поскольку функция  $E(x/|x|, |x|\xi)$  гармоническая по  $x, \xi \in S$ . Очевидно, что при  $\xi \in S$  переменная x может принимать значение на  $\partial S$ .

Далее, при  $\xi \in S$  функция  $E(x/|x|, |x|\xi)$  ограничена по  $x \in \overline{S}$  и значит первое условие из (2) выполнено

$$G_4(x,\xi)|_{x\in\partial S} = \left( E_4(x,\xi) - E_4\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) - \frac{|x|^2 - 1}{2} \frac{|\xi|^2 - 1}{2} E\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) \right) \Big|_{x\in\partial S} = 0.$$

Докажем второе условие из (2). Нетрудно подсчитать

$$2(n-2)(n-4)\Lambda_{x}E_{4}(x,\xi) = \Lambda_{x} |x-\xi|^{4-n} = (4-n)\sum_{i=1}^{n} x_{i} \frac{x_{i}-\xi_{i}}{|x-\xi|^{n-2}} = (4-n)\frac{|x|^{2}-(x,\xi)}{|x-\xi|^{n-2}}$$

И

$$\begin{split} &2(n-2)(n-4)\Lambda_{x}E_{4}\Big(\frac{x}{|x|},|x|\xi\Big) = \Lambda_{x}\Big(1-2(x,\xi)+|x|^{2}|\xi|^{2}\Big)^{2-n/2} = \\ &= \frac{4-n}{2}\sum_{i=1}^{n}x_{i}\frac{-2\xi_{i}+2x_{i}|\xi|^{2}}{\left(1-2(x,\xi)+|x|^{2}|\xi|^{2}\right)^{n/2-1}} = (4-n)\frac{|x|^{2}|\xi|^{2}-(x,\xi)}{|x/|x|-|x|\xi|^{n-2}}, \end{split}$$

а поэтому при  $x \in \partial S$ 

$$\Lambda_{x}\left(E_{4}(x,\xi)-E_{4}\left(\frac{x}{|x|},|x|\xi\right)\right) = -\frac{1}{2(n-2)}\frac{|x|^{2}-|x|^{2}|\xi|^{2}}{|x/|x|-|x|\xi|^{n-2}} = \frac{|\xi|^{2}-1}{2}\frac{1}{n-2}\frac{1}{|x/|x|-|x|\xi|^{n-2}} = \frac{|\xi|^{2}-1}{2}E\left(\frac{x}{|x|},|x|\xi\right) = \Lambda_{x}\left(\frac{|x|^{2}-1}{2}\frac{|\xi|^{2}-1}{2}E\left(\frac{x}{|x|},|x|\xi\right)\right).$$

Если перенести члены из правой части этого в левую часть, воспользоваться (6) и определением  $G_4(x,\xi)$  найдем

$$\frac{\partial}{\partial v} G_4(x,\xi) \Big|_{\partial S} = 0.$$

Случа<br/>и n > 4 и n = 3 доказаны. Пусть n = 4. Бигармоничность  $E_4(x,\xi)$  пр<br/>и  $x \neq \xi$  доказана в лемме 1. Если обозначить

$$-4E_4\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) = \ln\left|\frac{x}{|x|} - |x|\xi\right| = \frac{1}{2}\ln\left(1 - 2(x,\xi) + |x|^2|\xi|^2\right) = \frac{1}{2}\ln t$$

то

$$-4\frac{\partial}{\partial x_{i}}E_{4}\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) = \frac{-\xi_{i} + x_{i}|\xi|^{2}}{t}, \quad \frac{\partial^{2}}{\partial x_{i}^{2}}E_{4}\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) = -2\frac{(-\xi_{i} + x_{i}|\xi|^{2})^{2}}{t^{2}} + \frac{|\xi|^{2}}{t}$$

при *i* = 1,...,4 и значит

$$-4\Delta_{x}E_{4}\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) = -2\frac{|\xi|^{2}(1-2(x,\xi)+|x|^{2}|\xi|^{2})}{t^{2}} + 4\frac{|\xi|^{2}}{t}$$
$$= 2\frac{|\xi|^{2}}{t} = \frac{2|\xi|^{2}}{|x/|x|-|x|\xi|^{2}} = \frac{2|\xi|^{2}}{|x|^{2}|x/|x|^{2}-\xi|^{2}}.$$

Последняя функция является преобразованием Кельвина по *x* гармонической при n = 4 функции  $2|\xi|^2/|x-\xi|^2$ , а поскольку преобразование Кельвина сохраняет гармоничность [18], то эта функция гармоническая по  $x \in S$ , а значит  $E_4(x/|x|, |x|\xi)$  – бигармоническая по  $x \in S$ .

Проверим граничные условия (2). Начнем со второго. Нетрудно вычислить

$$-4\Lambda_{x}E_{4}(x,\xi) = \Lambda_{x}\ln|x-\xi| = \sum_{i=1}^{4} x_{i}\frac{x_{i}-\xi_{i}}{|x-\xi|^{2}} = \frac{|x|^{2}-(x,\xi)}{|x-\xi|^{2}}$$

И

$$-4\Lambda_{x}E_{4}\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) = \frac{1}{2}\Lambda_{x}\ln\left(1-2(x,\xi)+|x|^{2}|\xi|^{2}\right) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}x_{i}\frac{-2\xi_{i}+2x_{i}|\xi|^{2}}{1-2(x,\xi)+|x|^{2}|\xi|^{2}} = \frac{|x|^{2}|\xi|^{2}-(x,\xi)}{|x/|x|-|x|\xi|^{2}},$$

а поэтому при  $x \in \partial S$ 

$$\Lambda_{x}\left(E_{4}(x,\xi)-E_{4}\left(\frac{x}{|x|},|x|\xi\right)\right) = -\frac{1}{4}\frac{|x|^{2}-|x|^{2}|\xi|^{2}}{|x/|x|-|x|\xi|^{2}} = \frac{|\xi|^{2}-1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{|x/|x|-|x|\xi|^{2}} = \frac{|\xi|^{2}-1}{2}E\left(\frac{x}{|x|},|x|\xi\right) = \Lambda_{x}\left(\frac{|x|^{2}-1}{2}\frac{|\xi|^{2}-1}{2}E\left(\frac{x}{|x|},|x|\xi\right)\right).$$

Отсюда, после перенесения функции справа в левую часть равенства, получаем, что при n = 4 функция  $G_4(x,\xi)$  из (7) при  $x \in S$  удовлетворяет условию  $\frac{\partial}{\partial v}G_4(x,\xi)|_{\partial S} = 0$ . Условие  $G_4(x,\xi)|_{\partial S} = 0$  при  $\xi \in S$  очевидно тоже выполнено, поскольку функция  $E(x/|x|,|x|\xi)$  ограничена по  $x \in \overline{S}$ .

Известно [18], что интегралы типа потенциала

$$\int_{S} \frac{\rho(\xi)}{|x-\xi|^{\alpha}} d\xi$$

являются функциями класса  $C^{p}(\mathbb{R}^{n})$  при ограниченной интегрируемой функции  $\rho(x)$ , причем дифференцирование возможно под знаком интеграла при всяком целом неотрицательном *р* таком, что  $\alpha + p < n$ . В нашем случае  $\alpha = n - 4$ , а значит для интеграла

$$u_1(x) = \frac{1}{\omega_n} \int_S E_4(x,\xi) f(\xi) d\xi$$

p = 3 и  $u_1 \in C^3(\mathbb{R}^n)$ . Поэтому, учитывая лемму 1, при  $x \in S$  получим

$$\Delta u_1(x) = \frac{1}{\omega_n} \int_S \Delta_x E_4(x,\xi) f(\xi) d\xi = -\frac{1}{\omega_n} \int_S E(x,\xi) f(\xi) d\xi,$$

а значит, по свойству объемного потенциала [1] получим

$$\Delta^2 u_1(x) = \Delta \left( -\frac{1}{\omega_n} \int_S E(x,\xi) f(\xi) d\xi \right) = f(x), \quad x \in S.$$

Условие  $f \in C^1(\overline{S})$  необходимо для выполнения равенства

$$(\Delta u_1(x)) = f(x)$$

в *S* [1]. Выше было доказано, что функция

$$-E_4\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) - \frac{|x|^2 - 1}{2} \frac{|\xi|^2 - 1}{2} E\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right)$$

является бигармонической по x в S при любом  $\xi \in S$  и ее можно дифференцировать по x под знаком интеграла по  $\xi$  любое число раз. Обозначая интеграл по  $\xi \in S$  от этой функции, умноженной на  $1/\omega_n f(\xi)$ , через  $u_2(x)$  найдем

$$\Delta^{2} u_{2}(x) = -\frac{1}{\omega_{n}} \int_{S} \Delta_{x}^{2} \Big( E_{4} \Big( \frac{x}{|x|}, |x|\xi \Big) + \frac{|x|^{2} - 1}{2} \frac{|\xi|^{2} - 1}{2} E \Big( \frac{x}{|x|}, |x|\xi \Big) \Big) f(\xi) d\xi = 0.$$

Поэтому, учитывая (7), функция u(x) из (8) удовлетворяет равенству

$$\Delta^{2} u(x) = \Delta^{2} u_{1}(x) + \Delta^{2} u_{2}(x) = f(x).$$

Наконец, в силу того, что  $u \in C^3(\overline{S})$  и найденных граничных значений  $G_4(x,\xi)$ , найдем

$$u(x)|_{\partial S} = \frac{1}{\omega_n} \int_{S} G_4(x,\xi)|_{x \in \partial S} f(\xi) d\xi = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial \nu}|_{\partial S} = \frac{1}{\omega_n} \int_{S} \frac{\partial G_4(x,\xi)}{\partial \nu}|_{x \in \partial S} f(\xi) d\xi = 0,$$

а значит условия (2) для функции u(x) выполнены.

Симметричность функции Грина следует из вида функций  $E_4(x,\xi)$ ,  $E(x,\xi)$  и формулы (9). Теорема доказана.

Вид функции Грина, полученный в теореме 1, отличается от найденного в [8].

Замечание 1. Функцию Грина  $G_4(x,\xi)$  с учетом леммы 1 можно записать в виде

$$G_4(x,\xi) = E_4(x,\xi) - E_4\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) + \frac{|x|^2 - 1}{2} \frac{|\xi|^2 - 1}{2} \Delta E_4\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right).$$

Теорему 1 можно дополнить следующим утверждением.

**Теорема 2.** Пусть функция  $E_4(x,\xi)$  находится из (5) при n = 2. Тогда функция

$$G_4(x,\xi) = E_4(x,\xi) - E_4\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) - \frac{|x|^2 - 1}{2} \frac{|\xi|^2 - 1}{2} \left(E\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) + \frac{1}{2}\right)$$

является функцией Грина задачи Дирихле (1), (2) при n = 2. Функция Грина симметрична и бигармоническая при  $x, \xi \in S$ ,  $x \neq \xi$ .

Доказательство. Докажем, что функция  $G_4(x,\xi)$  бигармоническая при  $x,\xi \in S$  и  $x \neq \xi$  и удовлетворяет однородным условиям (2). Бигармоничность функции

$$E_4(x,\xi) = \frac{|x-\xi|^2}{4} \left( \ln |x-\xi| - 1 \right)$$

при  $x \neq \xi$  была установлена в лемме 1. Исследуем функцию  $E_4(x/|x|,|x|\xi)$ . Аналогично случаю *n* = 4 обозначим

$$\ln \left| \frac{x}{|x|} - |x| \xi \right| = \frac{1}{2} \ln \left( 1 - 2(x,\xi) + |x|^2 |\xi|^2 \right) \equiv \frac{1}{2} \ln t.$$

Тогда

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{2} \ln t = \frac{-\xi_i + x_i |\xi|^2}{t}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \frac{1}{2} \ln t = -2 \frac{(-\xi_i + x_i |\xi|^2)^2}{t^2} + \frac{|\xi|^2}{t}$$

и значит

$$\Delta_x \frac{1}{2} \ln t = -2 \frac{|\xi|^2 (1 - 2(x, \xi) + |x|^2 |\xi|^2)}{t^2} + 2 \frac{|\xi|^2}{t} = 0,$$

т. е. функция  $\ln |x| + |x| = |x| |\xi|$  гармоническая по  $x \in S$ . Так как множитель перед логарифмом в  $E_4(x,\xi)$  равен  $|x/|x| - |x|\xi|^2 = 1 - 2(x,\xi) + |x|^2 |\xi|^2$ , то функция  $E_4(x/|x|, |x|\xi)$  при n = 2бигармоническая по x при  $x, \xi \in S$ . Наконец, функция

$$\frac{|x|^2 - 1}{2} \frac{|\xi|^2 - 1}{2} \left( E\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) + \frac{1}{2} \right)$$

бигармоническая, поскольку функция  $E(x/|x|, |x|\xi)$  – гармоническая при  $x, \xi \in S$ .

Проверим граничные условия (2). Начнем со второго. Нетрудно видеть, что

$$\Lambda_{x} | x - \xi |^{2} = 2(|x|^{2} - (x,\xi)), \quad \Lambda_{x} \ln |x - \xi| = \frac{|x|^{2} - (x,\xi)}{|x - \xi|^{2}}$$

а поэтому

$$4\Lambda_{x}E_{4}(x,\xi) = 2(|x|^{2} - (x,\xi))(\ln|x-\xi|-1) + |x|^{2} - (x,\xi) = (|x|^{2} - (x,\xi))(2\ln|x-\xi|-1)$$

Аналогично случаю n = 4 найдем

$$\Lambda_{x} |x/|x| - |x|\xi|^{2} = 2(|x|^{2}|\xi|^{2} - (x,\xi)), \quad \Lambda_{x} \ln |x/|x| - |x|\xi| = \frac{|x|^{2}|\xi|^{2} - (x,\xi)}{|x/|x| - |x|\xi|^{2}},$$

а поэтому, поскольку оператор Л первого порядка, найдем

$$4\Lambda_{x}E_{4}(x/|x|,|x|\xi) = 2(|x|^{2}|\xi|^{2} - (x,\xi))(\ln|x/|x| - |x|\xi| - 1) + |x/|x| - |x|\xi|^{2} \frac{|x|^{2}|\xi|^{2} - (x,\xi)}{|x/|x| - |x|\xi|^{2}} = (|x|^{2}|\xi|^{2} - (x,\xi))(2\ln|x/|x| - |x|\xi| - 1)$$

Таким образом, при  $x \in \partial S$  будем иметь

$$4\Lambda_{x}\left(E_{4}(x,\xi)-E_{4}\left(x/|x|,|x|\xi\right)\right) = \left(2\ln|x/|x|-|x|\xi|-1\right)(1-|\xi|^{2}) =$$
  
=  $4\left(-\ln|x/|x|-|x|\xi|+\frac{1}{2}\right)\frac{|\xi|^{2}-1}{2} = 4\left(E\left(x/|x|,|x|\xi\right)+\frac{1}{2}\right)\frac{|\xi|^{2}-1}{2} =$   
=  $4\Lambda_{x}\left(\frac{|x|^{2}-1}{2}\frac{|\xi|^{2}-1}{2}\left(E\left(x/|x|,|x|\xi\right)+\frac{1}{2}\right)\right).$ 

Сокращая полученное равенство на 4 и перенося члены из правой части в левую часть, получим  $\frac{\partial}{\partial \nu} G_4(x,\xi) \Big|_{x \in \partial S} = 0$ . Условие  $G_4(x,\xi) \Big|_{x \in \partial S} = 0$ , где  $\xi \in S$ , очевидно тоже выполнено. Дальнейшее доказательство повторяет конец доказательства теоремы 1, в силу которого

дифференцирование и предельный переход можно внести под знак интеграла в формуле (8). Симметрия доказывается аналогично. Теорема доказана.

Пусть  $\{H_k^{(i)}(x): i = 1, ..., h_k, k \in \mathbb{N}_0\}$  – полная система однородных степени  $k \in \mathbb{N}_0$ ортогональных сферических гармоник (см., например, [15]), нормированных так, что  $\int_{\partial S} (H_k^{(i)}(\xi))^2 ds_{\xi} = \omega_n$ , где  $h_k$  – размерность базиса однородных гармонических многочленов степени k [16], а  $\omega_n$  – площадь единичной сферы  $\partial S$ . Справедливо также следующее утверждение.

**Теорема 3.** Пусть n > 4. Функция  $G_4(x,\xi)$  при  $|\xi| < |x|$  может быть записана в виде

$$\begin{aligned} G_4(x,\xi) &= \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{|x|^{-(2k+n-2)}}{2k+n-2} \left( \frac{|x|^2}{2k+n-4} - \frac{|\xi|^2}{2k+n} \right) - \frac{1}{2k+n-2} \times \right. \\ & \times \left( \frac{1}{2k+n-4} - \frac{|x|^2|\xi|^2}{2k+n} + \frac{|x|^2-1}{2} \left( |\xi|^2 - 1 \right) \right) \sum_{i=1}^{h_k} H_k^{(i)}(x) H_k^{(i)}(\xi). \end{aligned}$$

При  $|x| < |\xi|$  представление для  $G_4(x,\xi)$  получается из приведенного выше перестановкой местами переменных x и  $\xi$ .

Замечание 2. С помощью теоремы 3 вычисляется интеграл

$$\frac{1}{\omega_n} \int_{S} G_4(x,\xi) |\xi|^{2l} H_m(\xi) d\xi = \frac{|x|^{2l+4} - 1 - (l+2)(|x|^2 - 1)}{C_{l,m}} H_m(x),$$

где  $C_{l,m} = (2l+2)(2l+4)(2l+2m+n)(2l+2m+n+2)$  и  $H_m(x)$  – однородный степени  $m \in \mathbb{N}_0$ гармонический многочлен. Похожий результат при  $l \in \mathbb{N}_0$  был получен в [19] с помощью результатов [20]. Представление функции  $E(x,\xi)$ , аналогичное полученному в теореме 2, было найдено ранее в [21], а равномерная сходимость аналогичных рядов исследовалась в [22].

#### Литература

1. Бицадзе, А.В. Уравнения математической физики / А.В. Бицадзе. – М.: Наука, 1982. – 336 с.

2. Wang, Y. Biharmonic Green function and biharmonic Neumann function in a sector / Y. Wang, L. Ye // Complex Variables and Elliptic Equations. – 2013. – Vol. 58, no. 1. – P. 7–22.

3. Wang, Y. Tri-harmonic boundary value problems in a sector / Y. Wang // Complex Variables and Elliptic Equations. – 2014. – Vol. 59. – Issue 5. – P. 732–749.

4. Constantin, E. Green function of the Laplacian for the Neumann problem in  $\mathbb{R}^n_+$  / E. Constantin, N.H. Pavel // Libertas Mathematica. – 2010. – Vol. 30. – P. 57–69.

5. Begehr, H. Modified harmonic Robin function / H. Begehr, T. Vaitekhovich // Complex Variables and Elliptic Equations. – 2013. – Vol. 58. – Issue 4. – P. 483–496.

6. Sadybekov, M.A. On an explicit form of the Green function of the third boundary value problem for the Poisson equation in a circle / M.A. Sadybekov, B.T. Torebek, B.Kh. Turmetov // AIP Conf. Proc. – 2015. – Vol. 1611. – P. 255–260.

7. Sadybekov, M.A. On an explicit form of the Green function of the Robin problem for the Laplace operator in a circle / M.A. Sadybekov, B.T. Torebek, B.Kh. Turmetov // Advances in Pure and Applied Mathematics. – 2015. – Vol. 6, Issue 3. – P. 163–172.

8. Кальменов, Т.Ш. Представление функции Грина задачи Дирихле для полигармонических уравнений в шаре / Т.Ш. Кальменов, Б.Д. Кошанов, М.Ю. Немченко // Доклады Академии Наук. – 2008. – Т. 421, № 3. – С. 305–307.

9. Кальменов, Т.Ш. О новом методе построения функции Грина задачи Дирихле для полигармонического уравнения / Т.Ш. Кальменов, Д. Сураган // Дифференциальные уравнения. – 2012. – Т. 48, № 3. – С. 435–438.

10. Карачик, В.В. О полиномиальных решениях задачи Дирихле для бигармонического уравнения в шаре / В.В. Карачик, Н.А. Антропова // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2012. – Т. 15, № 2. – С. 86–98.

11. Карачик, В.В. Функция Грина задачи Дирихле для полигармонического уравнения в шаре при полиномиальных данных / В.В. Карачик // Известия Саратовского университета. Новая серия: Математика. Механика. Информатика. – 2014. – Т. 14, № 4(2). – С. 550–558.

12. Карачик, В.В. О функции Грина третьей краевой задачи для уравнения Пуассона / В.В. Карачик, Б.Х. Турметов // Математические труды. – 2018. – Т. 21, № 1. – С. 17–34.

13. Садыбеков, М.А. Представление функции Грина внешней задачи Неймана для оператора Лапласа / М.А. Садыбеков, Б.Т. Торебек, Б.Х. Турметов // Сиб. матем. журн. – 2017. – Т. 58, № 1. – С. 199–205.

14. Sadybekov, M.A. Representation of Green's function of the Neumann problem for a multidimensional ball / M.A. Sadybekov, B.T. Torebek, B.Kh. Turmetov // Complex Variables and Elliptic Equations. – 2016. – Vol. 61, no. 1. – P. 104–123.

15. Karachik, V.V. On one set of orthogonal harmonic polynomials / V.V. Karachik // Proceedings of American Mathematical Society. – 1998. – Vol. 126, no. 12. – P. 3513–3519.

16. Бейтмен, Г. Высшие трансцендентные функции / Г. Бейтмен, А. Эрдейи. – М.: Наука, 1966. – 295 с.

17. Карачик, В.В. Построение полиномиальных решений задачи Дирихле для полигармонического уравнения в шаре / В.В. Карачик // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2014. – Т. 54, № 7. – С. 1149–1170.

18. Владимиров, В.С. Уравнения математической физики / В.С. Владимиров. – М.: Наука, 1981. – 512 с.

19. Карачик, В.В. Решение задачи Дирихле для полигармонического уравнения в шаре при полиномиальных данных / В.В. Карачик // Дифференциальные уравнения. – 2015. – Т. 51, № 8. – С. 1038–1047.

20. Карачик, В.В. Об одном разложении типа Альманси / В.В. Карачик // Математические заметки. – 2008. – Т. 83, № 3. – С. 370–380.

21. Карачик, В.В. Построение полиномиальных решений некоторых краевых задач для уравнения Пуассона / В.В. Карачик // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2011. – Т. 51, № 9. – С. 1674–1694.

22. Карачик, В.В. Об одной задаче типа Неймана для бигармонического уравнения / В.В. Карачик // Математические труды. – 2016. – № 2. – С. 86–108.

Поступила в редакцию 8 июня 2018 г.

Bulletin of the South Ural State University Series "Mathematics. Mechanics. Physics" 2018, vol. 10, no. 4, pp. 13–22

DOI: 10.14529/mmph180402

# ON REPRESENTATION OF GREEN'S FUNCTION OF THE DIRICHLET PROBLEM FOR BIHARMONIC EQUATION IN A BALL

# V.V. Karachik

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation E-mail: karachik@susu.ru

Elementary solution of a biharmonic equation is introduced in analogy to the known elementary solution of the Laplace equation. Relation of this elementary solution with the elementary solution of the Laplace equation gets determined. Depending on dimensionality of space in which a boundary problem is being under research, a symmetric function of two variables gets determined in explicit form through the introduced elementary solution. Then it gets proved that this function possesses properties of Green's function of the Dirichlet problem for biharmonic equation in a unit ball. Two cases when space dimensionality equals two and when space dimensionality is more than two are being researched separately. Analogous to Green's function of the Dirichlet problem for Poisson's equation in a ball, there is expansion of Green's function of the Dirichlet problem for biharmonic equation in a ball in the full, orthogonal-at-the-unit-sphere, system of homogenous harmonic polynominals. This is to be done in case when space dimensionality is more than four. Using the obtained expansion of Green's function, integral gets calculated by a ball with the kernel out of Green's function from a homogenous harmonic polynominal multiplied by the positive degree of norm of the independent variable. The obtained results get complied with the previously known results in this sphere.

Keywords: Dirichlet problem; biharmonic equation; Green's function.

### References

1. Bitsadze A.V. *Uravneniya matematicheskoy fiziki* (Equations of Mathematical Physics), Moscow, Nauka Publ., 1982, 336 p. (in Russ.).

2. Wang Y., Ye L. Biharmonic Green function and biharmonic Neumann function in a sector. *Complex Variables and Elliptic Equations*, 2013, Vol. 58, no. 1, pp. 7–22. DOI: 10.1080/17476933.2010.551199

3. Wang Y. Tri-harmonic boundary value problems in a sector. *Complex Variables and Elliptic Equations*, 2014, Vol. 59, Issue 5, pp. 732–749. DOI: 10.1080/17476933.2012.759566

4. Constantin E., Pavel N.H. Green function of the Laplacian for the Neumann problem in  $\mathbb{R}^{n}_{+}$ . *Libertas Mathematica*, 2010, Vol. 30, pp. 57–69.

5. Begehr H., Vaitekhovich T. Modified harmonic Robin function. *Complex Variables and Elliptic Equations*, 2013, Vol. 58, Issue 4, pp. 483–496. DOI: 10.1080/17476933.2011.625092

6. Sadybekov M.A., Torebek B.T., Turmetov B.Kh. On an explicit form of the Green function of the third boundary value problem for the Poisson equation in a circle. *AIP Conf. Proc.*, 2015, Vol. 1611, pp. 255–260. DOI: 10.1063/1.4893843

7. Sadybekov M.A., Torebek B.T., Turmetov B.Kh. On an explicit form of the Green function of the Robin problem for the Laplace operator in a circle. *Advances in Pure and Applied Mathematics*, 2015, Vol. 6, Issue 3, pp. 163–172. DOI: 10.1515/apam-2015-0003

8. Kal'menov T.Sh., Koshanov B.D., Nemchenko M.Yu. Green function representation in the Dirichlet problem for polyharmonic equations in a ball. *Dokl. Math.*, 2008, Vol. 78, Issue 1, pp. 528–530. DOI: 10.1134/S1064562408040169

9. Kal'menov T.Sh., Suragan D. On a new method for constructing the Green Function of the Dirichlet problem for the polyharmonic equation. *Differ. Equ.*, 2012, Vol. 48, Issue 3, pp. 441–445. DOI: 10.1134/S0012266112030160

10. Karachik V.V., Antropova N.A. On polynomial solutions to the Dirichlet problem for a biharmonic equation in a ball. *Sibirskii Zhurnal Industrial'noi Matematiki*, 2012, Vol. 15, no. 2, pp. 86–98. (in Russ.).

11. Karachik V.V. Green Function of the Dirichlet Boundary Value Problem for Polyharmonic Equation in a Ball Under Polynomial Data. *Izvestiya of Saratov University. New Series. Series Mathematics. Mechanics. Informatics*, 2014, Vol. 14, no. 4(2), pp. 550–558. (in Russ.).

12. Karachik V.V., Turmetov B.Kh. *Matematicheskie Trudy*, 2018, Vol. 21, no. 1, pp. 17–34. (in Russ.).

13. Sadybekov M.A., Torebek B.T., Turmetov B.K. Representation of the Green's function of the exterior Neumann problem for the Laplace operator. *Siberian Mathematical Journal*, 2017, Vol. 58, no. 1, pp. 153–158. DOI: 10.1134/S0037446617010190

14. Sadybekov M.A., Torebek B.T., Turmetov B.Kh. Representation of Green's function of the Neumann problem for a multi-dimensional ball. *Complex Variables and Elliptic Equations*, 2016, Vol. 61, no. 1. pp. 104–123. DOI: 10.1080/17476933.2015.1064402

15. Karachik V.V. On one set of orthogonal harmonic polynomials. *Proceedings of American Mathematical Society*, 1998, Vol. 126, no. 12, pp. 3513–3519. DOI: 10.1090/S0002-9939-98-05019-9

16. Bateman H., Erdelyi A. *Higher transcendental functions*. Vol. 2. McGraw-Hill, New York-London, 1953, 396 p.

17. Karachik V.V. Construction of Polynomial Solutions to the Dirichlet Problem for the Polyharmonic Equation in a Ball. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2014, Vol. 54, Issue 7, pp. 1122–1143. DOI: 10.1134/S0965542514070070

18. Vladimirov V.S. *Uravneniya matematicheskoy fiziki* (Equations of mathematical physics), Moscow, Nauka Publ., 1981, 512 p. (in Russ.).

19. Karachik V.V. Solution of the Dirichlet problem with polynomial data for the polyharmonic equation in a ball. *Differential Equations*, 2015, Vol. 51, no. 8, pp. 1033–1042. DOI: 10.1134/S0012266115080078

20. Karachik V.V. On an expansion of Almansi type. *Mathematical Notes*, 2008, Vol. 83, pp. 335–344. DOI: 10.1134/S000143460803005X

21. Karachik V.V. Construction of polynomial solutions to some boundary value problems for Poisson's equation. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2011, Vol. 51, no. 9, pp. 1567–1587. DOI: 10.1134/S0965542511090120

22. Karachik V.V. A Neumann-type problem for the biharmonic equation. *Siberian Advances in Mathematics*, 2017, Vol. 27, Issue 2, pp. 103–118. DOI: 10.3103/S105513441702002X

Received June 8, 2018

# RECOVERING OF LOWER ORDER COEFFICIENTS IN FORWARD-BACKWARD PARABOLIC EQUATIONS

### S.G. Pyatkov, E.S. Kvich

Yugra State University, Hanty-Mansiisk, Russian Federation E-mail: pyatkov@math.nsc.ru

> We study the issue of recovering a lower order coefficient depending on spatial variables in a forward-backward parabolic equation of the second order. The overdetermination condition is an analog of the final overdetermination condition. A solution at the initial and final moments of time is given. Equations of this type often appear in mathematical physics, for example, in fluid dynamics, in transport theory, geometry, population dynamics, and some other fields. Conditions on the data are reduced to smoothness assumptions and some inequalities for the norms of the data. So it is possible to say that the obtained results are local in a certain way. Under some condition on the data, we prove that the problem is solvable. Uniqueness of the theorem is also described. The arguments rely on the generalized maximum principle and the solvability of theorems of the periodic direct problem. The results generalize the previous knowledge about the multidimensional case. The used function spaces are the Sobolev spaces.

> Keywords: inverse problem; final overdetermination; forward-backward parabolic equation; solvability; periodic condition.

#### 1. Introduction

Let G be a bounded. The inverse problems is studied in the cylinder  $Q = G \times (0,T)$ ,  $S = \Gamma \times (0,T)$ ,  $\Gamma = \partial G$ . The problem is stated as follows: find a pair of functions u(x,t) and  $\lambda(x)$  satisfying the equation

$$g(x,t)u_t - Lu = \lambda(x)u + f(x,t), (x,t) \in Q,$$
(1)

and the boundary conditions

$$Bu|_{S} = \varphi(x,t), \tag{2}$$

$$u(x,0) = u(x,T) = u_0(x).$$
(3)

Here the operator *L* is of the form  $Lu = \sum_{i,j=1}^{n} \partial_{x_j} a_{ij}(x)u_{x_i} - \sum_{i=1}^{n} a_i(x)u_{x_i} - a_0(x)u$  and Bu = u or

 $Bu = \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}u_{x_i}v_j + \sigma(x)u$ , where  $v_j$  are the components of the outer unit normal to  $\Gamma$ . We assume that the coefficients of the operator L and the boundary operator B as well as the corresponding function spaces are real. The definitions of the function spaces involved can be found, for instance, in [1]. The operator L is elliptic, i. e., there exists a constant  $\delta_0 > 0$  such that

$$\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}(x)\xi_i\xi_j \ge \delta_0 |\xi|^2 \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n, x \in G, a_{ij} = a_{ji} \text{ for all } i, j$$

The inverse problems of the form (1)–(3) in the case of positive function g(x,t) are studied in many articles (see [2–5] and the bibliography therein). In our case the function g(x,t) can change a sign, i. e., we deal with the forward-backward parabolic equation. Equations of this type often appear in mathematical physics, for example, in fluid dynamics while studying fluid motion with alternating coefficient of viscosity, in transport theory while describing the process of particles motion in some environment. Such equations also occur in geometry, population dynamics, and some other fields. Sufficient number of examples is given in [6]. The boundary value problems for equations of the form (1) are studied in many articles (see, for instance, [7, 8]). The inverse problem of finding the right-hand side in (1) is studied in [9, 10, 12, 13]. We generalize here the results of the article [13]. Our conditions on the coefficients are more general (in particular, the function in front of the derivative in time can depend on t) and moreover, we prove solvability for an arbitrary n ( $n \le 3$  in [13]).

# 2. Preliminaries

Let  $E = L_2(G)$ . The inner product in E is defined by the equality  $(u,v) = \int_G u(x)v(x)dx$ . Let  $D(L) = \{v \in W_2^2(G) : Bv|_{\Gamma} = 0\}$ . The space  $H_1$  agrees with with  $W_2^1(G)$  in the case of Dirichlet boundary conditions and with  $W_2^1(G)$  in the case of conditions of the third boundary value problem. The space  $H_1$  is the completion of E in the norm

$$\|v\|_{H_1} = \sup_{w \in H_1, w \neq 0} |(v, w)| / \|w\|_{H_1},$$

i. e., it is a negative space constructed on the pair of  $H_1, E$ . The operator L extends to an operator of the class  $L(H_1, H_1')$  which is the space of linear continuous operator defined on  $H_1$  with values in  $H_1'$ . Define the space

$$W = \{ u \in L_2(0,T; W_2^1(G)) : u_t, u_{tt} \in L_2(0,T; W_2^1(G)), \ \partial_t^k u(x,0) = \partial_t^k u(x,T) \ (k = 0,1) \}.$$

where  $\partial_t^k$  are generalized derivatives in the Sobolev sense. By  $W_0$  we mean the subspace of W of functions satisfying the homogeneous Dirichlet conditions in S. Define the norm

$$|| u ||_{W} = \sum_{i=0}^{2} || \partial_{i}^{i} u ||_{L_{2}(0,T;H_{1})}$$

Next, we present the condition on the data of the problem. We assume that

 $a_{ij} \in W^1_{\infty}(G), \ a_i \in W^1_p(G) \ (i, j = 1, ..., n) \text{ and } a_0 \in L_p(G);$  (4)

$$g, g_t, g_{tt} \in L_{\infty}(0, T; L_p(G)), \partial_t^k g(x, 0) = \partial_t^k g(x, T) \ (k = 0, 1),$$
(5)

where p > n/2 for n > 2 and p > 1 for  $n \le 2$ ;

(i)  $f, f_t, f_{tt} \in L_2(0,T;H_1), \ \partial_t^k f(x,0) = \partial_t^k f(x,T) (k=0,1);$ 

(ii)  $\varphi, \varphi_t, \varphi_{tt} \in L_2(S)$ ,  $\partial_t^i \varphi(x,0) = \partial_t^i \varphi(x,T)$  (i=0,1) in the case of the Robin boundary conditions and there exists a function  $\Phi(x,t) \in W$  such that  $\Phi|_S = \varphi$  in the case of the Dirichlet boundary conditions (this function  $\Phi$  exists if, for instance, if  $\varphi, \varphi_t, \varphi_{tt}, \varphi_{tt} \in L_2(0,T; W_2^{1/2}(\Gamma))$ ) and  $\partial_t^i \varphi(x,0) = \partial_t^i \varphi(x,T)$  (i=0,1,2)).

(iii) there exists a constant  $\delta_1 > 0$  such that  $a_0(x) + \alpha g_t(x,t) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n a_{ix_i}(x) > \delta_1 > 0$  for all  $\alpha \in [-1/2, 3/2]$  and a.a.  $(x,t) \in Q$ ;

(iv)  $\sigma(x) \in L_{\infty}(\Gamma)$  and  $\sigma(x) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} a_i v_i \ge 0$  for a. a.  $x \in \Gamma$  in the case of the Robin boundary conditions.

A pair of functions  $u(x,t), \lambda(x)$  is called a solution to problem (1)–(3) if  $\lambda(x) \in L_{n/2}(G)$  for n > 2,  $\lambda(x) \in L_p(G)$  with some p > 1 for  $n \le 2$ ,  $u \in W$  in the case of Robin boundary conditions,  $u - \Phi \in W_0$  in the case of the Dirichlet boundary conditions, the conditions (2), (3) holds, and

$$\int_{G} gu_t v + \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij} u_{x_i} v_{x_j} + \sum_{i=1}^{n} a_i u_{x_i} v + a_0 uv dQ + \int_{\Gamma} \sigma uv - \varphi v d\Gamma = \int_{G} \lambda uv + fv dG,$$
(6)

 $\forall v \in H_1$ , where the integral over  $\Gamma$  is absent in the case of the Dirichlet boundary conditions.

Consider an auxiliary problem

$$Mu = g(x,t)u_t - Lu = f(x,t), (x,t) \in Q,$$
(7)

$$u(x,0) = u(x,T), Bu|_{S} = \varphi(x,t).$$
 (8)

We can state that

**Theorem 1.** Under the conditions (4)–(5), (i)–(iv) there exists a unique solution to the problem (7), (8) such that  $u \in W$  in the case of the Robin boundary conditions and  $u - \Phi \in W_0$  in the case of the Dirichlet boundary conditions. A solution satisfies the estimate

$$\| u - \Phi \|_{W} \le c_{0} \sum_{i=0}^{2} \| \partial_{t}^{i} (f - M\Phi) \|_{L_{2}(0,T;H_{1}')}$$
(9)

in the case of the Dirichlet boundary condition and the estimate

$$\|u\|_{W} \le c_{0} \sum_{i=0}^{2} (\|\partial_{t}^{i} f\|_{L_{2}(0,T;H_{1})} + \|\partial_{t}^{i} \varphi\|_{L_{2}(S)})$$
(10)

in the case of the Robin boundary conditions, where the constant  $c_0$  is some absolute constant c multiplied by the quantity  $1/\min(\delta_1, \delta_0)$ .

**Proof.** We can refer to Theorem 3 in [8], where the corresponding result is stated in an abstract form. We need only to check the conditions of this theorem. In the case of the Dirichlet boundary condition Theorem 1 is reduced to Theorem 3 in [8] after the change of variables  $u = v + \Phi$ . The corresponding check relies on the embedding theorems and the condition of the theorem.

### 3. Main results

In this section we consider the inverse problem in question. To justify the corresponding results below, we employ the generalized maximum principle. So we need to impose some additional conditions on the data.

(v)  $g(x,t) \in L_{\infty}(Q)$ ,  $f, f_t \in L_{\infty}(Q)$ ;  $\varphi, \varphi_t \in L_{\infty}(S)$ ,  $u_0(x) \in W_{\infty}^2(G)$  and there exists a constant  $\delta_2 > 0$  such that  $u_0(x) \ge \delta_2$ ;

(vi) there exists a constant  $\delta_3 > 0$  such that  $a_0(x) + g_t(x,t) \ge \delta_3 > 0$  for a.a.  $(x,t) \in Q$ ;

(vii) in the case of the Robin boundary conditions, we have that  $\sigma(x) \in C^1(\Gamma)$ , either  $\sigma(x) \ge \delta_4 > 0$ 

for some constant  $\delta_4$  and all  $x \in \Gamma$  or  $\sigma(x) \ge 0$  and  $\varphi(x,t) \equiv 0$ ,  $\varphi(x,t) \in W_2^{1/4,1/2}(S)$ , and

 $\| g(x,0) \|_{L_{\infty}(G)} R_{1} \leq vraimin_{G}(Lu_{0} + f(x,0)), R_{1} = \max(\| \varphi_{t} \|_{L_{\infty}(S)} / \delta_{4}, \| f_{t} \|_{L_{\infty}(Q)} / \delta_{3});$ 

(viii) in the case of the Dirichlet boundary conditions we have that  $\varphi(x,t) \in W_2^{3/4,3/2}(S)$  and

$$\|g(x,0)\|_{L_{\infty}(G)} R_2 \le vraimin_G(Lu_0 + f(x,0)), R_2 = \max(\|\varphi_t\|_{L_{\infty}(S)}, \|f_t\|_{L_{\infty}(Q)} / \delta_3).$$

**Theorem 2.** Under the conditions (4)–(6), (i)–(viii), there exists a solution  $u \in W \cap L_2(0,T;W_2^2(G))$ ,  $\lambda \in L_{\infty}(G)$  to the problem (1)–(3).

**Proof.** Consider the problem

$$M_0 u = g(x,t)u_t - Lu - \lambda(x)u = f(x,t), (x,t) \in Q,$$
(11)

$$u(x,0) = u(x,T), Bu|_{S} = \varphi(x,t),$$
 (12)

where we assume that  $\lambda(x) \leq 0$  a. a. in *G*. In view of Theorem 1, for a fixed  $\lambda \in B_R = \{\lambda(x) \in L_p(G), \lambda(x) \leq 0 \text{ a.e.}, \|\lambda\|_{L_p(G)} \leq R\}$ , where  $p \geq n/2$  for n > 2 and p > 1 for  $n \leq 2$ , there exists a unique solution to the problem (11), (12) from the class *W*. This solution satisfies the estimate

$$\|u - \Phi\|_{W} \le c_{0} \sum_{i=0}^{2} \|\partial_{t}^{i}(f - M\Phi)\|_{L_{2}(0,T;H_{1}')} + c_{0} \sum_{i=0}^{2} \|\lambda(x)\partial_{t}^{i}\Phi\|_{L_{2}(0,T;H_{1}')}$$
(13)

in the case of the Dirichlet boundary condition and the estimate

$$\| u \|_{W} \le c_{0} \sum_{i=0}^{2} (\| \partial_{t}^{i} f \|_{L_{2}(0,T;H_{1})} + \| \partial_{t}^{i} \varphi \|_{L_{2}(S)})$$
(14)

in the case of the Robin boundary conditions. In view of the embedding  $W_2^1(G) \subset L_{2n/(n-2)}(G)$  (see [1]) we have (let, n > 2, for example)

 $|(\lambda(x)\partial_t^i\Phi, v)| \leq c \|\lambda\|_{L_{n/2}(G)} \|\partial_t^i\Phi\|_{W_2^1(G)} \|v\|_{W_2^1(G)}$ 

and thus

$$\|\lambda(x)\partial_{t}^{i}\Phi\|_{L_{2}(0,T;H_{1}^{'})} \leq c \|\lambda\|_{L_{p}(G)} \|\partial_{t}^{i}\Phi\|_{L_{2}(0,T;W_{2}^{1}(G))}.$$
(15)

Using the conditions on the data and (15), we can rewrite (13) in the form

$$\| u \|_{W} \le c_{2} \sum_{i=0}^{2} (\| \partial_{t}^{i} f \|_{L_{2}(0,T;H_{1})} + \| \Phi \|_{W}) + c_{3} \| \lambda \|_{L_{p}(G)},$$
(16)

where the constants  $c_2$ ,  $c_3$  are independent of  $\lambda$ , u. Differentiate the equality (6) with respect t to and take  $v = (u_t - k)^+$ , with  $(u_t - k)^+ = u_t - k$  if  $u_t \ge k$  and  $(u_t - k)^+ = 0$  otherwise. Take k > 0 and as before assume that  $\lambda \in B_R$ . First, consider the case of the Robin boundary conditions and assume that  $\varphi \ne 0$ . Integrating with respect t to and by parts we infer

$$\int_{Q^{i,j=1}}^{n} a_{ij} v_{x_i} v_{x_j} + (a_0 + \frac{1}{2}g_t - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} a_{ix_i})v^2 + (a_0 + g_t)kvdQ + \int_{S} (\sigma + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} a_i v_i)v^2 + \sigma kv - \varphi_t vdS = \int_{Q} \lambda u_t v + f_t vdQ.$$
(17)

Here we employ the transformations of the type  $au_tv = a(u_t - k)v + akv = av^2 + akv$ . This equality can be rewritten in the form (see the conditions (iv), (vii) and the ellipticity condition)

$$\int_{Q} \delta_{0} |\nabla v|^{2} + \delta_{1} v^{2} + \delta_{3} k v dQ + \int_{S} \delta_{4} k v - \varphi_{t} v dS \leq \int_{Q} f_{t} v dG.$$

Choosing  $k \ge \|f_t\|_{L_{\infty}(Q)} / \delta_3$  here and  $k \ge \|\varphi_t\|_{L_{\infty}(S)} / \delta_4$ , we arrive at the inequality

$$\int_{G} \delta_0 |\nabla v|^2 + \delta_1 v^2 dQ \le 0$$

and, therefore, v = 0 a. e. or  $u_t(x,t) \le k = \max(||f_t||_{L_{\infty}(Q)} / \delta_3, ||\varphi_t||_{L_{\infty}(S)} / \delta_4) = R_1$ . Similar arguments applied to a function  $-u_t$  yield the estimate

$$u_{t}(x,t) \parallel_{L_{\infty}(G)} \le \max(\parallel f_{t} \parallel_{L_{\infty}(Q)} / \delta_{3}, \parallel \varphi_{t} \parallel_{L_{\infty}(S)} / \delta_{4}) = R_{1}.$$
(18)

In the case of the Dirichlet boundary condition an analog of the equality (17) is written as

$$\int_{Q^{i},j=1}^{n} a_{ij} v_{x_i} v_{x_j} + (a_0 + \frac{1}{2}g_t - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} a_{ix_i})v^2 + (a_0 + g_t)kvdQ = \int_{Q}^{n} \lambda u_t v + f_t v dQ,$$
(19)

if we take  $k \ge \|\varphi_t\|_{L_{\infty}(S)}$ . In this case we obtain the estimate

$$\|u_t(x,t)\|_{L_{\infty}(G)} \le \max(\|f_t\|_{L_{\infty}(Q)} / \delta_4, \|\varphi_t\|_{L_{\infty}(S)}) = R_2.$$
(20)

Consider the mapping  $A(\lambda) = (g(x,0)u(x,0) - Lu_0 - f(x,0))/u_0(x)$ , where *u* is a solution to the problem (11), (12). Let  $\lambda \in B_R$ , with  $R = \mu^{1/p}(G)(||g(x,0)||_{L_{\infty}(G)} R_i + ||Lu_0||_{L_{\infty}(G)} + ||f(x,0)||_{L_{\infty}(G)})$ , where *i*=1 in the case of the Robin boundary conditions and *i*=2 otherwise, and  $\mu(G)$  is the Lebesgue measure of *G*. Demonstrate that this operator *A* takes a set  $B_R$  into itself and is compact. Let  $\lambda \in B_R$ . As we have proven, the inequalities (18), (20) hold and the conditions (vii), (viii) imply that  $||A(\lambda)||_{L_p(G)} \leq 0$  a.e. Next, the definition of the quantity and the estimates (14), (20) imply that  $||A(\lambda)||_{L_p(G)} \leq R$ , i. e., takes the set  $B_R$  into itself. The continuity of the mapping  $A(\lambda)$  is obvious. Demonstrate that it is compact. Consider a sequence  $\lambda_n$  with  $\lambda_n \in B_R$ . The corresponding sequence of solutions satisfies the estimates (13), (14), (18), (20) and thus the sequence is bounded as well as the sequence  $||u_{nt}||_{L_{\infty}(Q)}$ . Moreover,

$$\|A(\lambda)\|_{L_{\infty}(G)} \le R/\mu^{1/p}(G).$$

$$\tag{21}$$

Fix  $p_0 < 2n/(n-2)$  in the case of n > 2 and is  $p_0$  arbitrary if  $n \le 2$ . The sequence  $||u_{nt}||_{W_2^1(0,T;W_2^1(G))}$ is bounded and thus so is the sequence  $||u_{nt}||_{C([0,T];W_2^1(G))}$ . In this case there exists a subsequence  $u_{n_k}$ such that  $u_{n_k}(x,0) \rightarrow v(x)$  in  $L_{p_0}(G)$  (the embedding theorems). Extracting one more subsequence if necessary we can assume that  $u_{n_k}(x,0) \rightarrow v(x)$  a. e. in Lemma 3.2 of Ch.2 in [14] implies that  $u_{n_k}(x,0) \rightarrow v(x)$  in any  $L_q(G)$ . We have proven that the mapping is compact. By Schauder fixed point theorem, the equation is solvable on the set  $B_R$ . Consider the equation (11). Since  $u \in W$ , every summand in this equation belongs  $C([0,T];H_1)$  to after a possible change on a set of zero measure. So we can take the trace at t = 0. We obtain that

 $g(x,0)u_t(x,0) - Lu(x,0) = \lambda(x)u(x,0) + f(x,0).$ 

The equation  $A(\lambda) = \lambda$  can be rewritten as

 $g(x,0)u_t(x,0) - Lu_0(x) = \lambda(x)u(x,0) + f(x,0).$ 

Subtracting these equalities and using the uniqueness theorem for solutions to the problem  $Lv + \lambda v = 0$ ,  $Bv|_{\Gamma} = 0$ , we conclude that  $u(x,0) = u_0(x)$ . Next, we note that the conditions  $u_t(x,t) \in L_{\infty}(Q)$  and  $u_t(x,t) \in C([0,T]; L_2(G))$  (we can state even that  $u_t(x,t) \in C([0,T]; W_2^1(G))$ ) imply that  $u_t(x,t) \in L_{\infty}(G)$  for every t. Hence, in view of the equality  $A(\lambda) = \lambda$  we have that  $\lambda \in L_{\infty}(G)$ . Rewrite the equation (11) in the form

 $Lu = gu_t + \lambda(x)u - f(x,t) \in L_{\infty}(Q).$ 

In view of the conditions (vii), (viii) and the classical results on solvability of elliptic problem (see [14]), we can conclude that  $u \in L_2(0,T;W_2^2(G))$ .

In the next theorem we expose the uniqueness conditions. The proof coincides with that in [13, Theorem 6]. So we omit it.

**Theorem 3.** Let the conditions of Theorem 2 hold and

$$\|g\|_{L_{\infty}(Q)} R_i / \delta_2 < 1,$$

where i = 1 in the case of the Robin boundary conditions and i = 2 otherwise. Then a solution  $(u, \lambda)$  to the problem (1)–(3) from the class pointed out in the claim of Theorem 2 is unique.

Acknowledgement. The authors were supported by the grant on development of scientific schools with participation of young scientists of the Yugra State University.

### References

1. Triebel H. Interpolation Theory, Function Spaces, Differential Operators. *North-Holland Mathematical Library*, North-Holland Publishing, Amsterdam, 1978, Vol. 18. DOI: 10.1016/s0924-6509(09)x7004-2

2. Ivanchov M. Inverse problems for equations of parabolic type. *Mathematical Studies Monograph Series 10*, Lviv, WNTL Publishers, 2003, 238 p.

3. Kozhanov A.I. Composite Type Equations and Inverse Problems. Berlin, Boston: De Gruyter, 1999.

4. Isakov V. Inverse Problems for Partial Differential Equations. *Appl. Math. Sci.*, Berlin, Springer, Cham, 2006, Vol. 127, 344 p. DOI: 10.1007/978-3-319-51658-5

5. Prilepko A.I., Orlovsky D.G., Vasin I.A. *Methods for solving inverse problems in Mathematical Physics*. New-York: Marcel Dekker, Inc. 1999.

6. Greenberg W., Van der Mee C.V.M., Zweifel P.F. Generalized kinetic equations. *Integral Equations and Operator Theory*, 1984, Vol. 7, Issue 1, pp. 60–95. DOI: 10.1007/BF01204914.

7. Pyatkov S.G., Popov S.V., Antipin V.I. On solvability of boundary value problems for kinetic operator-differential equations. *Integral Equations and Operator Theory*, 2014, Vol. 80, Issue 4, pp. 557–580. DOI: 10.1007/s00020-014-2172-7

8. Abasheeva N.L. Razreshimost' periodicheskoy kraevoy zadachi dlya operatornodifferentsial'nogo uravneniya smeshannogo tipa (The solvability of a periodic boundary-value problem

for an operator-differential equation of mixed type). Vestnik NGU. Seriya: Matematika, mekhanika, informatika, 2001, Vol. 1, no. 2, pp. 3–18. (in Russ.).

9. Abasheeva N.L. Determination of a right-hand side term in an operator-differential equation of mixed type. *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*, 2002, Vol. 10, Issue 6, pp. 547–560. DOI: 10.1515/jiip.2002.10.6.547

10. Pyatkov S.G. Razreshimost' lineynoy obratnoy zadachi dlya odnogo klassa singulyarnykh parabolicheskikh uravneniy (The solvability of a linear inverse problem for several classes of singular parabolic equations). *Obratnye zadachi i informatsionnye tekhnologii*, 2002, Vol. 1, no. 2, pp. 115–123. (in Russ.).

11. Pyatkov S.G. Operator Theory. Nonclassical problems, Utrecht-Boston-Köln-Tokyo: VSP, 2002, 348 p.

12. Kaliev I.A., Mugafarov M.F., Fattahova O.V. Inverse problem for forward-backward parabolic equation with generalized conjugation conditions. *Ufa mathematical journal*, 2011, Vol. 3, no. 2, pp. 33–41.

13. Abasheeva N.L. Some inverse problems for parabolic equations with changing time direction. *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*, 2004, Vol. 12, no. 4, pp. 337–348. DOI: 10.1515/1569394042248265

14. Ladyzhenskaya O.A., Solonnikov V.A., Ural'tseva N.N. *Linear and Quasilinear Elliptic Equations. Vol.* 46, New-York: Academic Press, 1968, 495 p.

Received April 24, 2018

Bulletin of the South Ural State University Series "Mathematics. Mechanics. Physics" 2018, vol. 10, no. 4, pp. 23–29

#### УДК 517.956

DOI: 10.14529/mmph180403

# ВОССТАНОВЛЕНИЕ МЛАДШИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ В ПАРАБОЛИЧЕСКОМ УРАВНЕНИИ С МЕНЯЮЩИМСЯ НАПРАВЛЕНИЕМ ВРЕМЕНИ

### С.Г. Пятков, Е.С. Квич

Югорский государственный университет, г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация E-mail: pyatkov@math.nsc.ru

Рассматривается обратная задача восстановления младшего коэффициента, зависящего от пространственных переменных, в параболическом уравнении второго порядка с меняющимся направлением времени. Условие переопределения – аналог условия финального переопределения. Решение задается в начальный и конечный момент времени. Уравнения такого типа возникают в математической физике, в задачах гидродинамики, в теории переноса, геометрии, популяционной динамике, и некоторых других областях. Условия на данные сводятся к условиям гладкости и некоторым неравенствам для норм данных. В силу этого можно сказать, что полученные результаты являются в некоторой степени локальными. При выполнении условий на данные доказано, что задача разрешима. Получена также и теорема единственности при несколько более жестких условиях. Задача сводится к операторному уравнению, разрешимость которого устанавливается при помощи априорных оценок и теоремы Лерэ-Шаудера. Доказательства априорных оценок основаны на обобщенном принципе максимума и теоремах о разрешимости периодической задачи. Полученное решение является обобщенным решением и уравнение удовлетворяется в смысле интегрального тождества. Результаты обобщают уже известные на многомерный случай. Используемые функциональные пространства есть пространства Соболева.

Ключевые слова: обратная задача; финальное переопределение; параболическое уравнение с меняющимся направлением времени; разрешимость, периодическое условие.

#### Литература

1. Triebel, H. Interpolation Theory, Function Spaces, Differential Operators, North-Holland Mathematical Library, Vol. 18 / H. Triebel. – North-Holland Publishing, Amsterdam, 1978. DOI: 10.1016/s0924-6509(09)x7004-2

2. Ivanchov, M. Inverse problems for equations of parabolic type / M. Ivanchov // Mathematical Studies Monograph Series 10. – Lviv: WNTL Publishers, 2003. – 238 p.

3. Kozhanov, A.I. Composite Type Equations and Inverse Problems / A.I. Kozhanov. – Berlin, Boston: De Gruyter, 1999.

4. Isakov, V. Inverse Problems for Partial Differential Equations / V. Isakov / Appl. Math. Sci. – Berlin: Springer, Cham, 2006. – Vol. 127. – 344 p.

5. Prilepko, A.I. Methods for solving inverse problems in Mathematical Physics / A.I. Prilepko, D.G. Orlovsky, I.A. Vasin. – New-York: Marcel Dekker, Inc., 1999.

6. Greenberg, W. Generalized kinetic equations / W. Greenberg, C.V.M. Van der Mee, P.F. Zweifel // Integral Equations and Operator Theory. – 1984. – Vol. 7. – Issue 1. – P. 60–95.

7. Pyatkov, S.G. On solvability of boundary value problems for kinetic operator-differential equations / S.G. Pyatkov, S.V. Popov, V.I. Antipin // Integral Equations and Operator Theory. – 2014. – Vol. 80, Issue 4. – P. 557–580.

8. Абашеева, Н.Л. Разрешимость периодической краевой задачи для операторнодифференциального уравнения смешанного типа / Н.Л. Абашеева // Вестник НГУ. Серия: Математика, механика, информатика. – 2001. – Т. 1, № 2. – С. 3–18.

9. Abasheeva, N.L. Determination of a right-hand side term in an operator-differential equation of mixed type / N.L. Abasheeva // Journal of Inverse and Ill-posed Problems. – 2002. – Vol. 10. – Issue 6. – P. 547–560.

10. Пятков, С.Г. Разрешимость линейной обратной задачи для одного класса сингулярных параболических уравнений / С.Г. Пятков // Обратные задачи и информационные технологии. – 2002. – Т. 1, № 2. – С. 115–123.

11. Pyatkov, S.G. Operator Theory. Nonclassical problems / S.G. Pyatkov. – Utrecht-Boston-Köln-Tokyo: VSP, 2002. – 348 p.

12. Калиев, И.А. Обратная задача для параболического уравнения с переменным направлением времени с обобщенными условиями сопряжения / И.А. Калиев, М.Ф. Мугафаров, О.В. Фаттахова // Уфимский математический журнал. – 2011. – Т. 3, Вып. 2. – С. 34–42.

13. Abasheeva, N.L. Some inverse problems for parabolic equations with changing time direction / N.L. Abasheeva // Journal of Inverse and Ill-posed Problems. – 2004. – Vol. 12, no. 4. – P. 337–348.

14. Ladyzhenskaya, O.A. Linear and Quasilinear Elliptic Equations. Vol. 46 / O.A. Ladyzhenskaya, V.A. Solonnikov, N.N. Ural'tseva. – New-York: Academic Press, 1968. – 495 p.

#### Поступила в редакцию 24 апреля 2018 г.

# ON DETERMINATION OF MINOR COEFFICIENT IN A PARABOLIC EQUATION OF THE SECOND ORDER

#### E.I. Safonov

Ugra State University, Khanty-Mansyisk, Russian Federation E-mail: dc.gerz.hd@gmail.com

> An inverse problem of recovering the minor time-dependent coefficient in a parabolic equation of the second order is considered. The unknown coefficient is the controlling parameter. The inverse problem lies in finding the solution of an initial-boundary value problem for this parabolic equation and this timedependent coefficient using data of the initial-boundary value problem and point conditions of overdetermination. Cases of the Dirichlet boundary conditions and oblique derivative conditions are considered. Conditions under which the theorem of existence and solution uniqueness is applicable for the given inverse problem is described; the numerical solution method is described, and its justification is given. All the considerations are carried out in Sobolev spaces. Solution of the direct problem is based on the finite element method and the finite difference method. The proposed algorithm for the numerical solution consists of three stages: initialization of the massive that describes geometry of the area and the boundary vector; implementation of integrative calculation of the desired coefficient using the finite element method; implementation of the finite difference method. Results of numerical experiments are presented, and numerical solution of the model inverse problem is constructed in the case of Neumann boundary conditions; dependency of an error in calculation of the controlling parameter on the variation of the equation coefficients and the noise level of the overdetermination data for domains with different number of nodes that depend on an observation point is described. Results of the calculations show a good convergence of the method. In the case when introduced noise level is 10 %, the error between the desired and the obtained solution increases from 8 to 35 times, though the graph of recovered coefficient remains close to the solution graph and repeats its outlines.

Keywords: finite element method; parabolic equation; inverse problem.

### Introduction

We consider the question of recovering a lower order coefficient in the parabolic equation

$$u_t - A(x,t,D)u + p(t)u = f(x,t), (x,t) \in Q = G \times (0,T).$$
(1)

where G is a bounded domain in  $\mathbb{R}^n$  with boundary  $\Gamma \in \mathbb{C}^2$  and A is a second order elliptic operator of the form

$$A(x,t,D)u = \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}(x,t)u_{x_ix_j} + \sum_{i=1}^{n} a_i(x,t)u_{x_i} + a_0(x,t)u_{x_i}$$

The equation (1) is furnished with the boundary and initial condition

$$u_{t=0} = u_0, Bu_S = g(t, x), S = \Gamma \times (0, T),$$
(2)

where Bu = u or  $Bu = \frac{\partial u}{\partial \gamma} + \sigma(x,t)u$ . Here  $\gamma = (\gamma_1(x,t), \dots, \gamma_n(x,t))$  is a smooth nontangent vector

field on S. The overdetermination condition is written as

$$u(x_0,t) = \Psi(t). \tag{3}$$

Thus, the problem can be stated as follows: given functions  $\psi$ ,  $u_0$ , g, find a solution u to the equation (1) and the function p(t) such that the equalities (1), (2), and (3) hold. The parameter p is actually a control parameter. This inverse problem is a classical problem and numerous examples can be found in [1–6]. The existence and uniqueness theorems of solutions to this inverse problem are exposed in [7–10]. The articles [7, 8] contains the conditions of global (in time) solvability of this problem and

the local solvability theorems can be found in [9, 10] and some other articles. At last, the articles [11-20] are devoted to numerical calculations of solutions to this problem. The main approach to numerical solving is a reduction of the inverse problem in question to a linear inverse problem by means of the

change of variable  $u = v \exp\left(-\int_0^t p(\tau) d\tau\right)$ . After the change we arrive at a new inverse problem of re-

covering the source function of the form q(t)f(x,t) (the function  $q = \exp\left(\int_{0}^{t} p(\tau)d\tau\right)$  is an unknown

function). The latter problem under the natural conditions on the data is always solvable. However, the inverse change of variables in certain sense is not always possible, since it is not known a priori that the result of recovering, i.e. the function q, is positive (in this case we can determine the function p). The global existence theorems (the most essential results belongs to Prilepko A.I. [7]) rely on the maximum principle and rather rigid conditions for the data. We do not use this change of variables in contrast to other article and this all allows to treat larger classes of the data.

The main numerical methods used in the above-cited articles are the finite difference methods and variational methods. In some cases only some model problems are discussed. In this article we use the theoretical results of the articles [9, 10] which are constructive and can serve as the base of a numerical algorithm. The numerical realization relies on the finite element methods. We expose a numerical algorithm and the results of numerical experiments.

In Sect. 1 we present the theoretical justification of the method. Section 2 is devoted to the algorithm of solving the problem. Section 3 contains the description of the numerical realization of the algorithm and the results of numerical experiments are displayed in Section 4.

### 1. Basic assumptions and auxiliary results

We use the Lebesgue spaces  $L_p(G), L_p(Q)$ , the Sobolev spaces  $W_p^s(G), W_p^s(Q)$   $(1 \le p \le \infty)$ , the Hölder spaces  $C^{\beta}(\overline{G})$ , and the spaces  $L_{p}(0,T;E)$  with E a Banach space. The latter space consists of strongly measurable functions defined on (0,T) with values in E. The definitions of these spaces can be found in [21].

Describe some theoretical results. First, we present the conditions on the data.

Let the symbol  $B_{\delta}(x_0)$  stand for the ball centered at  $x_0$  of radius  $\delta$ . Denote  $Q^{\tau} = (0, \tau) \times G$ , and  $G_{\delta} = B_{\delta}(x_0)$ . A parameter  $\delta > 0$  is called admissible whenever  $\overline{B_{\delta}(x_0)} \subset G$ .

The conditions on the coefficients of A, B are as follows:

$$a_{ij} \in C(\overline{Q}), a_k \in L_p(Q), \gamma_i, \sigma \in C^1(\overline{S}), p > n+2;$$

$$(4)$$

$$a_{ij} \in L_{\infty}\left(0, T; W_{p}^{s}\left(G_{\delta}\right)\right), a_{k} \in L_{p}\left(0, T; W_{p}^{s}\left(G_{\delta}\right)\right), i, j = 1, 2, \dots, n, k = 0, 1, \dots, n,$$
(5)

for some admissible  $\delta > 0$  and s > n/p. We also require that the operator A is elliptic, i. e., there exists a constant  $\delta_0 > 0$  such that

$$\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}\xi_i\xi_j \ge \delta_0 \left|\xi^2\right| \forall \xi \in \mathbb{R}^n, \forall (x,t) \in Q.$$

We assume that

$$u_0(x) \in W_p^{2-2/p}(G), g \in W_p^{2k_0, k_0}(S), B(x, 0)u_0(x)\Big|_{\Gamma} = g(x, 0) \,\forall x \in \Gamma,$$
(6)

where  $k_0 = 1 - 1/2p$  in the case of the Dirichlet boundary conditions and  $k_0 = 1/2 - 1/2p$  otherwise;

$$u_0(x) \in W_p^{2+s-2/p}(G_\delta) \text{ for some admissible } \delta > 0 \text{ and } s > n/p;$$
(7)

$$\psi \in W_p^1(0,T), u_0(x_0) = \psi(0).$$
 (8)

$$|u_0(x_0)| > 0. (9)$$

Now we can state the existence theorem [10].

**Theorem 1.** Let the conditions (4)–(9) hold. Then, for some number  $\tau^0 \in (0,T]$ , on the interval  $(0,\tau^0)$  there exists a unique solution (u, p(t)) to the problem (1)–(3) such that  $u \in L_p(0,\tau^0;W_p^2(G))$ ,  $u_t \in L_p(Q^{\tau^0})$ ,  $q_i(t) \in L_p(0,\tau^0)$ ,  $i = 1,...,m_1$ . Moreover,  $u \in L_p(0,\tau^0;W_p^{2+s}(G_{\delta_1}))$ ,  $u_t \in L_p(0,\tau^0;W_p^s(G_{\delta_1}))$  for all  $\delta_1 < \delta$ .

Next, we present some elements of the proof of this theorem. First, we construct an auxiliary function

$$\Phi_t + L_0 \Phi = f((x,t) \in Q), \Phi_{t=0} = u_0(x), B\Phi_S = g.$$
(10)

The classical results on solvability of parabolic problems ensure that  $\Phi \in W_p^{2,1}(Q)$ ,  $\Phi_t \in L_p(0,T; W_p^s(G_{\delta_1}))$ ,  $\Phi \in L_p(0,T; W_p^{2+s}(G_{\delta_1}))$  for all  $\delta_1 < \delta$ . We have that  $\Phi_t \in W_p^s(G; L_p(0,T))$ and thus we can assume that  $\Phi_t \in C(\overline{G}; L_p(0,T))$ . The function  $w = u - \Phi$ , with u a solution to the problem (1)–(3), is a solution to the problem

$$Lw = -p(t)\Phi = F((x,t) \in Q), w_{t=0} = 0, Bw_S = 0,$$
(11)

$$w(x_0,t) = \tilde{\psi}(t) = \psi(t) - \Phi(x_0,t) \in W_p^1(0,T).$$

$$(12)$$

Fixing the function  $p(t) \in L_p(0,\tau)$  and finding a solution w to the problem (11) on the interval  $(0,\tau)$ , we construct the map  $w = w(p) = L^{-1}F$ . This map is nonlinear. Taking  $x = x_0$  in (11), we infer  $\tilde{\psi}_t - Aw(x_0,t) + p(t)\tilde{\psi} = -p(t)\Phi(x_0,t)$ , (13)

which can be written in the form

$$p(t) = \psi_0(t) + R(p), \psi_0(t) = \frac{-1}{\psi(t)} \tilde{\psi}_t + \frac{1}{\psi(t)} Aw(x_0, t),$$
(14)

where the function w is a solution to the direct problem (11). Note that in view of our conditions  $\psi(t) > 0$  on some segment  $[0, \tau_0]$ . This equation is actually of the Volterra type.

The following theorem was justified in the proof of Theorem 1 in [8].

**Theorem 2.** Let the conditions Theorem 1 hold. Then, for some number  $\tau^0 \in (0,T]$ , on the interval  $(0,\tau^0)$  the operator  $R(p): L_p(0,\tau_0) \to L_p(0,\tau_0)$  is a contraction and thereby the method of successive approximations  $p^{n+1} = \psi_0(t) + R(p^n)$  converges as  $n \to \infty$ .

### 2. Description of the algorithm

Describe a numerical algorithm. We employ the Neumann boundary condition. In other case the changes in the algorithm are inessential. We take n = 2 and rewrite the equation (1) and the data in the form

$$u_{t} - \operatorname{div}(c(x,t)\nabla u) + b(x,t)\nabla u + a(x,t)u + p(t)u = f,$$
  

$$b(x,t) = (b_{1}(x,t), b_{2}(x,t))^{T}, \nabla u = \left(\frac{\partial u}{\partial x_{1}}, \frac{\partial u}{\partial x_{2}}\right)^{T},$$
(15)

$$u_{t=0} = u_0(x), \frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{\partial G \times (0,T)} = g,$$
(16)

where n is the unit outward normal to  $\Gamma$ . We also have that

$$u(x_0,t) = \psi(t). \tag{17}$$

The algorithm is iterative and it is based on the finite element method (FEM).

Given a triangulation of *G*, the nodes of the grid are denoted as  $x_1, x_2, ..., x_m$ . The symbols  $\{\phi_i(x)\}$  stand for the corresponding piecewise linear basis functions. Without loss of generality we can assume that the point  $x_0$  is a mesh node, i. e.,  $x = x_{j_0}$  for some  $j_0$ . We thus have  $\phi_i(x_j) = \delta_{ij}$ , where  $\delta_{ij}$  is the Kronecker symbol.

An approximate solution to the problem (15) is written in the form  $u_m = \sum_{i=1}^m c_i(t)\varphi_i(x)$ . It is defined from the system (we integrate (15) over G with the weight  $\varphi_i$ ).

$$\left(u_{mt},\varphi_{j}\right)+\int_{G}c\nabla u_{m}\nabla\varphi_{j}dx+\int_{G}\left(b\nabla u_{m}+au_{m}+pu_{m}\right)\varphi_{j}dx-\int_{\Gamma}cg\left(t,x\right)\varphi_{j}d\Gamma=\int_{G}f\varphi_{j}dx.$$
(18)

This system for the vector-function  $\vec{C}(t) = (c_1(t), c_2(t), \dots, c_m(t))$  can be written in the form

$$M\vec{C}_t + K\vec{C} + pM\vec{C} = F + G,$$
(19)

where M and K are matrices with the entries  $M_{ji} = \int_G \varphi_i \varphi_j dx$ ,  $K_{ji} = \int_G (c \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j + b \nabla \varphi_i \varphi_j + a \varphi_i \varphi_j) dx$ , F and G are vectors with coordinates  $\int_G f \varphi_j dx$  and  $\int_{\Gamma} cg \varphi_j dx$ , i, j = 1, 2, ..., m, respectively. Let  $\vec{U} = (u_k(x_1), u_k(x_2), ..., u_k(x_m))$ , and thus  $\vec{U}(0) = (u_0(x_1), u_0(x_2), ..., u_0(x_m))$ . An approximate solution to the system (19) is sought by the finite difference method. We replace (19) with the system

$$M \frac{C_i - C_{i-1}}{\tau} + K_i \vec{C}_i + M \vec{P} \vec{C}_i = F_i, \vec{C}_0 = \vec{U} \Big|_{t=0}, i = 1, 2, \dots, N, \tau = T/N,$$
(20)

where *N* is a positive integer,  $K_i = K(i\tau)$  and  $F_i = (F+G)(\tau i)$ . Thus, a piecewise constant approximation of a solution  $\vec{C}(t)$  to the system (19) is equal to the vector  $\vec{C}_i$  on the set  $((i-1)\tau, i\tau]$ . From (17) and the overdetermination condition we have an approximate equality

$$V_0 \psi_t + \int_G c \nabla u_k \nabla \varphi_{j_0} dx + \int_G (b \nabla u_k + a u_k) \varphi_{j_0} dx + p \psi V_0 = \int_G f \varphi_{j_0} dx, \qquad (21)$$

where  $V_0 = \int_G \varphi_{j_0}$ . Hence, we obtain that

$$p = \left(\left(\int_{G} f\varphi_{j_0} dx - \int_{G} c\nabla u_k \nabla \varphi_{j_0} dx - \int_{G} (b\nabla u_k + au_k)\varphi_{j_0} dx\right)/V_0 - \psi_t\right)/\psi,$$
(22)

The equality (22) is an analog of the equation (14) and is used in successive approximations.

#### 3. Numerical realization

Given a triangulation of *G*, we define the nodes  $x_1, x_2, ..., x_m$  of the grid and construct the corresponding piecewise linear basis functions  $\{\varphi_i(x)\}$ . Next, we define the quantity  $\tau = T/N$  and construct the matrices *M*, *K* and the vectors *F<sub>i</sub>*. We employ the predictor-corrector arguments. An approximation of the function p(t) is a piecewise constant function equal  $p_i$  on  $((i-1)\tau, i\tau)$ . Let  $p_0 = (f(x_0, 0) + A(u_0)(x_0, 0) - \psi_i(0))/\psi(0)$ . For simplicity, it is possible to take just  $p_0 = 1$ . We take also  $\vec{C}_0 = \vec{U}(0)$ . Assume that we calculate the vectors  $\vec{C}_1, \vec{C}_2, ..., \vec{C}_l$  and the constants  $p_1, p_2, ..., p_l(l < N)$ . Put  $p_{l+1}^0 = p_l$ . Next, we define the quantities  $p_{l+1}^j(l = 1, 2, ..., N)$  from the equality  $p_{l+1}^{j+1} = \left[\frac{1}{V_0}((F_{l+1})_{j_0} - (K_{l+1}\vec{C}_{l+1}^j)_{j_0}) - \psi_t((l+1)\tau)\right]/\psi((l+1)\tau)$ ,

where the symbol  $(\vec{g})_{j_0}$  denotes the  $j_0$  -coordinate of the vector  $\vec{g}$ , and the quantities  $\vec{C}_{l+1}^{j}$  are defined as

$$\vec{C}_{l+1}^{j} = (M + \tau(K_{l+1} + Mp_{l+1}^{j}))^{-1} (\tau F_{l+1} + M\vec{C}_{l}), l = 0, 1, \dots, N-1.$$

This process continues until  $|p_{l+1}^{j+1} - p_{l+1}^{j}| < \varepsilon_0$ , where  $\varepsilon_0$  is a prescribed small number. Next, we put  $p_{l+1} = p_{l+1}^{j+1}$  and  $\vec{C}_{l+1} = C_{l+1}^{j+1}$ . As a result, we obtain the vectors  $\vec{C}_1, \vec{C}_2, ..., \vec{C}_N$  and the constants  $p_1, p_2, ..., p_N$  which define an approximate solution to our problem for a given triangulation and a parameter  $\tau$ .

### 4. The results of numerical experiments

The characteristics of the computer used: processor Intel(R) Core(TM) i7-3517U, CPU @ 1,90 GHz 2,40 GHz, RAM 10,00 GB, 64-digital operation system Windows 7 Ultimate.

To simplify the exposition, we present the results of calculation of the function p(t) only. We consider the model problem, where  $u = (x^2 + y^2 + 1)(1+t)$ ,  $u_{t=0} = x^2 + y^2 + 1$ ,  $u_t = x^2 + y^2 + 1$ . The domain *G* coincides with the unit disk centered at (0,0). We consider different points  $x_0$  as well as different grids (see the fig. 1).



We examine two groups of the data. For the first group, we have p(t) = (t+1), a = 1/(1+t),  $b_1 = x/(2(1+t))$ ,  $b_2 = y/(2(1+t))$ , c = 1/(1+t),  $f = 2t + t^2x^2 + t^2y^2 + 2tx^2 + 2ty^2 + t^2 + 4x^2 + 4y^2 - 1$ ,  $\frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{S} = 2(x^2 + y^2)$ . Proceed with the results of

calculation for the first group of the data for two grids and the data without noise ( $\delta = 0$ ) and  $\varepsilon_0 = 10^{-5}$ (an error defined by the user). Denote by  $\tau_s$  the time of calculations in seconds. One more error is the quantity  $\overline{\varepsilon} = m_i \vec{p}^k - \vec{p}(i\tau) \lor \varepsilon = \max_i |\vec{p}^k - \vec{p}(i\tau)|$ , where i = 1, 2, ..., N. We take T = 1 and N = 100,  $\tau = T/N$  (see the Fig. 2).



As we can see in Figs. 2, a - d, the presented graphs of the functions p(t) and its approximations practically coincide. Next we change the parameters  $\varepsilon_0$  and  $\delta$  to describe the dependence of the error  $\varepsilon$  on the level  $\delta$  of errors of the data and the parameter  $\varepsilon_0$ . We add the 10% random noise to the overdetermination data (Fig. 3):  $\psi_i^{nz} = \psi_i (1 + \text{random}(1) \cdot 0, 2 - 0, 1)$ , with random(1) is a random number from [0;1].



Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика» 2018, том 10, № 4, С. 30–40



The results of calculations with a noise are displayed on Fig. 3, *a*–*d*. The table 1 contains the results of numerical experiments for the first group of the data with fixed  $\varepsilon_0 = 10^{-5}$  and different parameters  $\delta > 0$ .

The results of numerical experiments for the first groupThe results of calculations for t of experimentsNo exp.Grid $\delta$ $\varepsilon$ $\tau$ No exp.Grid $\delta$	the first $c$	group
for the first groupof experimentsNo exp.Grid $\delta$ $\varepsilon$ $\tau$ No exp.Grid $\delta$	З	
No exp. Grid $\delta$ $\varepsilon$ $\tau$ No exp. Grid $\delta$	3	
		τ
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	0,0101	180,37
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	0,1071	224,66
3 $N_1$ 0,1         0,2141         5,22         3 $N_6$ 0,1         0,	0,2336	271,12
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	0,1057	211,27
5 $N_2$ 0,1     0,2163     5,02     5 $N_7$ 0,1     0,	0,2055	233,22
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	0,1231	180
7 $N_3$ 0,1         0,2115         4,56         7 $N_8$ 0,1         0,	0,2092	200,92
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	0,1007	163,29
9 $N_4$ 0,1 0,2136 4,41 9 $N_9$ 0,1 0,	0,1993	170,97
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	0,0058	124,85
11 $N_5$ 0,05         0,1213         3,34         11 $N_{10}$ 0,05         0	0,089	119,83
12 $N_5$ 0,1         0,2161         4,42         12 $N_{10}$ 0,1         0,1	0,1885	122,13

The error of calculations increases with  $\delta$  and the proximity of  $x_0$  to the center of the circle (see the table 2).

The input data for the second group are as follows: 1/(t+1),  $a = (t^x + 1)$ ,  $b_1 = (x+1) \cdot (1+t)$ ,  $b_2 = (x^2 - 2t)$ ,  $c = (x^2 + t)$ ,  $f = 2x^2 - 4x^2(t+1) + 2y^2 - 4(t+x^2)(t+1) - 2y(2t-x^2)(t+1) + 2x$ .

Since the error increases when the point  $x_0$  is closer to the center of the circle, we consider the results in both case with the 10 % -noise and without it (Fig. 4). The results are displayed below.


We can see on Fig. 4 that the results of calculations of p(t) are close to each other for different  $\delta$  (Fig. 4, a - d). The results are similar to those above (see the table 3). Table 3

e results o	calculations for the mist group of experimen			
No exp,	Grid	$\delta$	З	τ
1	$N_1$	0,05	0,0591	5,23
2	$N_1$	0,1	0,1085	5,34
3	$N_2$	0,05	0,0965	5,34
4	$N_2$	0,1	0,158	5,27
5	$N_3$	0,1	0,1435	4,95
6	$N_6$	0,05	0,0904	211,76
7	$N_6$	0,1	0,1492	218,82
8	$N_7$	0,05	0,0851	221,11
9	$N_7$	0,1	0,185	214,44
10	$N_{\circ}$	0.1	0.1301	174.98

The results of calculations for the first group of experiments

The use of the grids  $N_6 - N_{10}$  leads to smaller errors (up to 4 times without noise and  $\approx$  on 0,02 with noise), but the time of calculations is approximately 20 times more than that for the grids  $N_1 - N_5$ . We should take into account the fact that the number of nodes in the grids  $N_6 - N_{10}$  is  $\approx 3,86$  times more than in the grids  $N_1 - N_5$ . The change of  $\varepsilon_0$  as well as  $\tau$  leads to smaller time of calculations  $\tau_s$ . The 10 % noise  $\delta$  increases errors of calculations from  $\approx 8$  times to  $\approx 35$  times.

Acknowledgement. This authors were supported by the Science Foundation of Yugra State University (Grant no. 13-01-20/10).

#### References

1. Alifanov O.M. *Inverse Heat Transfer Problems*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1994, 331 p. DOI: 10.1007/978-3-642-76436-3

2. Kabanikhin S.I. Inverse and Ill-Posed Problems: theory and applications. De Gruyter, Berlin/Boston, 2012, 459 p. DOI: 10.1515/9783110224016

3. Marchuk G.I. Mathematical Models in Environmental Problems. Studies in Mathematics and its Applications. Vol. 16. Elsevier, 1986, 216 p.

4. Orlande H.R.B. Inverse problems in heat transfer: New trends on solution methodologies and applications. *Journal of Heat Transfer*, 2012, Vol. 134, Issue 3, 031011 (13 pages). DOI: 10.1115/1.4005131

5. Ozisik M.N., Orlando H.A.B. Inverse heat transfer. New-York, Taylor & Francis, 2000, 352 p.

6. Prilepko A.I., Orlovsky D.G., Vasin I.A. *Methods for solving inverse problems in Mathematical Physics*. New-York: Marcel Dekker, Inc. 2000, 744 p. DOI: 10.1201/9781482292985

7. Prilepko A.I., Solov'ev V.V. On the solvability of inverse boundary value problems for the determination of the coefficient preceding the lower derivative in a parabolic equation. *Differ. Uravn.*, Vol. 23, no. 1, pp. 136–143.

8. Pyatkov S.G., Goncharenko O.V. Parameter identification and control in heat transfer processes. *Bulletin of the South Ural state university. Mathematical modelling, programming and computer software*, 2017, Vol. 10, no. 2, pp. 51–62. DOI: 10.14529/mmp170204

9. Pyatkov S.G., Samkov M.L. On some classes of coefficient inverse problems for parabolic systems of equations. *Siberian Advances in Mathematics*, 2012, Vol. 22, no. 4, pp. 287–302. DOI: 10.3103/S1055134412040050

10. Pyatkov S.G., Rotko V.V. On some parabolic inverse problems with the pointwise overdetermination. *AIP Conference Proceedings*, 2017, Vol. 1907, Issue 1, 020008. DOI: 10.1063/1.5012619

11. Dehghan M., Shakeri F. Method of lines solutions of the parabolic inverse problem with an overspecification at a points. *Numerical Algorithms*, 2009, Vol. 50, no. 4, pp. 417–437. DOI: 10.1007/s11075-008-9234-3

12. Dehghan M. Numerical computation of a control function in a partial differential equation. *Applied mathematics and computation*, 2004, Vol. 147, Issue 2, pp. 397–408. DOI: 10.1016/S0096-3003(02)00733-6

13. Dehghan M. Determination of a control parameter in the two-dimensional diffusion equation. *Applied Numerical Mathematics*, 2001, Vol. 37, Issue 4, pp. 489–502. DOI: 10.1016/S0168-9274(00)00057-X

14. Dehghan M. Fourth-order techniques for identifying a control parameter in the parabolic equations. *International Journal of Engineering Science*, 2002, Vol. 40, Issue 4, pp. 433–447. DOI: 10.1016/S0020-7225(01)00066-0

15. Wang S. Numerical solutions to two inverse problems for identifying control parameters in 2dimensional parabolic partial differential equations. *American Society of Mechanical Engineers, Heat Transfer Division, HTD*, 1992, Vol. 194, pp. 11–16. https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2s2.0-0027069329&partnerID=40&md5=cdb8e3110b98004d91707746c1ead322

16. Wang W., Han B., Yamamoto M. Inverse heat problem of determining time-dependent source parameter in reproducing kernel space. *Nonlinear Analysis: Real World Applications*, 2013, Vol. 14, no. 1, pp. 875–887. DOI: 10.1016/j.nonrwa.2012.08.009

17. Li Fu-le, Wu Zi-ku, Ye Chao-rong. A finite difference solution to a two-dimensional parabolic inverse problem. *Applied Mathematical Modelling*, 2012, Vol. 36, Issue 5, pp. 2303–2313. DOI: 10.1016/j.apm.2011.08.025

18. Tatari M., Dehghan M. He's variational iteration method for computing a control parameter in a semi-linear inverse parabolic equation. *Chaos, Solitons and Fractals*, 2007, Vol. 33, Issue 2, pp. 671–677. DOI: 10.1016/j.chaos.2006.01.059

19. Mohebbi A. A numerical algorithm for determination of a control parameter in two-dimensional parabolic inverse problems. *Acta Mathematicae Applicatae Sinica. English series*, 2015, Vol. 31, Issue 1, pp. 213–224. DOI: 10.1007/s10255-015-0461-9

20. Vabishchevich P.N., Vasil'ev V.I. Numerically solving the identification problem for the lower coefficient of a parabolic equation. *Matematicheskie zametki SVFU (Mathematical notes of NEFU)*, 2014, Vol. 21, no. 4, pp. 71–87.

21. Triebel H. Interpolation Theory, Function Spaces, Differential Operators. Berlin, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1978, 528 p. DOI: 10.1002/zamm.19790591227

Received August 24, 2018

Bulletin of the South Ural State University Series "Mathematics. Mechanics. Physics" 2018, vol. 10, no. 4, pp. 30–40

УДК 519.633.2

DOI: 10.14529/mmph180404

## ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ МЛАДШЕГО КОЭФФИЦИЕНТА В ПАРАБОЛИЧЕСКОМ УРАВНЕНИИ ВТОРОГО ПОРЯДКА

#### Е.И. Сафонов

Югорский государственный университет, г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация E-mail: dc.gerz.hd@gmail.com

Рассматривается обратная задача восстановления младшего коэффициента, зависящего от времени, в параболическом уравнении второго порядка. Неизвестный коэффициент является управляющим параметром. Обратная задача состоит в нахождении решения начально-краевой задачи для этого параболического уравнения и этого коэффициента зависящего от времени с использованием данных начально-краевой задачи и точечных условий переопределения. Рассмотрены случаи краевых условий Дирихле и условий с косой производной. Описаны условия, при выполнении которых имеет место теорема существования и единственности решений данной обратной задачи, описан метод численного решения и приведено его обоснование. Все рассмотрения проводятся в пространствах Соболева. Решение прямой задачи основано на методе конечных элементов и методе конечных разностей. Предложенный алгоритм численного решения состоит из трех этапов: инициализации массива, описывающего геометрию области и граничного вектора; реализации итерационного расчета искомого коэффициента с использованием метода конечных элементов; реализация метода конечных разностей. Представлены результаты численных экспериментов, построено численное решение модельной обратной задачи в случае краевых условий Неймана, описана зависимость ошибки вычисления управляющего параметра от изменения коэффициентов уравнения и уровня зашумленности данных переопределения для областей с различным количеством узлов, зависящих от расположения точки наблюдения. Результаты вычислений показывают хорошую сходимость метода. В случае введения 10 % случайного шума погрешность между искомым решением и найденным увеличивается от 8 до 35 раз, но график восстановленного коэффициента остается близким к графику решения и повторяет его контуры.

Ключевые слова: метод конечных элементов; параболическое уравнение; обратная задача.

#### Литература

1. Alifanov, O.M. Inverse Heat Transfer Problems / O.M. Alifanov. – Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1994. – 331 p.

2. Kabanikhin, S.I. Inverse and Ill-Posed Problems: theory and applications / S.I. Kabanikhin. – De Gruyter, Berlin/Boston, 2012. – 459 p.

3. Marchuk, G.I. Mathematical Models in Environmental Problems. Studies in Mathematics and its Applications / G.I. Marchuk. – Elsevier, 1986. – Vol. 16. – 216 p.

4. Orlande, H.R.B. Inverse problems in heat transfer: New trends on solution methodologies and applications / H.R.B. Orlande // Journal of Heat Transfer. – 2012. – Vol. 134. – Issue 3. – 031011 (13 pages).

## Математика

5. Ozisik, M.N. Inverse heat transfer / M.N. Ozisik, H.A.B. Orlando. – New-York: Taylor & Francis, 2000. – 352 p.

6. Prilepko, A.I. Methods for solving inverse problems in Mathematical Physics / A.I. Prilepko, D.G. Orlovsky, I.A. Vasin. – New-York: Marcel Dekker, Inc., 2000. – 744 p.

7. Прилепко, А.И. О разрешимости обратных краевых задач определения коэффициента перед младшей производной в параболическом уравнении / А.И. Прилепко, В.В. Соловьев // Дифференциальные уравнения. – 1987. – Т. 23, № 1. – С. 136–143.

8. Pyatkov, S.G. Parameter identification and control in heat transfer processes / S.G. Pyatkov, O.V. Goncharenko // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2017. – Т. 10, № 2. – С. 51–62.

9. Пятков, С.Г. О некоторых классах коэффициентных обратных задач для параболических систем уравнений / С.Г. Пятков, М.Л. Самков // Математические труды. – 2012. – Т. 15, № 1. – С. 155–177.

10. Pyatkov, S.G. On some parabolic inverse problems with the pointwise overdetermination / S.G. Pyatkov, V.V. Rotko // AIP Conference Proceedings. – 2017. – Vol. 1907. – Issue 1. – 020008.

11. Dehghan, M. Method of lines solutions of the parabolic inverse problem with an overspecification at a points / M. Dehghan, F. Shakeri // Numerical Algorithms. – 2009. – Vol. 50, no 4. – P. 417–437.

12. Dehghan, M. Numerical computation of a control function in a partial differential equation / M. Dehghan // Applied mathematics and computation. – 2004. – Vol. 147. – Issue 2. – P. 397–408.

13. Dehghan, M. Determination of a control parameter in the two-dimensional diffusion equation / M. Dehghan // Applied Numerical Mathematics. – 2001. – Vol. 37. – Issue 4. – P. 489–502.

14. Dehghan, M. Fourth-order techniques for identifying a control parameter in the parabolic equations / M. Dehghan // International Journal of Engineering Science. – 2002. – Vol. 40. – Issue 4. – P. 433–447.

15. Wang, S. Numerical solutions to two inverse problems for identifying control parameters in 2dimensional parabolic partial differential equations / S. Wang // American Society of Mechanical Engineers, Heat Transfer Division, HTD. – 1992. – Vol. 194. – P. 11–16. https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0027069329&partnerID=40&md5= cdb8e3110b98004d91707746c1ead322

16. Wang, W. Inverse heat problem of determining time-dependent source parameter in reproducing kernel space / W. Wang, B. Han, M. Yamamoto // Nonlinear Analysis: Real World Applications. – 2013. – Vol. 14, no. 1. – pp. 875–887.

17. Li Fu-le, Wu Zi-ku, Ye Chao-rong. A finite difference solution to a two-dimensional parabolic inverse problem / Fu-le Li, Zi-ku Wu, Chao-rong Ye // Applied Mathematical Modelling. – 2012. – Vol. 36, Issue 5. – pp. 2303–2313.

18. Tatari, M. He's variational iteration method for computing a control parameter in a semi-linear inverse parabolic equation / M. Tatari, M. Dehghan // Chaos, Solitons and Fractals. – 2007. – Vol. 33. – Issue 2. – pp. 671–677.

19. Mohebbi, A. A numerical algorithm for determination of a control parameter in twodimensional parabolic inverse problems / A. Mohebbi // Acta Mathematicae Applicatae Sinica. English series. – 2015. – Vol. 31. – Issue 1. – pp. 213–224.

20. Vabishchevich, P.N. Numerically solving the identification problem for the lower coefficient of a parabolic equation / P.N. Vabishchevich, V.I. Vasil'ev // Математические заметки CB $\Phi$ V. – 2014. – T. 21, № 4. – C. 71–87.

21. Triebel, H. Interpolation Theory, Function Spaces, Differential Operators / H. Triebel. – Berlin, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1978. – 528 p.

Поступила в редакцию 24 августа 2018 г.

## ОБ ОДНОЙ ИГРОВОЙ ЗАДАЧЕ УПРАВЛЕНИЯ ТОЧКАМИ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ ЛУНЫ

#### В.И. Ухоботов, П.И. Максакова

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация *E-mail: ukh@csu.ru* 

Рассматривается игровая задача управления, в которой первый игрок управляет материальной точкой переменного состава. Второй игрок управляет точкой, которая может двигаться с ограниченной по величине скоростью. Предполагается, что на материальную точку переменного состава, наряду с управляемой реактивной силой, действует еще постоянная сила, величина которой пропорциональна массе точки. Такая ситуация возникает, например, при рассмотрении движения материальной вблизи поверхности Луны, где отсутствует атмосферное точки сопротивление. Считается, что у точки переменного состава величина относительной скорости отделяющихся частиц топлива является постоянной, а величина тяги ограничена сверху заданным положительным числом. Первый игрок стремится минимизировать в заданный момент времени расстояние между точками, расходуя при этом как можно меньше ресурсов. Сформулированная двухкритериальная задача с помощью весовых коэффициентов сводится к дифференциальной игре, плата в которой является суммой как терминальной, так и интегральной составляющих. С помощью замены переменных задача сводится к однотипной игре, в которой вектограммы игроков являются шарами с радиусами, зависящими от времени. Вычислена функция цены игры и найдены оптимальные управления игроков.

Ключевые слова: управление; дифференциальная игра; плата.

#### Введение

Движение материальной точки переменного состава описывается уравнением Мещерского [1]. Управлением является реактивная сила. Если величина тяги задана как функция времени, то управлением является относительная скорость отделяющихся частиц реактивной массы. В этом случае получим задачу об управлении материальной точкой, движущейся под действием заданной по величине силы. В монографии [2] рассмотрена дифференциальная игра преследования «изотропные ракеты». В этой игре преследователь управляет ограниченной по величине скоростью другой точки. Если допускается мгновенное отделение конечного количества массы топлива с постоянной по величине скоростью, то задача преследования в этом случае сводится к задаче с импульсным управлением [3–6]. В задаче преследования платой [2] является время поимки.

В работе [7] первый игрок управляет реактивной силой точки переменного состава. Величина относительной скорости отделяющихся частиц топлива постоянна, а тяга ограничена заданным числом. Второй игрок управляет ограниченной по величине скоростью второй точки. Решена задача, когда первый игрок стремится сделать в фиксированный момент времени расстояние между точками не меньше заданного числа, расходуя при этом как можно меньше ресурсов.

В настоящей статье рассматривается случай, когда первый игрок, управляя реактивной силой, стремится минимизировать в заданный момент времени расстояние между точками, расходуя при этом как можно меньше ресурсов. Предполагается, что на материальную точку переменного состава, наряду с управляемой реактивной силой, действует постоянная сила, пропорциональная массе точки. Такая ситуация возникает при рассмотрении движения материальной точки вблизи поверхности Луны, где отсутствует атмосферное сопротивление. Сформулированная двухкритериальная задача с помощью весовых коэффициентов сводится к дифференциальной игре, плата в которой является суммой как терминальной, так и интегральной составляющих. Вычислена функция цены игры [2] и найдены оптимальные управления игроков.

## Математика

#### Постановка задачи

Вблизи поверхности Луны точка переменного состава, движение которой описывается уравнением Мещерского

$$\ddot{x} = \mu + \varsigma \frac{\dot{m}(t)}{m(t)}, \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad t \le p,$$
(1)

преследует точку, которая движется с ограниченной по величине скоростью

$$\dot{y} = bv, \quad y \in \mathbb{R}^n, \quad b > 0, \quad |v| \le 1.$$
 (2)

Здесь вектор  $\mu \in \mathbb{R}^n$  определяется постоянной внешней силой, пропорциональной массе точки; величина  $|\varsigma|$  относительной скорости отделяющихся частиц топлива является постоянной ( $|\cdot|$  – норма в  $\mathbb{R}^n$ );  $m(t) = m_0 + m_1(t)$  – масса точки, причем  $m_0$  – неизменяемая часть массы,  $m_1(t)$  – реактивная масса; p > 0 – заданный момент окончания процесса управления. Считаем, что тяга ограничена числом  $\gamma > 0$ 

$$-\big|\varsigma\big|\frac{\dot{m}(t)}{m(t)}<\gamma.$$

Точкой переменного состава управляет первый игрок. Второй игрок управляет движением второй точки. Цель первого игрока заключается в том, чтобы в момент времени p > 0 сделать расстояние между точками как можно меньше и минимизировать при этом расход топлива. Цель второго игрока – противоположна.

#### Формализация задачи

Введем новые переменные

$$z = y - x - (p - t)\dot{x} - \mu \frac{(p - t)^2}{2}, \quad u = -\frac{\varsigma}{|\varsigma|}, \quad \varphi(t) = -|\varsigma|\frac{\dot{m}(t)}{m(t)}, \quad v = \frac{1}{b}\dot{y}.$$
 (3)

Тогда

$$|y(p) - x(p)| = |z(p)|, \quad \int_{t_0}^{p} \varphi(t) dt = |\varsigma| \ln \frac{m_0 + m_1(t_0)}{m_0}.$$
 (4)

Здесь  $m_1(t_0)$  – начальный запас реактивной массы. Используя уравнения (1) и (2), получим, что

$$\dot{z} = -(p-t)\varphi(t)u + bv; \quad |u| = 1, \quad 0 \le \varphi \le \gamma; \quad |v| \le 1.$$
(5)

Из формул (4) видно, что сформулированная выше цель первого игрока в переменных (3) означает, что первый игрок минимизирует |z(p)| и  $\int_{t_0}^{p} \varphi(t) dt$ . Введем весовой коэффициент  $\alpha \ge 0$ 

и рассмотрим показатель качества

$$|z(p)| + \alpha \int_{t_0}^{p} \varphi(t) dt \to \min_{\phi, u} \max_{\nu}.$$
 (6)

Первый игрок стремится его минимизировать, а второй – максимизировать.

#### Условия оптимальности в однотипных дифференциальных играх

Рассмотренный пример (5), (6) является частным случаем однотипной дифференциальной игры

$$\dot{z} = -a(t)\varphi(t)u + b(t)v, \quad z(t_0) = z_0; \quad 0 \le \varphi(t) \le \gamma, \quad |u| = 1, \quad |v| \le 1.$$
 (7)

с критерием качества

$$G(|z(p)|) + \int_{t_0}^{p} g(t, \varphi(t)) dt \to \min_{\varphi, u} \max_{v}.$$
(8)

Здесь  $a(t) \ge 0$ ,  $b(t) \ge 0$  интегрируемые при  $t \le p$  функции. Число  $\gamma > 0$  задано.

**Предположение 1**. При каждом  $\varphi \in [0, \gamma]$  функция  $g(t, \varphi)$  является измеримой по  $t \in (-\infty, p]$ и непрерывна по  $\varphi$  при каждом  $t \le p$ ;  $0 \le g(t, \varphi) \le D(t)$  при каждых  $t \le p$  и  $\varphi \in [0, \gamma]$ , где функция D(t) является суммируемой на каждом отрезке  $[p_1, p]$ .

Из этого предположения следует, что для каждой измеримой при  $t \le p$  функции  $\varphi(t) \in [0, \gamma]$  сложная функция  $g(t, \varphi(t))$  является суммируемой на любом отрезке  $[p_1, p]$  [8].

**Предположение 2.** Функция  $G(\varepsilon)$  при  $\varepsilon \ge 0$  является непрерывной, строго возрастает и  $G(\varepsilon) \to +\infty$  при  $\varepsilon \to +\infty$ .

Рассмотрим оптимизационную задачу

$$G(\varepsilon) + \int_{t_0}^{p} g(t, \varphi(t)) dt \to \min,$$
(9)

$$\left|z(t_0)\right| + \int_{t_0}^p \left(b(t) - a(t)\varphi(t)\right) dt \le \varepsilon,$$
(10)

$$\max_{t_0 \le \tau \le p} \int_{\tau}^{p} (b(t) - a(t)\varphi(t)) dt \le \varepsilon,$$
(11)

$$\varepsilon \ge 0, \quad \varphi:[t_0, p] \to [0, \gamma]$$
 – измерима. (12)

**Теорема 1** [9, теорема 2]. Пусть выполнены предположения 1 и 2, а  $\varepsilon_0$  и  $\varphi_0:[t_0, p] \to [0, \gamma]$ решение задачи (9)–(12). Тогда решением задачи (7) и (8) являются функции  $\varphi_0(t)$ ,  $u_0 = w(z)$  и  $v_0 = w(z)$ , где

$$w(z) = z/|z|$$
 при  $|z| > 0$  и любое  $w(0)$  с ограничением  $|w(0)| = 1.$  (13)

Значение цены игры в дифференциальной игре (7) и (8) равна

$$V(t_0, z(t_0)) = \mathcal{E}_0 + \int_{t_0}^p g(t, \varphi_0(t)) dt.$$
 (14)

**Теорема 2** [9, теорема 3]. Пусть дополнительно к предположениям 1 и 2 функция  $g(t, \varphi)$  при каждом  $t \le p$  является выпуклой по  $\varphi$ , а функция  $G(\varepsilon)$  ограничена снизу. Тогда решение в задаче (9)–(12) существует.

**Теорема 3** [9, теорема 4]. Пусть выполнено предположение 1, а число  $\varepsilon_0 \ge 0$  и измеримая функция  $\varphi_0:[t_0, p] \to [0, \gamma]$  удовлетворяют неравенствам (10) и (11). Пусть существуют число  $\lambda \ge 0$  и неубывающая функция  $\theta:[t_0, p] \to R$  такие, что  $\theta(t_0) = 0$  и

$$\lambda \left( \int_{t_0}^p (b(t) - a(t)\varphi_0(t)) dt - \varepsilon_0 \right) = 0,$$
(15)

$$\int_{t_0}^{p} \theta(t) \big( b(t) - a(t)\varphi_0(t) \big) dt = \theta(p)\varepsilon_0,$$
(16)

$$G(\varepsilon_0) - (\lambda + \theta(p))\varepsilon_0 \le G(\varepsilon) - (\lambda + \theta(p))\varepsilon$$
 при любом числе  $\varepsilon \ge 0$ ; (17)

$$g(t,\varphi_0(t)) - (\lambda + \theta(t))a(t)\varphi_0(t) \le g(t,\varphi) - (\lambda + \theta(t))a(t)\varphi, \quad \varphi \in [0,\gamma], \quad t_0 \le t \le p.$$
(18)

Тогда  $\mathcal{E}_0$  и  $\varphi_0(t)$  являются решением задачи (9)–(12).

#### Решение примера

В задаче (5), (6) выполнены равенства

 $a(t) = p - t, \quad b(t) = b, \quad G(\varepsilon) = \varepsilon, \quad g(t,\phi) = \alpha \phi.$ 

Поэтому условия (10), (11) и (15)–(18) примут следующий вид:

$$\int_{t_0}^{p} (b - (p - t)\varphi_0(t)) dt + |z(t_0)| - \varepsilon_0 \le 0,$$
(19)

$$\max_{t_0 \le \tau \le p} \int_{\tau}^{p} \left( b - (p-t)\varphi_0(t) \right) dt - \varepsilon_0 \le 0,$$
(20)

$$\lambda \left( \int_{t_0}^p (b - (p - t)\varphi_0(t)) dt + |z(t_0)| - \varepsilon_0 \right) = 0,$$
(21)

$$\int_{t_0}^{p} \theta(t) \left( b - (p-t)\varphi_0(t) \right) dt = \theta(p)\varepsilon_0,$$
(22)

$$(1 - \lambda - \theta(p))(\varepsilon_0 - \varepsilon) \le 0$$
 при любом  $\varepsilon \ge 0$ , (23)

$$(\alpha - (\lambda + \theta(t))(p-t))(\varphi_0(t) - \varphi) \le 0 \quad \text{при любых} \quad \varphi \in [0, \gamma], \quad t_0 \le t \le p .$$

Из условия (23) получим, что  $\lambda = 1 - \theta(p)$ . Поскольку  $\lambda \ge 0$  и  $\theta(p) \ge 0$ , то  $0 \le \theta(p) \le 1$ . Подставим это значение  $\lambda$  в формулу (24). Будем иметь

$$\varphi_{0}(t) = \begin{cases} \gamma & \text{при } \frac{\alpha}{p-t} < \theta(t) - \theta(p) + 1, \\ \text{любое } \varphi \in [0, \gamma] & \text{при } \frac{\alpha}{p-t} = \theta(t) - \theta(p) + 1, \\ 0 & \text{при } \frac{\alpha}{p-t} > \theta(t) - \theta(p) + 1. \end{cases}$$
(25)

Пусть  $p - \alpha \le t_0$ . Возьмем функции  $\theta(t) = 0$  и  $\varphi_0(t) = 0$  при всех  $t_0 \le t \le p$ . Они удовлетворяют формуле (25). Поскольку  $\lambda = 1 - \theta(p) = 1$ , то из условий (19) и (21) получим равенство

$$\varepsilon_0 = (p - t_0)b + |z(t_0)|. \tag{26}$$

Максимальное значение по  $\tau$  в (20) достигается при  $\tau = t_0$  и оно равно  $(p - t_0)b$ . Поэтому число  $\varepsilon_0$  (26) удовлетворяет условию (20). Условие (22) также выполнено.

В рассматриваемом случае значение цены игры (14) равно

$$V(t_0, z(t_0)) = (p - t_0)b + |z(t_0)|$$
 при  $t_0 \ge p - \alpha$ .

Пусть

$$\alpha \le \frac{b}{\gamma} \text{ is } p - \frac{b}{\gamma} \le t_0 
(27)$$

Возьмем функции  $\theta(t) = 0$  при  $t_0 \le t \le p$ ,

$$p_0(t) = \gamma$$
 при  $t_0 \le t \le p - \alpha$  и  $\varphi_0(t) = 0$  при  $p - \alpha < t \le p$ . (28)

Они удовлетворяют формуле (25). Из второго неравенства (27) следует, что функция (28) удовлетворяет неравенству  $b - (p-t)\varphi_0(t) > 0$  при  $t_0 \le t \le p$ . Поэтому максимальное значение по  $\tau$  в условии (20) достигается при  $\tau = t_0$  и оно равно

$$\int_{t_0}^{p} (b - (p - t)\varphi_0(t)) dt = -\frac{\gamma}{2} \left( p - t_0 - \frac{b}{\gamma} \right)^2 + \frac{\gamma}{2} \left( \frac{b}{\gamma} - \alpha \right)^2 + b\alpha > 0.$$
(29)

Учитывая формулу (29) из условия (21) при  $\lambda = 1$ , получим, что

$$\varepsilon_0 = -\frac{\gamma}{2} \left( p - t_0 - \frac{b}{\gamma} \right)^2 + \frac{\gamma}{2} \left( \frac{b}{\gamma} - \alpha \right)^2 + \beta \alpha + |z(t_0)|.$$
(30)

Очевидно, что условие (20) выполнено.

Из формул (28) и (30) получим, что значение цены игры (14) в рассматриваемом случае равно

$$V(t_0, z(t_0)) = -\frac{\gamma}{2} (p - t_0 - \alpha)^2 + (p - t_0)b + |z(t_0)|.$$
(31)

Пусть

$$\alpha \le \frac{b}{\gamma}, \quad t_0$$

Возьмем функцию  $\theta(t) = 0$  при  $t_0 \le t \le p$ , а функцию  $\varphi_0(t)$  определим формулами (28). Как и выше, число  $\varepsilon_0$  определяется формулой (30).

Проверим неравенство (20). Имеем

$$\max_{t_0 \le \tau \le p} \int_{\tau}^{p} \psi(t) dt = \max(I_1, I_2), \quad I_1 = \max_{p - \alpha \le \tau \le p} \int_{\tau}^{p} \psi(t) dt = \alpha b, \quad I_2 = \max_{t_0 \le t \le p - \alpha} \int_{\tau}^{p} \psi(t) dt$$

где  $\psi(t) = b - (p-t)\varphi_0(t)$ . Из (28) следует, что  $\psi(t) < 0$  при  $t_0 < t \le p - b/\gamma$  и  $\psi(t) > 0$  при  $p-b/\gamma < t \le p$ . Поэтому в формуле, которая определяет число  $I_2$ , максимальное значение по  $\tau$ достигается при  $\tau = p - b/\gamma$  и

$$I_2 = \frac{\gamma}{2} \left(\frac{b}{\gamma} - \alpha\right)^2 + \alpha b.$$
(33)

Стало быть,  $\max(I_1, I_2) = I_2$ . Поэтому число  $\varepsilon_0$ , определяемое равенством (30), должно удовлетворять неравенству  $\varepsilon_0 \ge I_2$ . Согласно (32) и (33) это неравенство выполнено. В рассматриваемом случае значение цены игры определяется формулой (31).

Пусть

$$\alpha \leq \frac{b}{\gamma}, \quad t_0$$

Покажем, что при некотором числе  $t_0 < q < p - b/\gamma$  выполнено равенство

$$|z(t_0)| = f(q), \quad f(q) = \gamma \left(p - \frac{b}{\gamma}\right) (q - t_0) - \frac{\gamma}{2} (q^2 - t_0^2).$$
 (35)

В самом деле, у квадратного многочлена (35) производная f'(q) > 0 при  $t_0 \le q .$ Следовательно,

$$0 = f(t_0) \le f(q) \le f\left(p - \frac{b}{\gamma}\right) = \frac{\gamma}{2} \left(p - t_0 - \frac{b}{\gamma}\right)^2.$$

Отсюда и из третьего неравенства в (34) получим существование требуемого числа q.

Возьмем при  $r = b/\gamma$  функции

$$\theta(t) = \begin{cases} 0 \quad \text{при} \quad t_0 \le t \le q, \\ \frac{\alpha}{p-t} - \frac{\alpha}{p-q} \quad \text{при} \quad q < t \le p-r, \quad \varphi_0(t) = \begin{cases} \gamma \quad \text{при} \quad t_0 \le t \le q, \\ \frac{b}{p-t} \quad \text{при} \quad q < t \le p-r, \\ 0 \quad \text{при} \quad p - r < t \le p. \end{cases}$$
(36)

Они удовлетворяют формуле (25). Поскольку число  $\lambda = \alpha/(p-q) > 0$ , то условия (19) и (21) принимают вид равенства

$$\varepsilon_{0} = (b - \gamma p)(q - t_{0}) + \frac{\gamma}{2}(q^{2} - t_{0}^{2}) + \frac{b^{2}}{\gamma} + |z(t_{0})| = \frac{b^{2}}{\gamma}.$$
(37)

Здесь использованы соотношения (35).

Далее,

$$\max_{t_0 \ge \tau \le p} \int_{\tau}^{p} \Psi(t) dt = \max\left(I_1, I_2, I_3\right),$$

### Математика

гле

$$\psi(t) = b(p-t)\varphi_0(t), \quad I_1 = \max_{p-r \le \tau \le p} \int_{\tau}^{p} \psi(t)dt, \quad I_2 = \max_{q \le \tau \le p-r} \int_{\tau}^{p} \psi(t)dt, \quad I_3 = \max_{t_0 \le \tau \le q} \int_{\tau}^{p} \psi(t)dt.$$

Подставим сюда функцию  $\varphi_0(t)$  (36). Получим  $I_1 = I_2 = b^2 / \gamma$ . Поскольку  $\psi(t) \le 0$  при  $t_0 \le t \le q$ , то максимальное значение по  $\tau$  при определении числа  $I_3$  достигается при  $\tau = q$ . Поэтому  $I_3 = b^2/\gamma$ . Таким образом, max $(I_1, I_2, I_3) = b^2/\gamma$ . Отсюда, учитывая формулу (37), получим, что условие (20) выполнено. Подставим функции (36) в условие (22). Получим br

$$\mathbf{r} = \mathcal{E}_0. \tag{38}$$

Числа  $r = b/\gamma$  и  $\varepsilon_0 = b^2/\gamma$  этому равенству удовлетворяют. Из (36) и (37) следует, что

$$W(t_0, z(t_0)) = \varepsilon_0 + \alpha \gamma \left( q - t_0 + \frac{b}{\gamma} \ln \frac{p - q}{r} \right),$$
(39)

где число q находится из равенства

$$q = p - \frac{b}{\gamma} - \sqrt{\left(t_0 - p - \frac{b}{\gamma}\right)^2 - \frac{2}{\gamma}|z(t_0)|},\tag{40}$$

а  $\varepsilon_0 = b^2 / \gamma$  и  $r = b / \gamma$ . Пусть

$$\frac{b}{\gamma} < \alpha, \quad t_0 < p - \alpha, \quad \left| z(t_0) \right| \ge \frac{\gamma}{2} \left( p - t_0 - \frac{b}{\gamma} \right)^2 - \frac{\gamma}{2} \left( \frac{b}{\gamma} - \alpha \right)^2. \tag{41}$$

Возьмем функцию  $\theta(t) = 0$  при  $t_0 \le t \le p$  и функцию  $\varphi_0(t)$  из (28). Из условия (21) при  $\lambda = 1$ получим формулу (30).

Поскольку  $p - \alpha , то функция (28) удовлетворяет неравенствам <math>b - (p - t)\varphi_0(t) < 0$ при  $t_0 \le t \le p - \alpha$  и  $b - (p - t)\varphi_0(t) > 0$  при  $p - \alpha < t \le p$ . Поэтому максимальное значение по  $\tau$  в условии (20) достигается при  $\tau = p - \alpha$  и оно равно  $b\alpha$ . Из последнего неравенства в (41) получим, что число  $\varepsilon_0$  (30) удовлетворяет неравенству  $\varepsilon_0 \ge b\alpha$ . Стало быть, условие (20) выполнено. В рассмотренном случае значение цены игры задается формулой (31).

Пусть

$$\frac{b}{\gamma} < \alpha, \quad t_0 < p - \alpha, \quad \left| z(t_0) \right| < \frac{\gamma}{2} \left( p - t_0 - \frac{b}{\gamma} \right)^2 - \frac{\gamma}{2} \left( \frac{b}{\gamma} - \alpha \right)^2. \tag{42}$$

Покажем, что существует число  $t_0 < q < p - \alpha$ , при котором выполнено равенство (35). В самом деле, многочлен f(q) при  $t_0 \le q \le p - \alpha$  строго возрастает. Поэтому его максимальное значение на отрезке  $[t_0, p-\alpha]$  достигается при  $q = p - \alpha$  и оно равно выражению, стоящему в правой части третьего неравенства в (42). Поскольку  $f(t_0) = 0$ , то требуемое число q существует.

Возьмем функции  $\theta(t)$  и  $\varphi_0(t)$ , которые определяются формулами (36) при  $r = \alpha$ . Эти функции удовлетворяют формуле (25). Поскольку  $\lambda = \alpha/(p-q) > 0$ , то условия (19) и (21) принимают вид равенства

$$\varepsilon_{0} = (b - p\gamma)(q - t_{0}) + \frac{1}{2}\gamma(q^{2} - t_{0}^{2}) + b\alpha + |z(t_{0})| = b\alpha.$$

Здесь использовано равенство (35).

Функция  $\varphi_0(t)$ , определяемая формулой (36) при  $r = \alpha$ , удовлетворяет неравенствам

$$b - (p - t)\varphi_0(t) \le 0$$
 при  $t_0 \le t \le p - \alpha$  и  $b - (p - t)\varphi_0(t) > 0$  при  $p - \alpha < t \le p$ .

Поэтому максимальное значение в неравенстве (20) достигается при  $\tau = p - \alpha$  и оно равно

$$-\gamma \left(p - \frac{b}{\gamma}\right) \left(q - t_0\right) + \frac{\gamma}{2} \left(q^2 - t_0^2\right) + b\alpha = -|z(t_0)| + b\alpha \le \varepsilon_0$$

Здесь использовано равенство (35). Числа  $r = \alpha$  и  $\varepsilon_0 = b\alpha$  удовлетворяют равенству (38). Поэтому условие (22) выполнено. Значение цены игры определяется формулами (39), (40) при  $\varepsilon_0 = b\alpha$ и  $r = \alpha$ .

#### Заключение

С помощью найденной функции  $\varphi_0(t)$  из третьей формулы в (3) вычисляется оптимальный закон расхода топлива. Подставляя в формулу (13) значение z из первой формулы (3), найдем оптимальные направления относительной скорости отделяющихся частиц топлива и скорости второй точки.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ в рамках научного проекта № 18-01-00264\_а и гранта Фонда перспективных научных исследований ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» (2018 г.).

#### Литература

1. Красовский, Н.Н. Теория управления движением / Н.Н. Красовский. – М.: Наука, 1970. – 420 с.

2. Айзекс, Р. Дифференциальные игры / Р. Айзекс. – М.: Мир, 1967. – 479 с.

3. Ухоботов, В.И. Модификация игры «изотропные ракеты» / В.И. Ухоботов // Многокритериальные системы при неопределенности и их приложения: Межвузовский сборник научных трудов. Челябинск: Челябинский государственный университет, Изд-во Башкирского университета, 1988. – С. 123–130.

4. Ухоботов, В.И. Одна задача импульсного преследования при ограниченной скорости убегающего / В.И. Ухоботов, О.В. Зайцева // Вестник ЮУрГУ. Серия «Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника». – 2010. – №2 (178), вып. 11 – С. 29–32.

5. Пожарицкий, Г.К. Игровая задача импульсного сближения с противником, ограниченным по энергии / Г.К. Пожарицкий // Прикладная математика и механика. – 1975. – Т. 39. – Вып. 4. – С. 579–589.

6. Ухоботов, В.И. Задача импульсного преследования вблизи поверхности Луны / В.И. Ухоботов, А.А. Троицкий // Математическая теория игр и ее приложения. – 2013. – Т. 5. – Вып. 4 – С. 105–118.

7. Ухоботов, В.И. Однотипные дифференциальные игры с выпуклой интегральной платой / В.И. Ухоботов, Д.В. Гущин // Тр. ИММ УрО РАН. – 2011. – Т. 17, № 1. – С. 251–258.

8. Иоффе, А.Д. Теория экстремальных задач / А.Д. Иоффе, В.М. Тихомиров. – М.: Наука, 1974. – 479 с.

9. Ухоботов, В.И. Линейная задача управления при наличии помехи с платой, зависящей от модуля линейной функции / В.И. Ухоботов // Тр. ИММ УрО РАН. – 2017. – Т. 23, № 1. – С. 251–261.

Поступила в редакцию 14 мая 2018 г.

Bulletin of the South Ural State University Series "Mathematics. Mechanics. Physics" 2018, vol. 10, no. 4, pp. 41–48

DOI: 10.14529/mmph180405

# ON A GAME PROBLEM FOR POINT CONTROL NEAR THE SURFACE OF THE MOON

#### V.I. Ukhobotov, P.I. Maksakova

Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation *E-mail: ukh@csu.ru* 

A game control problem in which the first player controls the material point of variable composition is considered. The second player controls the point that can move with a limited speed. It is assumed that the material point of variable composition, along with the controlled reactive power, is exposed to a constant force, the value of which is proportional to the mass of the point. This situation occurs, for exam-

## Математика

ple, when we consider the motion of a material point near the surface of the Moon, where there is no atmospheric resistance. It is considered that the point of variable composition has constant relative velocity of separating fuel particles, and the value of thrust is limited from above with a given positive number. The first player tries to minimize the distance between the points in a set moment, consuming as little resources as possible. The formulated two-criterion problem, with the use of weight coefficients, gets reduced to a differential game, the payoff of which is the sum of both terminal and integral components. By changing variables, the problem is reduced to a single-type game in which vectograms of players are balls with time-dependent radii. The function of the game price is calculated, and optimal control of the players is determined.

Keywords: control; differential game; payoff.

#### References

1. Krasovskiy N.N. *Teoriya upravleniya dvizheniem* (Motion control theory). Moscow, Nauka Publ., 1970, 420 p. (in Russ.).

2. Ayzeks R. *Differentsial'nye igry* (Differential games). Moscow, Mir Publ., 1967, 479 p. (in Russ.). [Isaacs R. Differential games: A Mathematical Theory with Applications to Warfare and Pursuit, Control and Optimization. New York: John Wiley and Sons, Inc., 1965, 384 p.]

3. Ukhobotov, V.I. *Modifikatsiya igry "izotropnye rakety*" (Modification of the game "Isotropic missiles"). Mnogokriterial'nye sistemy pri neopredelennosti i ikh prilozheniya: Mezhvuzovskiy sbornik nauchnykh trudov (Multicriterial systems with uncertainty and their applications: Interuniversity collection of scientific papers). Chelyabinski: Chelyabinskiy gosudarstvennyy universitet Publ., Izd-vo Bashkirskogo universiteta Publ., 1988, pp. 123–130. (in Russ.).

4. Ukhobotov V.I., Zaytseva O.V. Odna zadacha impul'snogo presledovaniya pri ogranichennoy skorosti ubegayushchego (About one problem of impulse pursuit at the limited velocity of the escaping). Bulletin of the South Ural State University. Series of "Computer Technologies, Automatic Control & Radioelectronics", 2010, no. 2 (178), Issue 11, pp. 29–32. (in Russ.).

5. Pozharitskiy, G.K. Igrovaya zadacha impul'snogo sblizheniya s protivnikom, ogranichennym po energii (Game problem of impulse encounter with an opponent limited in energy). *Prikladnaya mate-matika i mekhanika* (Journal of Applied Mathematics and Mechanics), 1975, Vol. 39, Issue 4, pp. 579–589. (in Russ.).

6. Ukhobotov V.I., Troitsky A.A. Problem about pursuer with pulse control near surface of the Moon (Problem about pursuer with pulse control near surface of the Moon). *Matematicheskaya Teoriya Igr i Ee Prilozheniya*, 2013, Vol. 5, Issue 4, pp. 105–118. (in Russ.).

7. Ukhobotov V.I., Gushchin D.V. Single-type differential games with convex integral payoff. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics (Supplementary issues)*, 2011, Vol. 275, suppl. 1, S178–S185. DOI: 10.1134/S0081543811090136

8. Ioffe A.D., Tikhomirov V.M. *Teoriya ekstremal'nykh zadach* (Theory of extremum problems). Moscow, Nauka Publ., 1974, 479 p. (in Russ.).

9. Ukhobotov V.I. Lineynaya zadacha upravleniya pri nalichii pomekhi s platoy, zavisyashchey ot modulya lineynoy funktsii (A linear control problem under interference with a payoff depending on the modulus of a linear function). *Trudy Instituta Matematiki I Mekhaniki UrO RAN*, 2017, Vol. 23, no. 1, pp. 251–261. (in Russ.). DOI: 10.21538/0134-4889-2017-23-1-251-261.

Received May 14, 2018

УДК 532.529

## РАВНОВЕСНАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД

#### Ю.М. Ковалев, Ф.Г. Магазов, Е.С. Шестаковская

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация E-mail: leshest@list.ru

> Ha основании общих уравнений сохранения гетерогенных многокомпонентных смесей построена математическая модель равновесной двухфазной смеси. Данная математическая модель была исследована на гиперболичность и на инвариантность относительно преобразования Галилея. Была показана гиперболичность математической модели равновесной двухфазной смеси, что доказало возможность проведения расчетов быстропротекающих процессов, например, процессов инициирования детонации в конденсированных взрывчатых веществах сильными ударными волнами. Гиперболичность математической модели равновесной двухфазной смеси приводит к тому, что скорость распространения возмущений (скорость звука) в смеси является конечной величиной. Данное обстоятельство очень важно при анализе процессов выхода инициирующих ударных волн на режим детонации. Предположение о равновесности смеси для расчетов инициирования детонации значительно упрощает общую математическую модель гетерогенных многокомпонентных смесей. Показано, что система законов сохранения в равновесной математической модели двухфазной смеси может быть сведена к системе законов сохранения для смеси, когда замыкающими уравнениями являются уравнения состояния для удельной внутренней энергии и давления фаз, а также обычные для гетерогенных смесей соотношения. В рамках равновесной математической модели двухфазной смеси было проведено обоснование согласования энергетики фазовых переходов. Было учтено, что фазовые переходы в детонационной волне происходят при постоянном объеме.

> Анализ равновесной математической модели двухфазной смеси на инвариантность относительно преобразования Галилея показал ее инвариантность, что подтверждает правильность сделанных в работе допущений.

> Ключевые слова: математическая модель; двухфазная смесь; уравнение состояния; быстропротекающий процесс; ударная волна.

#### Введение

Математические модели сплошных сред, широко применяемые для решения различных задач физики, химии и технологии, содержат, как правило, упрощающие гипотезы и эмпирические параметры. Это позволило разделить единую науку – механику сплошной среды, на направления, в каждом из которых для отыскания решений формулируются дополнительные упрощающие гипотезы и применяются оригинальные методы. Несмотря на то, что такой подход оказался эффективным для построения аналитических решений, применение основанных на упрощающих гипотезах математических моделей механики сплошных сред для математического моделирования сложных динамических процессов не позволяет в полной мере использовать возможности современной вычислительной техники. В силу того, что физический эксперимент все чаще стал заменяться математическим, успехи в этом направлении невозможны без создания математических моделей нового поколения, учитывающих неоднородность и реальные свойства веществ.

Наиболее полными и перспективными являются математические модели, основанные на гипотезе взаимопроникающих взаимодействующих континуумов [1–7]. В классе этих

математических моделей есть простые и более сложные. Сложность математических моделей зависит от сделанных упрощений. Из-за сложности математической модели в процессе упрощения при переходе от общей математической модели к частной могут возникать физические противоречия такие как, например, не инвариантность относительно преобразования Галилея [8, 9].

В настоящее время теория математических моделей механики многокомпонентных сред активно развивается. С помощью изучения и применения упрощенных математических моделей идет накопление информации и опыта решения задач механики многокомпонентных сред. Продолжают сосуществовать диффузионные модели и математические модели, основанные на теории взаимопроникающих взаимодействующих континуумов. Математические модели, основанные на теории взаимопроникающих взаимодействующих континуумов, являются не замкнутыми. Для замыкания их требуются дополнительные соотношения, определяющие взаимодействие компонентов и фаз.

Целью настоящего исследования является построение равновесной математической модели, основанной на теории взаимопроникающих взаимодействующих континуумов, для исследования процессов инициировании и распространения детонационных волн в конденсированных взрывчатых веществах.

#### 1. Общие уравнения сохранения многокомпонентных гетерогенных сред

Для описания как гомогенных, так и гетерогенных смесей методами механики сплошной среды необходимо ввести понятие многоскоростного континуума И определить взаимопроникающее движение его составляющих. Многоскоростной континуум представляет собой совокупность N континуумов, каждый из которых относится к своей составляющей (фазе или компоненту) смеси один и тот же объем, занятый смесью. Каждый из этих составляющих континуумов в каждой точке характеризуется своей приведенной плотностью  $\rho_i$  (масса *i*-й составляющей в единице объема среды), скоростью  $v_i$  (i = 1, 2, ..., N) и другими параметрами, относящимися к своему континууму и своей составляющей смеси. Таким образом, в каждой точке объема, занятого смесью, будет определено N плотностей  $\rho_i$ , N скоростей  $v_i$ , по которым можно определить параметры смеси в целом, такие как: плотность смеси, среднемассовую (барицентрическую) скорость смеси, тензор поверхностных сил  $\sigma^{kl}$  и вектор массовых сил g

$$\rho = \sum_{i=1}^{N} \rho_i , \ \rho v = \sum_{i=1}^{N} \rho_i v_i , \tag{1}$$

$$\sigma = \sum_{i=1}^{N} \sigma_i , \ \rho g = \sum_{i=1}^{N} \rho_i g_i , \qquad (2)$$

где  $\sigma_i$  – тензор поверхностных сил, относящийся к *i*-ой компоненте, а  $g_i$  – вектор массовых сил, относящийся к *i*-ой компоненте.

Для определения скорости движения составляющих относительно центра масс смеси или среды в целом используют диффузионные скорости *w<sub>i</sub>* 

$$w_i = v_i - v$$
,  $\sum_{i=1}^{N} \rho_i w_i = 0$ . (3)

Удельную энергию смеси *E* (приходящуюся на единицу массы среды) определим как сумму внутренней *e* и кинетической *K* энергий

$$E = e + K$$

Рассмотрим случай, когда внутренняя энергия смеси аддитивна по массе входящих в нее составляющих

$$\rho e = \sum_{i=1}^{N} \rho_i e_i , \qquad (4)$$

где  $e_i$  – удельные внутренние энергии фаз составляющих смесь, а кинетическая энергия определяется лишь макроскопическим движением фаз:

$$\rho K = \sum_{i=1}^{N} \frac{\rho_i v_i^2}{2}.$$
(5)

Тогда энергия смеси может быть представлена в виде

$$\rho E = \sum_{i=1}^{N} \rho_i \left( e_i + \frac{v_i^2}{2} \right) = \sum_{i=1}^{N} \rho_i E_i, \quad E_i = e_i + \frac{v_i^2}{2}.$$
(6)

Из равенств (5) и (3) следует, что  $\rho K \neq \frac{1}{2} \rho v^2$ , так как

$$\rho K = \frac{\rho v^2}{2} + \sum_{i=1}^{N} \frac{\rho_i w_i^2}{2}.$$
(7)

Следовательно, кинетическая энергия многоскоростной среды определяется не только ее движением как целого со скоростью центра масс, но и скоростями относительного движения составляющих, чему соответствует второе слагаемое равенства (7).

Для описания многоскоростной сплошной среды будем использовать субстанциональные производные  $d_i/dt$  и d/dt (барицентрическую субстанциональную производную), соответственно связанные с движением *i*-й составляющей и с движением среды в целом:

$$\frac{d_i}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + v_i \cdot \nabla \equiv \frac{\partial}{\partial t} + v_i^k \cdot \nabla^k \equiv \frac{\partial}{\partial t} + v_i^k \cdot \frac{\partial}{\partial x^k},$$

$$\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla \equiv \frac{\partial}{\partial t} + v^k \cdot \nabla^k \equiv \frac{\partial}{\partial t} + v^k \cdot \frac{\partial}{\partial x^k}.$$
(8)

Суммирование производится только по верхним индексам, относящимся к координатным осям.

Механика смесей строится на основе физических законов сохранения массы, импульса и энергии. Поэтому далее нужно записать балансовые соотношения массы, импульса и энергии для каждой составляющей в некотором фиксированном в пространстве объеме смеси V, ограниченном поверхностью S, учитывая при этом обмен (взаимодействие) не только с внешней (по отношению к выделенному объему V) средой, но и соответствующий обмен (взаимодействие) массой, импульсом и энергией между составляющими внутри объема V.

В отличие от гомогенных смесей, где каждый компонент может рассматриваться как занимающий весь объем смеси равноправно с другими компонентами ( $V_1 = V_2 = ... = V_N = V$ ), в гетерогенной смеси каждая фаза занимает лишь часть объема смеси ( $V_1 + V_2 + ... + V_N = V$ ). В общем случае гетерогенных смесей выделенный объем интегрирования можно представить разбитым на отдельные объемы, каждый из которых заполнен только одной какой-нибудь фазой.

В связи с этим в теории гетерогенных смесей необходимо использовать величины  $\alpha_i$  (*i* = 1, 2, ..., *N*), характеризующие доли объема смеси, занимаемые каждой фазой

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_N = 1 \qquad \left(\alpha_i \ge 0\right),\tag{9}$$

и, таким образом, помимо приведенных плотностей  $\rho_i$ , определяются истинные плотности веществ фаз  $\rho_i^0$  (масса *i*-й фазы в единице объема *i*-й фазы)

$$\rho_i^0 = \rho_i / \alpha_i. \tag{10}$$

Если в многокомпонентной гетерогенной смеси имеют место фазовые и химические превращения, то система законов сохранения может быть представлена в виде [1]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_i v_i &= \sum_{j=1}^N J_{ji}, \\ \rho_i \frac{d_i v_i}{dt} &= \nabla^k \sigma_i^k + \rho_i g_i + \sum_{j=1}^N (P_{ji} - J_{ji} v_i), \end{aligned}$$
(11)  
$$\begin{aligned} \rho_i \frac{d_i}{dt} \bigg( e_i + \frac{v_i^2}{2} \bigg) &= \nabla \cdot c_i + \rho_i g_i \cdot v_i - \nabla q_i + \sum_{j=1}^N [E_{ji} - J_{ji} (e_i + \frac{v_i^2}{2})], \\ &= 1, 2, \dots, N \bigg), \quad J_{ij} &= -J_{ji}, \quad J_{ii} = 0, \qquad P_{ij} = -P_{ji}, \quad P_{ii} = 0, \qquad E_{ij} = -E_{ji}, \quad E_{ii} = 0. \end{aligned}$$

Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика» 2018, том 10, № 4, С. 49–57

(*i* 

Обмен импульсом между *i*-й и *j*-й фазами в единицу времени и в единице объема смеси представляется в виде суммы двух слагаемых:

$$P_{ij} = -P_{ji} = R_{ji} + J_{ji}v_{ji}, \quad (i = 1, 2, ..., N).$$
(12)

Здесь  $R_{ij}$  – межфазная сила (отнесенная к единице объема смеси). Второе слагаемое в правой части равенства (12) – изменение импульса соответствующей фазы за счет фазовых и химических превращений. Следовательно, уравнение сохранения импульса может быть переписано следующим образом

$$\rho_i \frac{d_i v_i}{dt} = \nabla^k \sigma_i^k + \rho_i g_i + \sum_{j=1}^N (R_{ji} + J_{ji} (v_{ji} - v_i)).$$
(13)

Рассмотрим величину  $E_{ij}$ , характеризующую приток энергии от *i*-ой к *j*-ой фазе, отнесенный к единице объема и времени. Эта величина может быть также представлена в виде суммы нескольких слагаемых

$$E_{ij} = -E_{ji} = W_{ij} + Q_{ji} + J_{ji}(e_{ji} + \frac{1}{2}(v_{ji})^2), \quad (i = 1, 2, ..., N),$$
(14)

где первый член правой части описывает передачу энергии между фазами за счет работы межфазных сил, второй – теплообмен между фазами и, наконец, последний член представляет собой изменение энергии фазы за счет фазовых и химических превращений. Следовательно, уравнение сохранения полной энергии *i*-ой фазы принимает следующий вид

$$\rho_i \frac{d_i}{dt} \left( e_i + \frac{v_i^2}{2} \right) = \nabla \cdot c_i + \rho_i g_i \cdot v_i - \nabla q_i + \sum_{j=1}^N [W_{ji} + Q_{ji} + J_{ji} (e_{ji} - e_i + \frac{v_{ji}^2 - v_i^2}{2})].$$
(15)

Для построения равновесной модели смеси потребуется уравнение сохранение внутренней энергии *i*-ой фазы. С этой целью получим уравнение кинетической энергии *i*-ой фазы путем умножения уравнения сохранения импульса (11) на скорость *i*-ой фазы. В результате получается следующее уравнение

$$\rho_i \frac{d_i}{dt} \left( \frac{v_i^2}{2} \right) = v_i \cdot \nabla^k \sigma_i^k + \rho_i g_i \cdot v_i + \sum_{j=1}^N [R_{ji} \cdot v_i + J_{ji} (v_{ji} - v_i) \cdot v_i].$$
(16)

Вычитая из уравнения полной энергии *i*-ой фазы (16) уравнение кинетической энергии *i*-й фазы, получим уравнение сохранения внутренней энергии *i*-ой фазы в следующей форме

$$\rho_{i}\frac{d_{i}}{dt}(e_{i}) = \nabla \cdot (c_{i}-q_{i}) + \rho_{i}g_{i} \cdot v_{i} - v_{i}\nabla^{k}\sigma_{i}^{k} + \sum_{j=1}^{N}[W_{ji} - R_{ji} \cdot v_{i} + Q_{ji} + J_{ji}(e_{ji}-e_{i}) + \frac{1}{2}J_{ji}(v_{ji}-v_{i})^{2}].$$
(17)

Таким образом, проблема многофазного движения в рамках многоскоростной (многожидкостной) модели сводится к заданию условий совместного движения фаз и определению величин, описывающих внутрифазные (силовое  $\sigma_i^{kl}$ , энергетическое  $c_i^k$  и  $q_i^k$ ) и межфазные (массовое  $J_{ji}$ , силовое  $P_{ji}$ , энергетическое  $E_{ji}$ ) взаимодействия.

#### 2. Уравнения сохранения равновесной двухфазной гетерогенной смеси

Не ограничивая общности, рассмотрим равновесную смесь двух фаз. Для таких смесей температуры, давления и скорости фаз совпадают

$$T_1 = T_2 = T(x,t), \quad P_1 = P_2 = P(x,t), \quad v_1 = v_2 = v(x,t).$$
 (18)

Это предположение справедливо для широкого класса физических явлений, когда

1) плотности фаз одного порядка;

2) перемещения фаз относительно друг друга малы;

3) значения коэффициентов температуропроводности фаз велики;

4) уровни давлений в фазах значительно выше значений компонентов девиаторной части тензора напряжений;

5) значения поверхностных сил значительно больше массовых.

Этим условиям будет соответствовать математическая модель инициирования сильными ударными волнами конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) и распространения в них детонации. В этом случае первая фаза представляет собой ВВ, а вторая – продукты детонации

(ПД), которые образуются процессе химического превращения ВВ. В силу того, что в начальный момент времени вторая фаза отсутствует и появляется только в результате химического превращения, очень важно правильно согласовать внутренние энергии исходного ВВ и появившихся ПД.

Для двухфазной равновесной гетерогенной смеси уравнения неразрывности фаз и смеси (11), с учетом сделанных выше предположений, можно записать виде

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_1 v) = -J, \quad \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_2 v) = J, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0, \tag{19}$$

где *J* – массовая скорость химического превращения BB в ПД.

Учитывая предположения (18) и второе равенство (1), получим уравнение сохранения импульса смеси

$$\rho \frac{dv}{dt} = -\nabla P \,. \tag{20}$$

С учетом предположений (18) получим вид уравнений для внутренней энергии фаз:

$$\rho_1 \frac{d}{dt} (e_1) = -\alpha_1 P \nabla \cdot (v) - J(e_{21} - e_1), \qquad (21)$$

$$\rho_2 \frac{d}{dt} (e_2) = -\alpha_2 P \nabla \cdot (v) + J(e_{12} - e_2), \qquad (22)$$

здесь  $e_{21}$  и  $e_{12}$  – теплоты образования ВВ и ПД соответственно.

Если воспользоваться первыми двумя уравнениями (19), равенства (21) и (22) можно преобразовать следующим образом:

$$\frac{d}{dt}(\rho_1 e_i) = -\alpha_1 P \nabla \cdot (v) - J e_{21}, \qquad (23)$$

$$\frac{d}{dt}(\rho_2 e_2) = -\alpha_2 P \nabla \cdot (v) + J e_{12}.$$
(24)

Суммируя левые и правые части уравнений (23) и (24), получим уравнение сохранения удельной внутренней энергии смеси

$$\frac{d}{dt} \left(\rho_1 e_1 + \rho_2 e_2\right) + P\nabla \cdot (v) = JQ_v, \qquad (25)$$

где  $Q_{\nu}$  – теплота взрыва. Если воспользоваться третьим равенством (19) и ввести массовые концентрации  $c_1 = \rho_1 / \rho$ ,  $c_2 = \rho_2 / \rho$ , то уравнение (25) принимает следующий вид

$$\frac{d}{dt} (c_1 e_1 + c_2 e_2) + P \frac{d}{dt} (1/\rho) = J Q_{\nu} / \rho .$$
(26)

Система уравнений равновесной двухфазной гетерогенной смеси содержит 14 неизвестных:  $v, \rho, P, T, \rho_1, \rho_2, \rho_1^0, \rho_2^0, e_1, e_2, c_1, c_2, \alpha_1, \alpha_2$ . Для их нахождения воспользуемся законами сохранения (19), (20), (25) или (26). Система законов сохранения замыкается уравнениями состояния BB [10–13] и ПД [14–16]:

$$P = P_1(\rho_1^0, T_1), P = P_2(\rho_2^0, T_2), T = T_1 = T_2, e_1 = e_1(\rho_1^0, T_1), e_2 = e_2(\rho_2^0, T_2)$$
 (27) и обычными для многокомпонентных и гетерогенных смесей связями:

 $\alpha_1 + \alpha_2 = 1, \ \rho_1 = \alpha_1 \rho_1^0, \ \rho_2 = \alpha_2 \rho_2^0, \ \rho = \alpha_1 \rho_1^0 + \alpha_2 \rho_2^0, \ c_1 + c_2 = 1, \ c_1 = \rho_1 / \rho, \ c_2 = \rho_2 / \rho.$  (28) Предложенная система уравнений равновесной двухфазной гетерогенной смеси с

Предложенная система уравнений равновесной двухфазной гетерогенной смеси с дополнениями (27) и (28) становится замкнутой. Однако требуется проверка ее на гиперболичность и инвариантность относительно преобразования Галилея.

## 3. Исследование на гиперболичность и инвариантность системы уравнений гетерогенной смеси

Анализ системы уравнений на гиперболичность можно проводить как в эйлеровых, так и в лагранжевых переменных. Мы воспользуемся массовыми переменными Лагранжа и ограничимся одномерным плоским случаем, так как основные качественные закономерности

просматриваются и в этом частном случае. Также примем, что вязкость и теплопроводность отсутствуют, то есть будем рассматривать среду без диссипации энергии.

Переход от эйлеровых переменных к лагранжевым осуществим с помощью следующих формул:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial m} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x}$$

Система уравнений (19), (20), (25) примет вид:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho^2 \frac{\partial v}{\partial m} = 0, \tag{29}$$

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial m},\tag{30}$$

$$\frac{d(\rho_1 e_1 + \rho_2 e_2)}{dt} + \rho P \frac{\partial v}{\partial m} = 0.$$
(31)

В силу принятого выше допущения об отсутствии теплопроводности, уравнение сохранения энергии можно заменить уравнением сохранения энтропии вдоль траектории каждой частицы:

$$\frac{dS}{dt} = 0$$

Заменим в уравнении сохранения импульса производную от давления:

$$\frac{\partial P}{\partial m} = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{S} \frac{\partial \rho}{\partial m} + \left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_{\rho} \frac{\partial S}{\partial m} = c^{2} \frac{\partial \rho}{\partial m} + P_{S} \frac{\partial S}{\partial m}$$

где  $c = \sqrt{(\partial P/\partial \rho)_S}$  – скорость звука,  $P_S = (\partial P/\partial S)_\rho$ .

Так как лагранжевы координаты каждой частицы сохраняются вдоль ее траектории, то полная производная в уравнениях (29)–(31) является частной в лагранжевых координатах:

$$\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t}$$

Тогда система уравнений (29)–(31) примет вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho^2 \frac{\partial v}{\partial m} = 0,$$
  
$$\frac{\partial v}{\partial t} + c^2 \frac{\partial \rho}{\partial m} + P_S \frac{\partial S}{\partial m} = 0$$
  
$$\frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

Составим матрицу коэффициентов при производных по координате

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \rho^2 & 0 \\ c^2 & 0 & P_S \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (32)

Решая уравнение (32)

$$\det(A-\lambda E) = \lambda \left(\lambda^2 - c^2 \rho^2\right) = 0,$$

находим собственные значения:

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = c\rho, \quad \lambda_3 = -c\rho.$$

Они вещественны и различны при условии, что  $(\partial P/\partial \rho)_S > 0$ , которое выполняется для предложенной равновесной гетерогенной смеси. Таким образом, система (29)–(31) имеет гиперболический тип.

Проведем анализ системы (19), (20), (25) на инвариантность относительно преобразования Галилея по аналогии с [8–9]. Введем новую систему координат, которая движется с постоянной скоростью D относительно старой. Скорость в новой системе координат будет равна

 $v_H = v + D$ ,

координата определяется из уравнения

$$x_H = x + Dt$$
.

Производные по координате и времени определяются следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x_H}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} + D \frac{\partial}{\partial x_H}$$

Снова ограничимся одномерным плоским случаем, тогда системы (19), (20), (25) примут вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \tag{33}$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho v \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{\partial P}{\partial x},\tag{34}$$

$$\frac{\partial(\rho_1 e_1 + \rho_2 e_2)}{\partial t} + v \frac{\partial(\rho_1 e_1 + \rho_2 e_2)}{\partial x} + P \frac{\partial v}{\partial x} = JQ_v.$$
(35)

Запишем эти уравнения, для новой системы координат:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + D \frac{\partial \rho}{\partial x} + (v_H - D) \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial (v_H - D)}{\partial x} = 0,$$
  
$$\rho \frac{\partial (v_H - D)}{\partial t} + \rho D \frac{\partial (v_H - D)}{\partial x} + \rho (v_H - D) \frac{\partial (v_H - D)}{\partial x} = -\frac{\partial P}{\partial x},$$
  
$$\frac{\partial (\rho_1 e_1 + \rho_2 e_2)}{\partial t} + D \frac{\partial (\rho_1 e_1 + \rho_2 e_2)}{\partial x} + (v_H - D) \frac{\partial (\rho_1 e_1 + \rho_2 e_2)}{\partial x} + P \frac{\partial (v_H - D)}{\partial x} = JQ_v.$$

После несложных преобразований и сокращения членов с противоположными знаками, получим уравнения, полностью совпадающие с (33), (34) и (35) соответственно. Таким образом, система уравнений равновесной двухфазной гетерогенной смеси инвариантна относительно преобразования Галилея.

#### Выводы

По результатам данной работы можно сделать следующие выводы:

1. Система законов сохранения в равновесной математической модели двухфазной смеси может быть сведена к системе законов сохранения для смеси, когда замыкающими уравнениями являются уравнения состояния для удельной внутренней энергии и давления фаз, а также обычные для гетерогенных смесей соотношения;

2. Система законов сохранения в равновесной математической модели двухфазной смеси является гиперболичной;

3. Система законов сохранения в равновесной математической модели двухфазной смеси инвариантна относительно преобразования Галилея.

Статья выполнена при поддержке Правительства РФ (Постановление № 211 от 16.03.2013 г.), соглашение № 02.А03.21.0011.

#### Литература

1. Нигматулин, Р.И. Основы механики гетерогенных сред / Р.И. Нигматулин. – М.: Наука, 1978. – 336 с.

2. Куропатенко, В.Ф. Модели механики сплошных сред / В.Ф. Куропатенко. – Челябинск: Изд-во Челябинского государственного университета, 2007. – 302 с.

3. Рахматуллин, Х.А. Основы газодинамики взаимопроникающих движений сжимаемых сред / Х.А. Рахматулин // Прикладная математика и механика. – 1956. – Т. 20, Вып. 27. – С. 184–195.

4. Крайко, А.Н. Механика многофазных сред / А.Н. Крайко, Р.И. Нигматулин, В.К. Старков, Л.Б. Стернин // Итоги науки и техники. Гидромеханика. – 1973. – Т. 6. – С. 93–174.

5. Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц / Н.Н. Яненко, Р.И. Солоухин, А.Н. Папырин, В.М. Фомин. – Новосибирск: Наука: Сиб. отд-ние, 1980. – 159 с.

6. Куропатенко, В.Ф. Модель многокомпонентной среды / В.Ф. Куропатенко // Доклады академии наук. – 2005. – Т. 403, № 6. – С. 761–763.

7. Куропатенко, В.Ф. Новые модели механики сплошных сред / В.Ф. Куропатенко // Инженерно-физический журнал. – 2011. – Т. 84, № 1. – С. 74–92.

8. Ковалев, Ю.М. Математическая модель газовзвеси с химическими превращениями в приближении парных взаимодействий / Ю.М. Ковалев, Е.Е. Пигасов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2014. – Т. 7, № 3. – С. 40–49.

9. Ковалев, Ю.М. Математический анализ уравнений сохранения двухфазных смесей / Ю.М. Ковалев, Е.А. Ковалева // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2014. – Т. 7, № 2. – С. 29–37.

10. Ковалев, Ю.М. Математическое моделирование тепловой составляющей уравнения состояния молекулярных кристаллов / Ю.М. Ковалев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 34–42.

11. Фортов, В.Е. Уравнения состояния вещества: от идеального газа до кварк-глюонной плазмы / В.Е. Фортов. – М.: Физматлит, 2012. – 490 с.

12. Хищенко, К.В. Исследование уравнений состояния материалов при высокой концентрации энергии / К.В. Хищенко, В.Е. Фортов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. – 2014. – Т. 4, № 1. – С. 6–16.

13. Зельдович, Я.Б. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений / Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер. – М.: Физматлит, 2008. – 652 с.

14. Моделирование взрыва шнурового заряда в пологе леса при отсутствии пожара / В.А. Антонов, А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев, Л.Ю. Наймушина // Физика горения и взрыва. – 1993. – Т. 29, № 4. – С. 115–123.

15. Куропатенко, В.Ф. Уравнение состояния продуктов детонации плотных ВВ / В.Ф. Куропатенко // Физика горения и взрыва. – 1989. – Т. 25, № 6. – С. 112–117.

16. Мейдер, Ч. Численное моделирование детонации / Ч. Мейдер. – М.: Мир, 1985. – 384 с. Поступила в редакцию 22 июля 2018 г.

> Bulletin of the South Ural State University Series "Mathematics. Mechanics. Physics" 2018, vol. 10, no. 4, pp. 49–57

> > DOI: 10.14529/mmph180406

## EQUILIBRIUM MATHEMATICAL MODEL OF MULTICOMPONENT HETEROGENEOUS MEDIA

Yu.M. Kovalev, F.G. Magazov, E.S. Shestakovskaya

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation *E-mail:* leshest@list.ru

In this paper, a mathematical model of an equilibrium two-phase mixture is constructed based on the general equations of conservation of heterogeneous multicomponent mixtures. This mathematical model was studied for the presence of hyperbolicity and invariance regarding the Galilean transformation. Hyperbolicity of the mathematical model of the equilibrium two-phase mixture was demonstrated, which proved the possibility of calculating high-speed processes, for example, the processes of initiation of detonation in condensed explosives by strong shock waves. Hyperbolicity of the mathematical model of equilibrium two-phase mixture leads to the fact that velocity of propagation of disturbances (sound velocity) in the mixture is a finite value. This fact is very important in analyzing the processes of the output of initiating shock waves into the detonation greatly simplifies the general mathematical model of heterogeneous multicomponent mixtures. It is shown that the system of conservation laws in an equilibrium mathematical model of two-phase mixture can be reduced to the system of conservation laws for a mixture, when the closing equations are the equations of state for specific internal energy and phase pressure, as well as the ratios that are usual for heterogeneous mixtures. Within the frameworks of the equilibrium mathematical model of two-phase mixture, justification for the coordination of energy of phase transitions was carried out. It was taken into account that phase transitions in a detonation wave occur at a constant volume.

Analysis of the equilibrium mathematical model of two-phase mixture for the presence of invariance regarding the Galileo transformation showed its invariance, which confirms the correctness of the assumptions made in this paper.

*Keywords: mathematical model; two-phase mixture; equation of state; high-speed process; shock wave.* 

#### References

1. Nigmatulin R.I. *Osnovy mekhaniki geterogennykh sred* (Fundamentals of mechanics of heterogeneous media), Moscow, Nauka, 1978, 336 p. (in Russ.).

2. Kuropatenko V.F. *Modeli mekhaniki sploshnykh sred* (Models of continuum mechanics), Chelyabinsk, Izd-vo Chelyabinskogo gosudarstvennogo universiteta Publ., 2007, 302 p. (in Russ.).

3. Rahmatulin H.A. *Prikladnaya matematika i mekhanika*, 1956, Vol. 20, Issue 27, pp. 184–195. (in Russ.).

4. Kraiko A.N., Nigmatulin R.I., Starkov V.K., Sternin L.B. *Itogi nauki i tekhniki. Gidromekhanika*, 1973, Vol. 6, pp. 93–174. (in Russ.).

5. Yanenko N.N., Soloukhin R.I., Papyrin A.N., Fomin V.M. *Sverkhzvukovye dvukhfaznye te-cheniya v usloviyakh skorostnoy neravnovesnosti chastits* (Supersonic two-phase flows under conditions of high-speed non-equilibrium of particles), Novosibirsk, Nauka, Sibirskoe otdelenie Publ., 1980, 159 p. (in Russ.).

6. Kuropatenko V.F. Model of a multicomponent medium. *Doklady Physics*, 2005, Vol. 50, no. 8, pp. 423–425. DOI: 10.1134/1.2039984

7. Kuropatenko V.F. New model of continuum mechanics. *Journal of engineering physics and thermophysics*, 2011, Vol. 84, no. 1, pp. 77–99. DOI: 10.1007/s10891-011-0457-0

8. Kovalev Yu.M., Pigasov E.E. A Mathematical Model of Gas Suspension with Chemical Reactions in the Pair-Interaction Approximation. *Bulletin of the South Ural State University. Series Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2014, Vol. 7, no. 3, pp. 40–49. DOI: 10.14529/mmp140304

9. Kovalev Yu.M., Kovaleva E.A. A Mathematical Study of the Conservation Equation for Two-Phase Mixtures. *Bulletin of the South Ural State University. Series Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2014, Vol. 7, no. 2, pp. 29–37. DOI 10.14529/mmp140202

10. Kovalev Yu.M. Mathematical Modelling of the Thermal Component of the Equation of State of Molecular Crystals. *Bulletin of the South Ural State University. Series Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2013, Vol. 6, no. 1, pp. 34–42.

11. Fortov V.E. Uravneniya sostoyaniya veshchestva: ot ideal'nogo gaza do kvark-glyuonnoy plazmy (Equations of state of matter: from an ideal gas to a quark-gluon plasma), Moscow, Fizmatlit Publ., 2012, 490 p. (in Russ.).

12. Khishchenko K.V., Fortov V.E. Issledovanie uravneniy sostoyaniya materialov pri vysokoy kontsentratsii energii. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo gosudarstvennogo universiteta*, 2014, Vol. 4, no. 1, pp. 6–16. (in Russ.).

13. Zel'dovich Ya.B., Rayzer Yu.P. *Fizika udarnykh voln i vysokotemperaturnykh gidrodinamicheskikh yavleniy* (Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena), Moscow, Fizmatlit Publ., 2008, 652 p. (in Russ.).

14. Antonov V.A., Grishin A.M., Kovalev Yu.M., Naymushina L.Yu. Fizika goreniya i vzryva, 1993, Vol. 29, no. 4, pp. 115–123.

15. Kuropatenko V.F. Fizika goreniya i vzryva, 1989, Vol. 25, no. 6, pp. 112–117. (in Russ.).

16. Mader C.L. *Numerical modeling of detonations*. University of California Press, Berkeley–Los Angeles–London, 1979, 485 p. DOI: 10.1002/prep.19810060306

Received July 22, 2018

# СТЕНДОВЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВИБРОЗАЩИТНЫХ УСТРОЙСТВ ПРИ СЛУЧАЙНОМ ВНЕШНЕМ НАГРУЖЕНИИ

#### П.А. Тараненко, Ю.О. Пронина, И.Я. Березин, А.А. Абызов

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация E-mail: taranenkopa@susu.ru

> Виброзащитные кресла находят широкое применение в конструкциях современных мобильных машин как одно из средств обеспечения требований санитарных норм по уровню вибраций на месте водителя. При этом актуальна задача обоснованного выбора динамических характеристик кресла в соответствии с параметрами внешнего вибрационного воздействия и особенностями динамической системы машины. Современное виброзащитное кресло имеет достаточно сложную конструкцию, включающую нелинейные упруго-демпфирующие элементы. Поэтому в ряде случаев возникает необходимость экспериментального определения его характеристик.

> Статья посвящена экспериментальному исследованию динамических характеристик виброзащитного кресла Sibeco промышленного трактора Т-11 Челябинского тракторного завода. Для исследований использовался электродинамический вибростенд V875-440-HBT 900 Combo фирмы LDS (Англия), трехкомпонентные акселерометры, информационноизмерительная система LMS Scadas LAB и программное обеспечение LMS Test.Lab 13A. Получена амплитудно-частотная характеристика кресла, определена его собственная частота и параметры линеаризованной математической модели (масса, жесткость, коэффициент вязкого трения). По результатам испытаний при случайном нагружении определены сертификационные характеристики кресла (коэффициент передачи SEAT и коэффициент передачи в зоне резонанса).

> Характеристики использованы при моделировании движения трактора. Показано, что наиболее эффективным способом снижения вибронагруженности является изменение собственной частоты за счет снижения упругой характеристики системы подрессоривания кресла.

> Ключевые слова: трактор; кресло оператора; виброизоляция; случайный процесс; спектральная плотность; вибрационная нагруженность.

При моделировании процессов реальной эксплуатации машин и сооружений часто возникает необходимость постановки задачи статистической динамики связанных механических систем при случайном воздействии со стороны внешней среды. При этом входное воздействие задается в виде функций спектральной плотности, отражающих распределение дисперсий широкополосных стационарных процессов в определенных частотных диапазонах. С другой стороны, динамические свойства исследуемого объекта описываются системой дифференциальных уравнений, которые в соответствии с операторным методом [1, 2] преобразуются в комплекс частотных передаточных функций, отражающих распределение потенциально резонансных частот системы для каждой из обобщенных координат. В последующем названные функции путем применения основных соотношений статистической динамики [3] преобразуются в спектральные плотности выходных процессов:

$$S_{Y}(\omega) = |W_{Y/X}(i\omega)|^{2} S_{X}(\omega),$$

где  $S_X(\omega)$ ,  $S_Y(\omega)$  – функции спектральных плотностей входного и выходного процессов;  $W_{Y/X}(i\omega)$  – частотная передаточная функция.

Полученные функции спектральных плотностей используются при решении важных прикладных задач, таких как прогнозирование ресурса изделий, обеспечение прочностной надежности ответственных элементов конструкций, оценка и контроль качества вибрационной

безопасности обслуживающего персонала и т. п. В предлагаемой публикации на примере исследований динамических характеристик виброзащитного кресла оператора промышленного трактора обсуждаются методика и результаты стендовых исследований, позволяющих взамен проведения натурных испытаний трактора получить наиболее достоверные результаты в лабораторных условиях.

При создании новых моделей промышленных тракторов выполнение нормативных требований по вибрациям на месте оператора является достаточно сложной задачей. Результаты экспериментальных и расчетных исследований [4, 5] показали, что одним из основных источников низкочастотного вибрационного воздействия на ходовую часть трактора являются динамические процессы, возникающие при перекатывании опорных катков по тракам гусеницы, лежащей на грунте. Эффективным средством снижения передачи таких вибраций на рабочее место оператора служит виброзащитное кресло, в связи с чем задача оптимизации его характеристик является актуальной [6]. Для проведения расчетных исследований разработана математическая модель, описывающая динамику промышленного трактора с полужесткой подвеской [7]. В число параметров модели входят линеаризованные упругие и демпфирующие характеристики виброзащитного кресла. Современные модели кресел имеют достаточно сложную конструкцию, включающую, в частности, совмещенную гидропневматическую систему подрессоривания. Наиболее точно значения требуемых характеристик могут быть определены в ходе экспериментальных исследований.

В качестве объекта исследований рассмотрено виброзащитное кресло немецкой фирмы Sibeco [8], которое в настоящее время устанавливается на перспективном промышленном тракторе серии Т–11 Челябинского тракторного завода. Кресло отличается стабильностью характеристик и возможностью их регулирования в процессе испытаний опытных образцов тракторов. Исследования выполнены в Центре экспериментальной механики Южно-Уральского государственного университета (НИУ) на стендовой установке, включающей:

1. Электродинамический вибростенд V875-440-HBT 900 Combo фирмы LDS (Англия) с усилителем SPA40K [9], предназначенный для гармонического, случайного и ударного воздействий на исследуемое изделие в вертикальном или горизонтальном направлениях. Рабочий диапазон частот 0–3000 Гц; максимальное виброускорение 100g.

2. Персональный компьютер с предустановленным программным обеспечением LMS Test.Lab 13A [10], обеспечивающим управление, обработку и представление результатов виброиспытаний.

3. 96-канальную информационно-измерительную систему LMS Scadas LAB, позволяющую осуществлять управление, сбор, анализ и регистрацию результатов испытаний. В качестве первичных датчиков применяются трехкомпонентные акселерометры чувствительностью 100 mV/g.

При проведении испытаний основание кресла жестко закреплялось на платформе стенда (рис.1).

В соответствии с отечественными и зарубежными нормативными документами [11–13] в качестве сертификационных характеристик виброзащитных кресел операторов промышленных тракторов установлены:

- собственная частота кресла  $f_c$ ;

– коэффициент передачи *SEAT*, характеризующий качество подрессоривания при случайном нагружении в диапазоне частот 0–17 Гц;

- коэффициент передачи  $H(f_r)$ , характеризующий качество подрессоривания в зоне резонанса.



Рис. 1. Установка кресла на испытательном стенде

На рис. 2 приведена амплитудно-частотная характеристика кресла *Sibeco*, на основе анализа которой, наряду с определением собственной частоты, выполнена идентификация структуры модели кресла и значений его упруго-вязких характеристик. В частности, установлено, что

собственная частота кресла  $f_c$  равна 2,2 Гц. С учетом малости вибрационных перемещений конструкцию кресла можно рассматривать как одномассовую линейную систему с последовательным соединением упругого и демпфирующего элементов и характеристиками:  $C_{\kappa p} = 17,1\cdot10^3$  Н/м и  $\mu_{\kappa p} = 1,53\cdot10^3$  Н·с/м соответственно. Достоверность характеристик системы подрессоривания кресла обеспечена дублированием метода испытаний, в частности, методом декремента колебаний при работе стенда в режиме ударного нагружения.



Рис. 2. Амплитудно-частотная характеристика кресла Sibeco. Y, Z – перемещения подвижной платформы стенда и приведенной массы тела оператора на поверхности сидения; a – экспериментальные данные; б, е – получено расчетом для вариантов параллельного и последовательного соединения упругого и вязкого элементов подрессоривания кресла.

Эффективность виброзащитных кресел в условиях реальной эксплуатации машин оценивается сертификационными характеристиками SEAT и H(fr), определение которых в ходе проведения натурных испытаний приводит к неоднозначным результатам вследствие естественного отличия условий и режимов движения. В связи с этим нормативными документами [12, 13] предусмотрена возможность лабораторных исследований, когда с поверхности платформы стенда на основание кресла подается реализация стандартизированного входного случайного процесса, при этом синхронно регистрируется выходной сигнал датчиков измерительного диска на поверхности сидения. Названные реализации преобразуются информационно-измерительной системой стенда в соответствующие функции спектральной плотности (рис. 3).

Коэффициент передачи *SEAT* отображает соответствие между вероятностными характеристиками выходного и входного процессов в наименее благоприятном диапазоне частот (1–17 Гц), в котором, по данным медико-биологических исследований, возникают резонансные явления в основных жизненно важных органах тела человека (голова, позвоночная система, внутренние органы, руки, ноги и др.) [14–16]. Нормативными документами коэффициент вводится в виде

#### $SEAT = a_s/a_p$ ,

где  $a_s$  и  $a_p$  – средние квадратические значения корректированного ускорения на измерительном диске сидения в диапазоне частот 1–17 Гц выходного и входного процессов соответственно. Для получения корректированных значений экспериментально зарегистрированные ускорения умножают на весовые коэффициенты, значения которых соответствуют степени влияния частоты на отдельные органы тела человека [17]. Методика определения коэффициента *SEAT* предусматривает следующую последовательность операций:

- указанный интервал частот разделяется на третьоктавные полосы;

– в каждой *i*-й полосе путем интегрирования соответствующих функций спектральной плотности получают значения средних квадратических ускорений входа *a<sub>si</sub>* и *a<sub>pi</sub>*;

– корректировкой полученных значений весовыми коэффициентами *W<sub>i</sub>* и последующим суммированием получают:

$$a_s = (\sum_{i=1}^n (a_{si}W_i)^2)^{0.5}$$
,  $a_p = (\sum_{i=1}^n (a_{pi}W_i)^2)^{0.5}$ .

Процедура определения коэффициента передачи в зоне резонанса совпадает с предыдущей; отличие состоит в том, что здесь расчет проводится лишь в зоне третьоктавной полосы  $f_r$ , в которой возникает резонансное явление:

$$H(f_r) = a_s(f_r)/a_p(f_r).$$

На графике (рис. 3, *в*) наличие пика в зоне 2 Гц связано с проявлением резонанса на собственной частоте кресла Sibeco.



процесса, фактически реализованная на стенде; е – выходного процесса, подусмотренная в тост [12], о – выходного процесса, полученная экспериментально

Сопоставление сертификационных характеристик кресла Sibeco с предельными нормативными значениями [11] приведено в табл. 1.

Сертификационные характеристики виброзащитных кресел	Нормативные требования	Результаты лабораторных исследований кресла Sibeco		
Собственная частота $f_c$ , Гц	не более 1,5	2,2		
Коэффициент передачи SEAT	не более 0,7	0,53		
Коэффициент передачи в зоне резонанса <i>H</i> ( <i>f</i> <sub><i>r</i></sub> )	не более 1,5	1,6		

Полученные в результате экспериментальных исследований характеристики кресла были использованы в математической модели [7], описывающей динамику промышленного трактора с полужесткой подвеской. Проведены расчетные исследования, в ходе которых моделировалось

движение трактора по трассе; при этом варьировались значения упругих И демпфирующих характеристик системы виброзащиты. В качестве примера на рис. 4. представлена спектральная диаграмма вибронагруженности кресла оператора, полученная при моделировании движения трактора Т-11 на III передаче. Из представленных данных следует, что наиболее эффективной рекомендацией является изменение собственной частоты счет снижения упругой 38 характеристики системы подрессоривания кресла.

Заключение. В результате лабораторных экспериментальных исследований получены значения линеаризованных упругих и демпфирующих характеристик виброзащитного





кресла оператора промышленного трактора. Показано, что собственная частота кресла, а также коэффициент передачи в зоне резонанса превышают нормативные значения [11] (табл. 1).

На основе анализа результатов моделирования движения трактора установлено, что снижение собственной частоты кресла до 1,5 Гц позволит снизить корректированный уровень вертикальных виброускорений кресла на 36 %; при этом будут выполнены нормативные требования по вибронагруженности рабочего места оператора (рис. 4).

#### Литература

1. Пугачев, В.С. Теория случайных функций и ее применение к задачам автоматического управления / В.С. Пугачев. – М.: Физматгиз, 1962. – 883 с.

2. Силаев, А.А. Спектральная теория подрессоривания транспортных машин / А.А. Силаев. – М.: Машиностроение, 1972. – 192 с.

3. Светлицкий, В.А. Статистическая механика и теория надежности / В.А. Светлицкий. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. – 503 с.

4. Мицын, Г.П. Моделирование процесса взаимодействия гусеничного движителя промышленного трактора с грунтом/ Г.П. Мицын, Б.М. Позин, И.Я. Березин, Д.В. Хрипунов // Инженерная защита окружающей среды в транспортно-дорожном комплексе: Сб. Науч. тр. МАДИ(ГТУ), УФ МАДИ(ГТУ), Москва, 2002. – С. 217–236.

5. Березин, И.Я. Моделирование процесса формирования вибрационного нагружения рабочего места оператора промышленного трактора / И.Я. Березин, Ю.О. Пронина, В.Н. Бондарь, Л.В. Вершинский, П.А. Тараненко // Тракторы и сельхозмашины. – 2016. – № 8. – С. 14–18.

6. Mehdizadeh S.A. Optimization of Passive Tractor Cabin Suspension System Using ES, PSO and BA / S.A. Mehdizadeh // Journal of Agricultural Technology. – 2015. – Vol. 11, no. 3. – pp. 595–607.

7. Пронина, Ю.О. Совершенствование системы виброзащиты оператора промышленного трактора при проектировании на основе моделирования процесса низкочастотного воздействия со стороны гусеничного движителя: автореферат дис. канд. техн. наук / Ю.О. Пронина. – Челябинск, 2018. – 18 с.

8. Operator Seats for Agricultural Machinery SC2. Available at: http://www.sibeco.net/catalog/seats-for-operators/sidenya-operatora-dlya-selkhoztekhniki-sc2

9. LDS V875. Medium–force shaker. Available at: https://www.bksv.com/en/products/shakers-and-exciters/LDS-shaker-systems/medium-force-shakers/V875

10. LMS SCADAS Lab. High-performance, fit-for-purpose data acquisition hardware for effective laboratory testing. Available at: https://www.plm.automation.siemens.com/ru/products/lms/testing/ scadas/lab.shtml

11. Вибрация. Оценка вибрации сидений транспортных средств по результатам лабораторных испытаний. Ч. 1. Общие требования: международный стандарт ГОСТ ИСО 10326-1-2002. – М.: Стандартинформ, 2007. – 7 с.

12. Вибрация. Лабораторный метод оценки вибрации, передаваемой через сиденье оператора машины. Машины землеройные: межгосударственный стандарт ГОСТ 27259-2006 (ИСО 7096:2000). – М.: Стандартинформ, 2008. – 18 с.

13. Вибрация и удар. Измерение общей вибрации и оценка ее воздействия на человека: межгосударственный стандарт ГОСТ 31191.4-2006 (ИСО 2631-4:2001). – М.: Стандартинформ, 2008.

14. Transfer functions as a basis for the verification of models – variability and restraints / B. Hinz, G. Menzel, R. Blüthner, H. Seidel // Clinical Biomechanics. – 2001. – Vol. 16. – Suppl. 1. – P. S93–S100.

15. Kitazaki S. Resonance behaviour of the seated human body and effects of posture / S. Kitazaki, M.J. Griffin // Journal of Biomechanics. – 1997. – Vol. 31. – Issue 2. – P. 143–149.

16. Effect of vibration magnitude, vibration spectrum and muscle tension on apparent mass and cross axis transfer functions during whole-body vibration exposure / N.J. Mansfield, P. Holmlund, R. Lundström *et al.* // Journal of Biomechanics. – 2006. – Vol. 39. – Issue 16. – P. 3062–3070.

17. Санитарные нормы CH 2.2.4/2.1.8.566-96. Производственная вибрация, вибрация в помещениях жилых и общественных зданий. – М.: Издательство стандартов, 1997. – 20 с.

Поступила в редакцию 24 сентября 2018 г.

Тараненко П.А., Пронина Ю.О., Березин И.Я., Абызов А.А.

Bulletin of the South Ural State University Series "Mathematics. Mechanics. Physics" 2018, vol. 10, no. 4, pp. 58–64

DOI: 10.14529/mmph180407

## BENCHMARK TRIALS OF ANTI-VIBRATION DEVICES UNDER RANDOM EXTERNAL LOADING

## P.A. Taranenko, Yu.O. Pronina, I.Ya. Berezin, A.A. Abyzov

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation E-mail: taranenkopa@susu.ru

Anti-vibration seats are widely used in structures of modern mobile cars as one of the means of ensuring compliance with requirements of sanitary regulations regarding the level of vibrations at the driver's seat. At that, the task of a justified choice of dynamic characteristics of the seat in accordance with parameters of external vibratory impact and specificities of dynamic system of a car is relevant. The structure of a modern anti-vibration seat is quite complex as in includes non-linear elastically damping elements. Therefore, it is necessary to experimentally determine characteristics of the seat as of a dynamic system when developing linear mathematical models.

The article is dedicated to experimental research of dynamic characteristics of Sibeco anti-vibration seat of the prospective T-11 industrial tractor of the Chelyabinsk Tractor Plant. V875-440-HBT 900 Combo electrodynamic vibration bench produced by LDS Company (England) was used for the research together with three-component accelerometers, LMS Scadas LAB data measurement system and LMS Test.Lab 13A software. In the result of the trials, an amplitude-frequency characteristic of the seat was obtained, based on which the own frequency and parameters of linearized mathematical model (mass, stiffness, viscous friction coefficient) were determined. Validity of determined characteristics is provided by repetition of the trials using the method of oscillation decrement under operation of the bench in the mode of impact loading. Moreover, trials were conducted under random loading, and certificate characteristics of the seat were obtained (SEAT transmission coefficient and the coefficient of transmission in the resonance zone).

The obtained characteristics were used during simulation of the tractor's movement. It is shown that the most efficient way to reduce vibration load is changing its own frequency due to reduction of elastic behavior of the sprung seat system. The obtained dynamic results can be applied when modeling dynamics of vehicles equipped with analogous anti-vibration seat. The developed method can be applied during experimental research of anti-vibration devices.

Keywords: tractor; operator's seat; vibration isolation; random process; spectral density; vibration loading.

#### References

1. Pugachev V.S. *Teoriya sluchajnyh funkcij i ee primenenie k zadacham avtomaticheskogo upravleniya* (The theory of random functions and its application to problems of automatic control). Moscow, Fizmatgiz Publ., 1962, 883 p. (in Russ.).

2. Silaev A.A. *Spektral'naya teoriya podressorivaniya transportnykh mashin* (Spectral theory of the suspension of transport vehicles). Moscow, Mashinostroenie Publ., 1972, 192 p. (in Russ.).

3. Svetlitskiy V.A. *Statisticheskaya mekhanika i teoriya nadezhnosti* (Statistical mechanics and reliability theory), Moscow, Izd–vo MGTU im. N.E. Baumana Publ., 2004, 504 p. (in Russ.).

4. Mitsyn G.P., Pozin B.M., Berezin I.Ya., Khripunov D.V. Modelirovanie protsessa vzaimodeystviya gusenichnogo dvizhitelya promyshlennogo traktora s gruntom (Modeling the process of interaction of a crawler engine of an industrial tractor with a ground). *Inzhenernaya zashchita okruzhayushchey sredy v transportno-dorozhnom komplekse: Sb. Nauch. tr. MADI(GTU), UF MADI(GTU)* (Engineering environmental protection in the transport complex: Collected Scientific papers MADI (GTU), UV MADI (GTU)), Moscow, 2002, pp. 217–236. (in Russ.).

5. Berezin I.Ya., Pronina Yu.O., Bondar' V.N., Vershinskiy L.V., Taranenko P.A. Simulation of the formation of vibration loading of operator workplace of industrial tractor. *Traktory i sel'khozmashiny*, 2016, no. 8, pp. 14–18. (in Russ.).

6. Mehdizadeh S.A. Optimization of Passive Tractor Cabin Suspension System Using ES, PSO and BA. *Journal of Agricultural Technology*, 2015, Vol. 11, no. 3, pp. 595–607.

7. Pronina Yu.O. Sovershenstvovanie sistemy vibrozashchity operatora promyshlennogo traktora pri proektirovanii na osnove modelirovaniya protsessa nizkochastotnogo vozdeystviya so storony gusenichnogo dvizhitelya: avtoreferat dis. kand. tekhn. nauk (Improving the system of vibroprotection of an industrial tractor operator in the design based on modeling the process of low-frequency exposure from the caterpillar drive: cand. tech. sci. diss.), Chelyabinsk, 2018, 18 p. (in Russ.).

8. Operator Seats for Agricultural Machinery SC2. Available at: http://www.sibeco.net/catalog/ seats-for-operators/sidenya-operatora-dlya-selkhoztekhniki-sc2

9. LDS V875. Medium-force shaker. Available at: https://www.bksv.com/en/products/shakers-and-exciters/LDS-shaker-systems/medium-force-shakers/V875

10. LMS SCADAS Lab. High-performance, fit-for-purpose data acquisition hardware for effective laboratory testing. Available at: https://www.plm.automation.siemens.com/ru/products/lms/testing/ scadas/lab.shtml

11. Vibratsiya. Otsenka vibratsii sideniy transportnykh sredstv po rezul'tatam laboratornykh ispytaniy. Ch. 1. Obshchie trebovaniya: mezhdunarodnyy standart GOST ISO 10326-1-2002 (Vibration. Laboratory method for evaluating vehicle seat vibration. Part 1. Basic requirements: international standard GOST ISO 10326-1-2002), Moscow, Standartinform Publ., 2007, 7 p. (in Russ.).

12. Vibratsiya. Laboratornyy metod otsenki vibratsii, peredavaemoy cherezsiden'e operatora mashiny. Mashiny zemleroynye: mezhgosudarstvennyy standart GOST 27259-2006 (ISO 7096:2000) (Vibration. Laboratory evalution of operator seat vibration. Earth-moving machinery. Interstate standard GOST 27259-2006 (ISO 7096: 2000)), Moscow, Standartinform Publ., 2008, 18 p. (in Russ.).

13. Vibratsiya i udar. Izmerenie obshchey vibratsii i otsenka ee vozdeystviya na cheloveka: mezhgosudarstvennyy standart GOST 31191.4-2006 (ISO 2631-4:2001) (Vibration and shock. Measurement and evaluation of human exposure to whole-body vibration: interstate standard GOST 31191.4-2006 (ISO 2631-4: 2001)). Moscow, Standartinform Publ., 2008. (in Russ.).

14. Hinz B., Menzel G., Blüthner R., Seidel H. Transfer functions as a basis for the verification of models – variability and restraints. *Clinical Biomechanics*, 2001, Vol. 16, Suppl. 1, pp. S93–S100. DOI: 10.1016/S0268-0033(00)00109-1

15. Kitazaki S., Griffin M.J. Resonance behaviour of the seated human body and effects of posture. *Journal of Biomechanics*, 1997, Vol. 31, Issue 2, pp. 143–149. DOI: 10.1016/S0021-9290(97)00126-7

16. Mansfield N.J., Holmlund P., Lundström R., Lenzuni P., Nataletti P. Effect of vibration magnitude, vibration spectrum and muscle tension on apparent mass and cross axis transfer functions during whole-body vibration exposure. *Journal of Biomechanics*, 2006, Vol. 39, Issue 16, pp. 3062–3070. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2005.09.024

17. Sanitarnye normy SN 2.2.4/2.1.8.566-96. Proizvodstvennaya vibratsiya, vibratsiya v pomeshcheniyakh zhilykh i obshchestvennykh zdaniy (Sanitary standards CH 2.2.4 / 2.1.8.566-96. Production vibration, vibration in residential and public buildings), Moscow, Izdatel'stvo standartov Publ., 1997, 20 p. (in Russ.).

#### Received September 24, 2018

## ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ ПОПЕРЕЧНОЙ ДЕФОРМАЦИИ И КОЭФФИЦИЕНТА ПУАССОНА ИЗОТРОПНЫХ РЕОНОМНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ПОЛЗУЧЕСТИ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ЛИНЕЙНОЙ ТЕОРИЕЙ ВЯЗКОУПРУГОСТИ

#### А.В. Хохлов

НИИ механики МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация E-mail: andrey-khokhlov@ya.ru

> Аналитически исследуются возможности линейного интегрального определяющего соотношения вязкоупругости Больцмана-Вольтерры для изотропных стабильных реономных материалов по описанию комплекса моделируемых реологических эффектов, связанных с возможными (наблюдаемыми в испытаниях материалов) типами поведения поперечной деформации и коэффициента Пуассона при одноосном нагружении. Рассматриваемое соотношение пренебрегает влиянием шаровой и девиаторной частей тензоров напряжений и деформаций друг на друга и влиянием их третьих инвариантов (параметров Лоде-Надаи) и содержит две произвольные материальные функции одного аргумента (функции объемной и сдвиговой ползучести). При минимальных (необходимых) ограничениях, наложенных на функции ползучести изучены выражения для коэффициента Пуассона при одноосном растяжении или сжатии постоянной нагрузкой через две функции ползучести и время. Доказаны критерии отрицательности, постоянства, возрастания, убывания и немонотонности коэффициента Пуассона (в зависимости от свойств функции объемной и сдвиговой ползучести) и точная универсальная двусторонняя оценка для диапазона его значений: для произвольных (возрастающих) функций ползучести величина коэффициента Пуассона в любой момент времени лежит в отрезке от минус единицы до одной второй. Все эти эффекты и доказанные общие утверждения проиллюстрированы на конкретных примерах моделей с классическими функциями ползучести и фрактальных моделей.

> Ключевые слова: вязкоупругость; сжимаемость; осевая ползучесть; объемная ползучесть; немонотонность поперечной деформации; отрицательность коэффициента Пуассона.

#### Введение

Данная статья продолжает цикл работ [1–8] по системному изучению комплекса моделируемых реологических эффектов, границ области применимости и сфер влияния материальных функций (МФ) линейного определяющего соотношения (ОС) вязкоупругости

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}(t) = \boldsymbol{e}_{ij} + \boldsymbol{\varepsilon}_0 \boldsymbol{\delta}_{ij}, \quad \boldsymbol{e}_{ij}(t) = \frac{3}{2} \boldsymbol{\Pi} \boldsymbol{s}_{ij}(t), \quad \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\Pi}_{\boldsymbol{\theta}} \boldsymbol{\sigma}_0, \tag{1}$$

$$\sigma_0(t) = \sigma_{ii}(t)/3, \quad s_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_0 \delta_{ij}, \quad \theta(t) = 3\varepsilon_0 = \varepsilon_{ii}(t),$$

$$\mathbf{\Pi} y = \int_{0}^{t} \Pi(t-\tau) \, dy(\tau) \,, \quad \mathbf{\Pi}_{0} y = \int_{0}^{t} \Pi_{0}(t-\tau) \, dy(\tau) \,, \quad t > 0 \,, \tag{2}$$

с двумя произвольными МФ  $\Pi(t)$  и  $\Pi_0(t)$  (функциями сдвиговой и объемной ползучести) и физически нелинейного ОС

$$\mathcal{E}_{ij}(t) = \frac{3}{2} \Phi(L(t)) \sigma(t)^{-1} [\sigma_{ij} - \sigma_0 \delta_{ij}] + \frac{1}{3} \Phi_0(L_0(t)) \delta_{ij}, \quad L(t) = \Pi \sigma, \quad L_0(t) = \Pi_0 \sigma_0, \quad (3)$$

с четырьмя произвольными МФ  $\Pi(t)$ ,  $\Phi(x)$ ,  $\Pi_0(t)$ ,  $\Phi_0(x)$ , представляющего собой один из вариантов распространения на трехосный случай нелинейного уравнения наследственности  $\varphi(\varepsilon(t)) = \int_0^t \Pi(t-\tau) d\sigma(\tau)$ , предложенного Ю.Н. Работновым в качестве обобщения одноосного линейного ОС (1) путем введения второй МФ  $\varphi(u)$  [9, 10].

ОС (1) описывает процессы изотермического деформирования нестареющих изотропных вязкоупругих сред [11–14]; оно связывает истории изменения тензоров (малых) деформаций  $\varepsilon(t)$  и напряжений  $\sigma(t)$  в произвольной точке тела в предположении отсутствия взаимного влияния шаровых и девиаторных частей тензоров  $\mathbf{e} = \varepsilon - \varepsilon_0 \mathbf{I}$  и  $\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma} - \sigma_0 \mathbf{I}$  (т. е. независимости объемной деформации  $\theta(t)$  от касательных напряжений, а сдвиговых деформаций – от среднего напряжения  $\sigma_0(t)$ ) и пренебрегая влиянием третьих инвариантов тензоров (или их параметров Лоде). Входные процессы  $\sigma(t)$  предполагаются кусочно-гладкими при t > 0, а время и компоненты тензора напряжений – безразмерными. Множитель 3/2 вынесен из  $\Pi(t)$  в (1) для удобства сравнения с результатами анализа нелинейного ОС (3).

Цель статьи – аналитическое исследование характерных свойств и возможных типов поведения коэффициента Пуассона  $v = -\varepsilon_{\perp} / \varepsilon_{\parallel}$ , которые порождает ОС (1) с произвольными функциями сдвиговой и объемной ползучести при одноосном нагружении  $\sigma_{11}(t) = \overline{\sigma}h(t)$  постоянной нагрузкой ( $h(t) - \phi$ ункция Хевисайда).

Коэффициент Пуассона (КоП) изотропных реономных материалов при одноосном нагружении не постоянен, а зависит от времени (от продольной деформации  $\mathcal{E}_{\parallel}(t)$ ) и программы нагружения. Зависимости поперечной и объемной деформаций ( $\varepsilon_1$  и  $\theta$ ) от времени и осевой деформации  $\mathcal{E}_{\parallel}$ , поведение и диапазоны значений КоП для многих полимеров, дисперсно наполненных композитов (твердых топлив, асфальтобетонов, АБС-пластиков), прессованных порошковых композитов, сплавов, металлических и полимерных пен, льдов, грунтов, горных пород весьма разнообразны даже в случае одноосных нагружений и малых деформаций, даже в испытаниях на ползучесть при постоянной нагрузке или на релаксацию [14-47]. У большинства металлов, многих стекол, полимеров (например, полиэтиленов высокой плотности) и порошковых композитов наблюдается монотонное возрастание  $\nu$  с ростом  $\mathcal{E}_{\parallel}(t)$  [24–29]. У многих реономных материалов, как достаточно хрупких, так и высокоэластичных (твердое топливо, асфальтобетон, АБС-пластики, чугун и т. п.) наблюдается убывание V(t), свидетельствующее о необратимом изменении объема при растяжении или сжатии [21, 30–35]. У некоторых объемная деформация и КоП меняются немонотонно и меняют знак [36]. В последние три десятилетия обнаружены, активно конструируются и исследуются новые материалы с отрицательным КоП [37-47]. Поведение и величина КоП изотропных композитных материалов зависят от объемной доли (дисперсного) наполнителя, от форм и размеров его частиц, свойств адгезионных связей с матрицей, степени кристалличности матрицы, текущего уровня поврежденности, предыстории нагружения и термообработки и многих иных факторов.

Объемную ползучесть, изменение КоП и вида напряженного или деформированного состояний, и типичные механические эффекты, связанные с ними, следует учитывать при обработке и интерпретации кривых испытаний наследственных материалов (в частности, при определении твердости, модуля упругости и других механических свойств пленок, покрытий и поверхностных слоев материалов методами (нано)индентирования [48-51]) и при выборе и идентификации определяющего соотношения для моделирования их поведения. Для выбора того или иного ОС для описания поведения некоторого материала (и дальнейшего совершенствования и обобщения ОС) важно знать, какие механические эффекты оно способно моделировать и при каких требованиях к материальным функциям, в частности, – какие из упомянутых эффектов, связанных с объемной и поперечной деформациями. Для этого необходимо системное аналитическое исследование общих свойств кривых релаксации, ползучести и деформирования, которые порождает применяемое ОС с произвольными МФ при разных типовых программах нагружения, и их зависимости от параметров программ нагружения и характеристик материальных функций. В частности – системное исследование арсенала возможностей (круга моделируемых и не моделируемых эффектов) и удобных для проверки по данным тех или иных испытаний материалов индикаторов применимости линейного ОС (1). Ведь оно играет роль базы для сопоставления, своеобразной «системы отсчета», по отношению к которой естественно изучать эффекты нелинейности, наблюдаемые в испытаниях материалов и описываемые

#### Хохлов А.В.

#### Особенности поведения поперечной деформации и коэффициента Пуассона изотропных реономных материалов при ползучести, ...

различными нелинейными OC (но не описываемые линейным). Нередко случается, что нелинейности поведения материала приписывают эффекты, адекватно описываемые в рамках линейной теории, которые вытекают лишь из наличия наследственности (памяти) и оказываются присущими *всем* материалам с наследственностью, работающим в линейной области (при достаточно малых деформациях и скоростях) [1, 3, 4].

#### 1. Минимальные ограничения на функции ползучести линейного ОС вязкоупругости

Обращение ОС (1), как известно, имеет вид

$$\sigma_0 = \mathbf{R}_0 \theta, \quad s_{ij}(t) = \frac{2}{3} \mathbf{R} e_{ij}, \quad \mathbf{R} y \coloneqq \int_0^t R(t-\tau) dy(\tau), \quad \mathbf{R}_0 y \coloneqq \int_0^t R_0(t-\tau) dy(\tau), \quad t > 0,$$
(4)

где функции релаксации R(t) и  $R_0(t)$  связаны с П и П<sub>0</sub> интегральными уравнениями

$$\int_{0}^{t} R(t-\tau)\Pi(\tau) d\tau = t , \quad \int_{0}^{t} R_{0}(t-\tau)\Pi_{0}(\tau) d\tau = t , \quad t > 0 .$$
(5)

Функции ползучести и релаксации  $\Pi(t)$ ,  $\Pi_0(t)$ , R(t),  $R_0(t)$  в OC (1),(4) предполагаются [11–14] положительными и дифференцируемыми на  $(0;\infty)$ , функции  $\Pi$  и  $\Pi_0$  – возрастающими и выпуклыми вверх [1, 3, 4, 13], а R и  $R_0$  – убывающими и выпуклыми вниз на  $(0;\infty)$ , R и  $R_0$ могут иметь интегрируемую особенность или  $\delta$ -сингулярность в т. t = 0 (слагаемое  $\eta\delta(t)$ ,  $\eta > 0$ ,  $\delta(t)$  – дельта-функция). Из этих условий следует, в частности, существование пределов  $R(+\infty) = \inf R(t) \ge 0$ ,  $R(0) = \sup R(t) > 0$  (y(0) := y(0+) – краткое обозначение для предела функции y(t) справа в т. t = 0;  $R(0) = +\infty$ , если R(t) не ограничена сверху) и  $\Pi(0) = \inf \Pi(t) \ge 0$ . Если  $\Pi(0) \ne 0$  и  $\Pi_0(0) \ne 0$  (такие модели будем называть регулярными), то  $R(0) = 1/\Pi(0) < \infty$  и  $R_0(0) = 1/\Pi_0(0) < \infty$  (т. е. мгновенный модуль сдвига  $G = \frac{2}{3}R(0)$  и объемный модуль  $K = R_0(0)$ диаграмм деформирования с постоянной скоростью конечны [2]).

Все структурные реологические модели, собранные из линейных пружин и демпферов посредством последовательных и параллельных соединений, описываются ОС (1). Функция ползучести любой реологической модели – сумма экспонент с отрицательными показателями и коэффициентами, и, возможно, функции  $\alpha t + \beta$ ,  $\alpha, \beta \ge 0$ , а функция релаксации – сумма экспонент с отрицательными показателями и положительными коэффициентами и, возможно, постоянной  $\beta \ge 0$  и сингулярности  $\eta \delta(t)$ ,  $\eta \ge 0$ . Например, семейство функций

$$\Pi(t) = \alpha t + \beta - \gamma e^{-\lambda t}, \quad \lambda > 0, \; \alpha, \beta \ge 0, \; \gamma \in [0, \beta], \tag{6}$$

удовлетворяет всем ограничениям на МФ и в случае  $\gamma \in (0; \beta)$ ,  $\alpha, \beta > 0$ , порождает все четыре структурно различные (но эквивалентные [1]) четырехзвенные модели из двух пружин и двух демпферов (они регулярны, т. е. у них  $\Pi(0) \neq 0$ ), а при  $\alpha = 0$  – трехзвенные модели Кельвина и Пойнтинга–Томпсона с одним демпфером (они регулярны и эквивалентны). Так как  $\Pi(0) = \beta - \gamma$ , то семейство (6) порождает нерегулярные модели лишь в случае  $\gamma = \beta$ : при  $\lambda\beta = 0$  – ньютоновскую жидкость ( $R = \eta \delta(t)$ ), при  $\alpha = 0$  – модель Фойгта, при  $\alpha > 0$  – обе трехзвенные модели с одной пружиной и двумя демпферами. При  $\gamma = 0$  (6) даёт модель Максвелла.

#### 2. Кривые ползучести, порождаемые соотношением (1) при одноосном растяжении

Рассмотрим мгновенное одноосное нагружение  $\sigma_{11}(t) = \overline{\sigma}h(t)$ , h(t) - функция Хевисайда (ее в дальнейшем будем опускать, полагая, что <math>t > 0), т. е.  $\sigma_{11}(t) = \overline{\sigma} = \text{const}$ , а остальные компоненты тензора напряжений равны нулю. Тогда  $\sigma_0 = \frac{1}{3}\overline{\sigma}h(t)$ , девиатор напряжений – диагональный тензор  $s = \frac{1}{3}\overline{\sigma}h(t)$  diag(2, -1, -1), а из (1) следует, что девиатор деформаций – тоже диагональный тензор  $e = 0, 5\overline{\sigma}\Pi(t)$  diag(2, -1, -1), т. е.  $e_{ij} = 0$  при  $i \neq j$  и

$$e_{11} = \overline{\sigma} \Pi(t) , \ e_{22} = e_{33} = -\frac{1}{2} \overline{\sigma} \Pi(t) , \ \theta(t; \overline{\sigma}) = \frac{1}{3} \overline{\sigma} \Pi_0(t) , \ t > 0.$$
(7)

У тензора деформаций  $\varepsilon_{ij} = e_{ij} + \varepsilon_0 \delta_{ij}$  отличны от нуля только диагональные компоненты  $\varepsilon_{ii}$ :

$$\varepsilon_{11}(t;\overline{\sigma}) = \overline{\sigma} \Pi(t) + \frac{1}{9} \overline{\sigma} \Pi_0(t) = \frac{1}{9} \overline{\sigma} (9\Pi(t) + \Pi_0(t)), \quad t > 0,$$
(8)

$$\varepsilon_{22}(t;\overline{\sigma}) = \varepsilon_{33}(t;\overline{\sigma}) = -\frac{1}{2}\overline{\sigma}\Pi(t) + \frac{1}{9}\overline{\sigma}\Pi_0(t) = \frac{1}{18}\overline{\sigma}\left(-9\Pi(t) + 2\Pi_0(t)\right).$$
(9)

Уравнения (7)–(9) задают семейства кривых объемной, осевой и поперечной ползучести. Из ограничений, наложенных на ФП П и П<sub>0</sub>, следует, что для любого  $\overline{\sigma} > 0$  (будем для определенности рассматривать случай растяжения)  $\varepsilon(t)$ ,  $\theta(t)$  и  $\varepsilon_{11}(t)$  положительны, монотонно возрастают и выпуклы вверх, а с ростом  $\overline{\sigma}$  смещаются вверх по оси деформации. Поперечная деформация  $\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{22}(t)$  и ее модуль не обязаны быть ни монотонными, ни выпуклыми вверх функциями: они могут убывать на всем интервале t > 0, могут иметь точки экстремума и менять знак. Так как из (9)  $\dot{\varepsilon}_{\perp}(t) = -\frac{1}{2}\overline{\sigma} \dot{\Pi}(t) + \frac{1}{9}\overline{\sigma} \dot{\Pi}_{0}(t)$ ,  $\ddot{\varepsilon}_{\perp}(t) = -\frac{1}{2}\overline{\sigma} \ddot{\Pi}(t) + \frac{1}{9}\overline{\sigma} \ddot{\Pi}_{0}(t)$ , то при  $\overline{\sigma} > 0$  критерии (нестрогого) возрастания и выпуклости вниз  $\varepsilon_{\perp}(t)$  на некотором интервале времени имеют вид  $\dot{\Pi}_{0}(t) \ge \frac{9}{2} \dot{\Pi}(t)$ ,  $\ddot{\Pi}_{0}(t) \ge \frac{9}{2} \ddot{\Pi}(t)$ .

Пример 1. Для ОС (1) с (ограниченными) ФП классической модели Кельвина

$$\Pi = \beta - \gamma e^{-\lambda t}, \quad \Pi_0 = \beta_0 - \gamma_0 e^{-\lambda_0 t}, \quad \lambda, \beta, \lambda_0, \beta_0 > 0, \ \gamma \in (0; \beta), \ \gamma_0 \in (0; \beta_0), \tag{10}$$

имеем  $\varepsilon_{\perp}(t;\overline{\sigma}) = \frac{1}{18}\overline{\sigma}(-9\beta + 2\beta_0 + 9\gamma e^{-\lambda t} - 2\gamma_0 e^{-\lambda_0 t})$ . При  $t \to \infty$   $\varepsilon_{\perp}(t;\overline{\sigma})$  стремится к горизонтальной асимптоте  $\varepsilon_{\perp} = \frac{1}{18}\overline{\sigma}(2\beta_0 - 9\beta)$ , не зависящей от  $\lambda$  и  $\lambda_0$ . Скорость ползучести  $\dot{\varepsilon}_{\perp}(t;\overline{\sigma}) = \frac{1}{18}\overline{\sigma}(-9\gamma\lambda e^{-\lambda t} + 2\gamma_0\lambda_0 e^{-\lambda_0 t})$  может менять знак; из условия экстремума  $9\gamma\lambda e^{-\lambda t} = 2\gamma_0\lambda_0 e^{-\lambda_0 t}$  при  $\lambda \neq \lambda_0$  находится (единственная) точка экстремума  $t_m = (\ln \mu)/(\lambda_0 - \lambda)$ ,  $\mu = 4, 5\gamma_0\lambda_0/(\gamma\lambda)$ , если  $t_m > 0$  (т. е.  $\lambda_0 > \lambda \ll \mu > 1$  или  $\lambda_0 < \lambda \ll \mu < 1$ ). Так как  $\varepsilon_{\perp}(t_m) = \frac{1}{18}\overline{\sigma}[2\beta_0 - 9\beta + 9\gamma(1 - \lambda\lambda_0^{-1})e^{-\lambda t_m}]$ , то  $t_m$  – точка минимума при  $\lambda_0 < \lambda \iff \mu < 1$ ). Так как  $\varepsilon_{\perp}(t_m) = \frac{1}{18}\overline{\sigma}[2\beta_0 - 9\beta + 9\gamma(1 - \lambda\lambda_0^{-1})e^{-\lambda t_m}]$ , о  $t_m -$ точка минимума при  $\lambda_0 < \lambda \iff \mu < 1$ ). При  $\lambda = \lambda_0$  (в случае совпадения времен ретардации  $\tau = 1/\lambda$  сдвиговых и объемных деформаций)  $\varepsilon_{\perp}(t)$  всегда монотонна на полуоси  $t \ge 0$ :  $\varepsilon_{\perp}(t)$  возрастает при  $9\gamma - 2\gamma_0 > 0$  и  $\varepsilon_{\perp}(t)$  убывает при  $2\gamma_0 > 9\gamma$ . В случае  $\gamma_0 = 0$ , когда  $\Pi_0(t) = \beta_0 =$ const., т. е. в случае упругой зависимости объемной деформации от среднего напряжения,  $\varepsilon_{\perp} = \frac{1}{18}\overline{\sigma}(-9\Pi(t) + 2\beta_0)$ ) монотонно убывает (и меняет знак, если  $\frac{9}{2}\Pi(0) < \beta_0 < \frac{9}{2}\Pi(\infty)$ , т. е.  $\frac{9}{2}(\beta - \gamma) < \beta_0 < \frac{9}{2}\beta$ ).





На рис. 1 приведены кривые ползучести  $\varepsilon_{11}(t)$  (шесть кривых 2, 4 в верхней части рис.),  $\varepsilon_{\perp}(t) = \varepsilon_{22}$  (шесть кривых 2, 4 в нижней части рис.),  $\theta(t)$  (три кривые 2 в средней части рис.) для  $\overline{\sigma} = 0,01$ , порожденные тремя моделями вида (10) с одинаковыми сдвиговыми ФП П(t) ( $\lambda = 0,1$ ,  $\beta = 1$ ,  $\gamma = 0,5$  и  $\tau = 1/\lambda = 10$ ) и разными  $\Pi_0(t)$  (с разными временами объемной ретардации  $\tau_0 = 1/\lambda_0$ ): с  $\lambda_0 = \lambda = 0,1$  (штрих-пунктирные кривые 2, 4), с  $\lambda_0 = 1 > \lambda$  (сплошные кривые 2, 4) и с

## Особенности поведения поперечной деформации и коэффициента Пуассона изотропных реономных материалов при ползучести, ...

 $\lambda_0 = 0,01 < \lambda$  (штриховые кривые 2, 4). Значение  $\gamma_0 = 0,9$  одинаково у всех моделей, а номера кривых соответствуют двум значениям параметра  $\beta_0 = 2$  и  $\beta_0 = 4$  для каждой из моделей ( $\beta_0$  управляет величинами мгновенного и длительного объемных модулей  $1/(\beta_0 - \gamma_0)$  и  $1/\beta_0$  модели (10)). Кривые ползучести моделей с одинаковым  $\beta_0$  стремятся к одной и той же горизонтальной асимптоте:  $\theta(\infty) = \frac{1}{3}\overline{\sigma}\beta_0$ ,  $\varepsilon_{11}(\infty) = \frac{1}{9}\overline{\sigma}(9\Pi(\infty) + \Pi_0(\infty)) = \frac{1}{9}\overline{\sigma}(9\beta + \beta_0)$ ,  $\varepsilon_{\perp}(\infty) = \frac{1}{18}\overline{\sigma}(2\beta_0 - 9\beta)$ . Примечательны немонотонность и смена знака поперечной деформации.

#### 3. Свойства коэффициента Пуассона при ползучести

Из уравнений кривых ползучести (8), (9) (с  $\overline{\sigma} > 0$ , z = 1) найдем КоП

$$\nu(t) = -\frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{11}} = \frac{1}{2} \frac{9\Pi(t) - 2\Pi_0(t)}{9\Pi(t) + \Pi_0(t)} = 0, 5 - \frac{3\Pi_0(t)}{18\Pi(t) + 2\Pi_0(t)},$$
(11)

или

$$\nu(t) = 0, 5 - \frac{3z\xi}{6+2z\xi} = -1 + \frac{9}{6+2z\xi},$$
(12)

$$\xi(t) \coloneqq 3\varepsilon_0 / \varepsilon = \theta / \varepsilon = \frac{1}{3}\overline{\sigma} \Pi_0(t) / |\overline{\sigma}/\Pi(t)| = \frac{1}{3}z \Pi_0(t) / \Pi(t)$$
(13)

– параметр вида деформированного состояния,  $z = \text{sgn } \overline{\sigma} = \pm 1$ . Существенное отличие линейного OC (1) от нелинейных OC вязкоупругости – независимость КоП от уровня напряжения и его знака. В силу линейности OC (1) изучаемые качественные свойства кривых ползучести и КоП Пуассона не зависят от масштабирования (способа обезразмеривания) времени и напряжений.

Так как  $\Pi(t) > 0$  и  $\Pi_0(t) > 0$  при t > 0, то  $\theta > 0$ ,  $\xi > 0$  и v(t) < 0,5 в случае  $\overline{\sigma} > 0$ . Из возрастания  $\Pi(t)$  следуют неравенство  $\Pi(t) > \Pi(0)$  и оценка снизу для коэффициента Пуассона  $v(t) > 0,5 - 3\Pi_0(t)(18\Pi(0) + 2\Pi_0(t))^{-1}$  (учитывающая специфику  $\Phi\Pi$ ); а из  $\Pi(t) > 0$  следует универсальная (но более грубая) оценка v(t) > -1 при всех t > 0, справедливая для любых  $\Phi\Pi$ . Для моделей с  $\Pi(0) = 0$  (нерегулярных) и  $\Pi_0(0) \neq 0$  формула (11) дает в пределе при  $t \to 0$  v(0+) = -1 для любого  $\overline{\sigma} > 0$ , а для моделей с  $\Pi_0(0) = 0$  и  $\Pi(0) \neq 0$  имеем v(0+) = 0,5.

КоП (11) может быть отрицательным, поскольку возможно  $\varepsilon_{\perp}(t) > 0$ . *Критерий отрицательности* V(t) на некотором интервале времени при растяжении имеет вид

$$\Pi_0(t) > \frac{9}{2}\Pi(t) \,. \tag{14}$$

Из (9) (и сказанного выше) следует, что кривые ползучести в продольном и поперечном направлении, вообще говоря, не подобны, т. е. КоП v(t) не постоянен. Критерий постоянства v(t) при одноосном растяжении (т. е. постоянства параметра  $\xi(t) = k$ , k > 0, в силу (12)) налагает связь на ФП ОС (1), управляющими сдвиговыми и объемными деформациями:

$$\Pi_0(t) = 3k \,\Pi(t) \,, \quad t > 0 \,. \tag{15}$$

 $k = 3(0,5-\nu)(1+\nu)^{-1} > 0$ . В частности, тождество (15) выполняется для несжимаемого материала (с  $\Pi_0(t) \equiv 0$ ), когда  $\nu(t) \equiv 0,5$  по (11), но никогда не выполняется при всех t > 0 для реономного материала с упругим изменением объема ( $\Pi_0(t) = c > 0$ ,  $\Pi(t) \neq \text{const}$ ).

Коэффициент Пуассона не обязан быть монотонной функцией. Поскольку из (12)

$$\dot{\nu}(t) = -3 \frac{\dot{\xi}(t)(6+2\xi(t)) - 2\dot{\xi}(t)\xi(t)}{(6+2\xi(t))^2} = -\frac{18\dot{\xi}(t)}{(6+2\xi(t))^2},$$
(16)

то знаки  $\dot{\nu}(t)$  и  $-\dot{\xi}(t)$  одинаковы, и потому совпадают интервалы монотонности  $\nu(t)$  и  $-\xi(t)$ .

$$\dot{\xi}(t) = \frac{1}{3}\Pi(t)^{-2} y(t), \quad y(t) := \dot{\Pi}_0(t)\Pi(t) - \Pi_0(t)\dot{\Pi}(t).$$
(17)

Так как  $\Pi_0(t)/\Pi(t) > 0$  при всех t > 0, то критерий нестрогого возрастания КоП (убывания  $\xi(t)$ ) на некотором интервале времени имеет вид  $\dot{\Pi}_0(t)/\Pi_0(t) \le \dot{\Pi}(t)/\Pi(t)$ . Необходимое условие

экстремума –  $\dot{\Pi}_0(t)/\Pi_0(t) = \dot{\Pi}(t)/\Pi(t)$  (если оно выполняется не только в точке, но и на некотором интервале времени, то получается условие постоянства КоП (15)).

**Пример 2.** Для ОС (1) с (ограниченными) ФП классической модели Кельвина (10) имеем  $\xi(0) = \frac{1}{3}(\beta_0 - \gamma_0)/(\beta - \gamma), \ \nu(0) = -1 + 9(6 + 2\xi(0))^{-1} = -1 + 27[18 + 2(\beta_0 - \gamma_0)/(\beta - \gamma)]^{-1},$ 

 $\xi(\infty) = \frac{1}{3}\beta_0 / \beta$ ,  $\nu(\infty) = -1 + 27[18 + 2\beta_0 / \beta]^{-1}$  (т. е. при  $t \to \infty \quad \xi(t)$  и  $\nu(t)$  имеют горизонтальные асимптоты, не зависящие от  $\lambda$  и  $\lambda_0$ );  $\dot{\Pi} = \gamma \lambda e^{-\lambda t}$ ,  $\dot{\Pi}_0 = \gamma_0 \lambda_0 e^{-\lambda_0 t}$  и по (17)

$$y(t) = \gamma_0 \lambda_0 e^{-\lambda_0 t} (\beta - \gamma e^{-\lambda t}) - \gamma \lambda e^{-\lambda t} (\beta_0 - \gamma_0 e^{-\lambda_0 t}) = \gamma_0 \gamma (\lambda - \lambda_0) e^{-\lambda_0 t} e^{-\lambda t} + \gamma_0 \lambda_0 \beta e^{-\lambda_0 t} - \gamma \lambda \beta_0 e^{-\lambda t}.$$

При  $\lambda \neq \lambda_0 \quad \xi(t)$  и V(t) могут иметь точки максимума и минимума. При  $\lambda = \lambda_0$  (в случае совпадения времен ретардации сдвиговых и объемных деформаций)  $y(t) = \lambda(\gamma_0\beta - \gamma\beta_0)e^{-\lambda t}$ ; поэтому y(t) > 0 при  $\gamma_0\beta > \gamma\beta_0$  и КоП убывает на всем луче t > 0, а при  $\gamma_0\beta < \gamma\beta_0$  будет y(t) < 0 и КоП возрастает на луче t > 0. Условие наличия отрицательных значений КоП (14) имеет вид  $\beta_0 - \gamma_0 e^{-\lambda t} > \frac{9}{2}(\beta - \gamma e^{-\lambda t})$ , или  $\beta_0 - \frac{9}{2}\beta > (\gamma_0 - \frac{9}{2}\gamma)e^{-\lambda t}$ .

На рис. 2, а приведены графики КоП v(t) трех моделей вида (10) с одинаковыми сдвиговыми  $\Phi\Pi$   $\Pi(t)$  ( $\lambda = 0,1$ ,  $\beta = 1$ ,  $\gamma = 0,5$  и  $\tau = 1/\lambda = 10$ ) и разными  $\Pi_0(t)$  (с разными временами объемной ретардации  $\tau_0 = 1/\lambda_0$ ): 1) с  $\lambda_0 = \lambda = 0,1$  (штрих-пунктирные кривые 1–6), 2) с  $\lambda_0 = 1 > \lambda$ (сплошные кривые 1-6), 3) с  $\lambda_0 = 0,01 < \lambda$  (штриховые кривые 1-6). Значение  $\gamma_0 = 0,9$ фиксировано, а номера кривых соответствуют шести значениям  $\beta_0$  для каждой из трех моделей:  $\beta_0 = 1; 2; 3; 4; 5; 6$  (с ростом  $\beta_0$  график v(t) смещается вниз). Функции v(t) всех трех моделей с одинаковым  $\beta_0$  имеют одинаковые начальные значения v(0) и асимптоты  $v = v(\infty)$  (они не зависят от  $\lambda$  и  $\lambda_0$ ) и могут менять знак, но в остальном ведут себя совершенно по-разному: при достаточно малом отношении  $\tau_0/\tau < 1$  v(t) быстро убывает в окрестности нуля, а затем возрастает (сплошные кривые 1-6 с  $\tau_0/\tau = 0,1$ ), при достаточно большом  $\tau_0/\tau > 1$  v(t) медленно возрастает в окрестности нуля, а затем убывает к асимптоте (штриховые кривые 1-6 с  $\tau_0/\tau = 10$ ), а при  $\tau_0 = \tau$  v(t) не имеет точек экстремума: убывает при малых  $\beta_0 < \beta_*$ ,  $\beta_* = \beta \gamma_0 / \gamma$  (штрихпунктирная кривая 1) и возрастает при  $\beta_0 > \beta_*$  (а при  $\beta_0 = \beta_* \quad \xi(t) = \frac{1}{3}\gamma_0/\gamma = \text{const}$  и v(t) = const). Таким образом, уже на примере простейшей модели с шестью параметрами и одноточечными спектрами сдвиговой и объемной релаксации и ретардации можно увидеть каким разнообразным может быть поведение КоП v(t) при ползучести, описываемое линейным ОС (1).

Пример 3. Для модели со степенными ФП (и непрерывным спектром релаксации)

$$\Pi = B + At^{u}, \ \Pi_{0} = B_{0} + A_{0}t^{w}, \ u, w \in (0;1), \ B, B_{0} \ge 0, \ A, A_{0} > 0,$$
(18)

имеем  $\xi(0) = \frac{1}{3}B_0/B$ ,  $v(0) = -1 + 27[18 + 2B_0/B]^{-1}$ , а при  $t \to \infty$  графики v(t) обладают горизонтальными асимптотами:  $\xi(\infty) = 0$ ,  $v(\infty) = 0,5$  при u > w,  $\xi(\infty) = +\infty$ ,  $v(\infty) = -1$  при u < w и  $\xi(\infty) = \frac{1}{3}A_0/A$ ,  $v(\infty) = -1 + 27[18 + 2A_0/A]^{-1}$  при u = w (в первых двух случаях асимптоты не зависят от параметров модели, и при больших временах моделируемый материал ведет себя как несжимаемый или как не меняющий форму). В силу (17)  $y(t) = AA_0(w-u)t^{u+w-1} + A_0Bwt^{w-1} - AB_0ut^{u-1}$ , и  $\dot{v}(t)$  может менять знак, если  $w \neq u$ . При w = u  $y(t) = (A_0B - AB_0)ut^{u-1}$ , и потому КоП – монотонная функция: при  $A_0B > AB_0$  y(t) > 0 и КоП убывает на всем луче t > 0, при  $A_0B < AB_0$  y(t) < 0 и КоП возрастает на луче t > 0, а при  $A_0B = AB_0$  v(t) = const. Если  $A_0 = 0$ , то  $\Pi_0(t) = B_0 = \text{const}$  (такая функция ползучести моделирует линейно упругое изменение объема), y(t) < 0,  $v(t) = 0, 5 - 3B_0[18(B + At^u) + 2B_0]^{-1}$  возрастает на всем луче t > 0 и  $v(\infty) = 0,5$  при любом  $B_0$ .

Особенности поведения поперечной деформации и коэффициента Пуассона изотропных реономных материалов при ползучести, ...



Рис. 2. Графики коэффициента Пуассона моделей семейства (10) с одинаковыми сдвиговыми ФП  $\Pi(t)$  и разными  $\lambda_0 = 0,01;0,1;1$  и  $\beta_0 = 1;2;...;6$  (а) и моделей (18) с одинаковыми  $\Pi(t)$  и разными w и  $B_0$  (б)

На рис. 2, б приведены графики КоП v(t) трех моделей семейства (18) с одинаковыми сдвиговыми ФП П(t) (с u = 0,5, A = 0,5, B = 1) и разными объемными ФП П<sub>0</sub>(t): 1) с w = u = 0,5 (штрих-пунктирные кривые 0,1,2,3,5,7), 2) с w = 0,2 < u (сплошные кривые 0,1,2,3,5,7), 3) с w = 0,8 > u (штриховые кривые 0,1,2,3,5,7). Параметр  $A_0 = 1$  фиксирован, а номера кривых соответствуют разным значениям параметра  $B_0 = 0;1;2;3;5;7$  для каждой из трех моделей (с ростом  $B_0$  график v(t) смещается вниз). При каждом  $B_0$  начальные значения v(0) одинаковы у всех трех моделей (и убывают с ростом  $B_0$ ), а горизонтальные асимптоты при  $t \rightarrow \infty$  различны (и не зависят от  $B_0$ ):  $v(\infty) = 0,5$  у всех моделей с w < u,  $v(\infty) = -1$  у всех моделей с w > u и  $v(\infty) = -1 + 27[18 + 2A_0 / A]^{-1} = 5/22$  при w = u. Асимптота v = 5/22 кривых 0-7 модели с w = u = 0,5 совпадает со штрих-пунктирной кривой (прямой) 2, поскольку при w = u и  $B_0 = 2$  будет  $A_0B = AB_0$  и v(t) = const. Примечательны перемены знака и немонотонность v(t) (у штриховой кривой 5 – даже две перемены знака). Для сравнения приведен график v(t) модели с линейно упругим изменением объема, т. е. с  $A_0 = 0$  (штриховая кривая 1' для  $B_0 = 1$ ): он монотонно возрастает и  $v(\infty) = 0,5$  при любом  $B_0$ .

Заключение. В работе изучены возможности линейного ОС вязкоупругости (1) с двумя произвольными материальными функциями (ползучести) для изотропных нестареющих реономных материалов по описанию комплекса реологических эффектов, связанных с поведением поперечной деформации и коэффициента Пуассона при одноосном нагружении. Аналитически исследованы общие выражения (11) и (13) для коэффициента Пуассона v(t) в условиях ползучести и для параметра вида деформиций) через материальные функции и время. Существенное отличие линейного ОС от нелинейных ОС вязкоупругости – независимость v(t) от уровня напряжения и от его знака. Доказано, что v(t) может изменяться в диапазоне от –1 до 0,5, а  $\zeta(t)$  – от нуля до бесконечности (при  $\overline{\sigma} > 0$ ). Найдены критерии отрицательности коэффициента Пуассона при ползучести, критерий его постоянства (т. е. подобия кривых ползучести в продольном и поперечном направлениях) и критерии его возрастания, убывания и немонотонности. Все эти эффекты и доказанные общие утверждения проиллюстрированы на конкретных примерах моделей с классическими функциями ползучести.

Таким образом, показано, что линейное ОС вязкоупругости (1) для нестареющих изотропных сред, пренебрегающее влиянием шаровой и девиаторной частей тензоров напряжений и

деформаций друг на друга и влиянием их третьих инвариантов (параметра Лоде), способно, в принципе, качественно воспроизводить основные эффекты, связанные с поведением коэффициента Пуассона (монотонность, немонотонность, знакопеременность, отрицательность, стабилизацию с течением времени), за исключением зависимости от уровня напряжения.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 17-08-01146\_а).

#### Литература

1. Хохлов, А.В. Анализ свойств кривых ползучести с произвольной начальной стадией нагружения, порождаемых линейной теорией наследственности / А.В. Хохлов // Вестник Самарского гос. техн. ун-та. Сер. физ.-мат. науки. – 2018. – Т. 22, № 1. – С. 65–95.

2. Хохлов, А.В. Двусторонние оценки для функции релаксации линейной теории наследственности через кривые релаксации при гатр-деформировании и методики её идентификации / А.В. Хохлов // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2018. – Вып. 3. – С. 81–104.

3. Хохлов, А.В. Анализ общих свойств кривых ползучести при циклических ступенчатых нагружениях, порождаемых линейной теорией наследственности / А.В. Хохлов // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. – 2017. – Vol. 21, № 2. – С. 326–361.

4. Хохлов, А.В. Кривые длительной прочности, порождаемые линейной теорией вязкоупругости в сочетании с критериями разрушения, учитывающими историю деформирования / А.В. Хохлов // Труды МАИ. – 2016. – № 91. – С. 1–32.

5. Хохлов, А.В. Асимптотика кривых ползучести, порожденных нелинейной теорией наследственности Работнова при кусочно-постоянных нагружениях, и условия затухания памяти / А.В. Хохлов // Вестник Московского ун-та. Серия 1: Математика. Механика. – 2017. – № 5. – С. 26–31.

6. Хохлов, А.В. Анализ общих свойств кривых ползучести при ступенчатом нагружении, порождаемых нелинейным соотношением Работнова для вязкоупругопластичных материалов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. – 2017. – № 3(72). – С. 93–123.

7. Хохлов, А.В. Анализ свойств кривых релаксации с начальной стадией гатрдеформирования, порождаемых нелинейной теорией наследственности Работнова / А.В. Хохлов // Механика композитных материалов. – 2018. – Т. 54, № 4. – С. 687–708.

8. Хохлов, А.В. Свойства семейства диаграмм деформирования, порождаемых нелинейным соотношением Работнова для вязкоупругопластичных материалов / А.В. Хохлов // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2018. – № 6.

9. Работнов, Ю.Н. Равновесие упругой среды с последействием / Ю.Н. Работнов // Прикладная математика и механика. – 1948. – Т. 12, № 1. – С. 53–62.

10. Работнов, Ю.Н. Ползучесть элементов конструкций / Ю.Н. Работнов. – М.: Наука, 1966. – 752 с.

11. Фрейденталь, Л. Математические теории неупругой сплошной среды / Л. Фрейденталь, Х. Гейрингер. – М.: Физматгиз, 1962. – 432 с.

12. Ильюшин, А.А. Основы математической теории термовязкоупругости / А.А. Ильюшин, Б.Е. Победря. – М.: Наука, 1970. – 280 с.

13. Кристенсен, Р. Введение в теорию вязкоупругости / Р. Кристенсен. – М.: Мир, 1974. – 338 с.

14. Работнов, Ю.Н. Элементы наследственной механики твёрдых тел / Ю.Н. Работнов. – М.: Наука, 1977. – 384 с.

15. Айнбиндер, С.Б. Свойства полимеров в различных напряженных состояниях / С.Б. Айнбиндер, Э.Л. Тюнина, К.И. Цируле. – М.: Химия, 1981. – 232 с.

16. Гольдман, А.Я. Объемная деформация пластмасс / А.Я. Гольдман. – Л.: Машиностроение, 1984. – 232 с.

17. Lakes, R.S. Viscoelastic Materials / R.S. Lakes. - Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2009. - 462 p.

18. Tschoegl, N.W. Time Dependence in Material Properties: An Overview / N.W. Tschoegl // Mechanics of Time-Dependent Materials. – 1997. – Vol. 1, Issue 1. – P. 3–31.
19. Hilton, H.H. Implications and constraints of time-independent Poisson's Ratios in linear isotropic and anisotropic viscoelasticity / H.H. Hilton // Journal of elasticity and the physical science of solids. – 2001. – Vol. 63. – Issue 3. – P. 221–251.

20. Tschoegl, N.W. Poisson's ratio in linear viscoelasticity – a critical review / N.W. Tschoegl, W.G. Knauss, I. Emri // Mechanics of Time-Dependent Materials. – 2002. – Vol. 6. – Issue 1. – pp. 3–51.

21. Ломакин, Е.В. Механика сред с зависящими от вида напряженного состояния свойствами / Е.В. Ломакин // Физическая мезомеханика. – 2007. – Т. 10, № 5. – С. 41–52.

22. O'Brien, D.J. Cure-dependent Viscoelastic Poisson's Ratio of Epoxy / D.J. O'Brien, N.R. Sottos, S.R. White // Experimental mechanics. – 2007. – Vol. 47. – Issue 2. – pp. 237–249.

23. Time-dependent Poisson's ratio of polypropylene compounds for various strain histories / D. Tscharnuter, M. Jerabek, Z. Major, R.W. Lang // Mechanics of Time-Dependent Materials. – 2011. – Vol. 15. – Issue 1. – pp. 15–28.

24. Жуков, А.М. О коэффициенте Пуассона в пластической области / А.М. Жуков // Известия АН СССР. Отд. техн. наук. – 1954. – № 12. – С. 86–91.

25. Брехова, В.Д. Исследование коэффициента Пуассона при сжатии некоторых кристаллических полимеров постоянной нагрузкой / В.Д. Брехова // Механика полимеров. – 1965. – Т. 1, № 4. – С. 43–46.

26. Дзене, И.Я. Коэффициент Пуассона при одномерной ползучести полиэтилена / И.Я. Дзене, А.В. Путанс // Механика полимеров. – 1967. – Т. 3, № 5. – С. 947–949.

27. Калинников, А.Е. О соотношении поперечной и продольной деформаций при одноосной ползучести разносопротивляющихся материалов / А.Е. Калинников, А.В. Вахрушев // Механика композитных материалов. – 1985. – № 2. – С. 351–354.

28. Продольная и объемная сжимаемость натриево-известкового стекла при давлениях до 10 Gpa / А.С. Савиных, Г.В. Гаркушин, С.В. Разоренов, Г.И. Канель // Журнал технической физики. – 2007. – Том 77. – Вып. 3. – С. 38.–42.

29. Кожевникова, М.Е. Характер изменения границы зоны пластичности и коэффициента Пуассона в зависимости от пластического разрыхления / М.Е. Кожевникова // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т. 15, № 6. – С. 59–66.

30. Ломакин, Е.В. Нелинейная деформация материалов, сопротивление которых зависит от вида напряженного состояния / Е.В. Ломакин // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 1980. – № 4. – С. 92– 99.

31. Щербак, В.В. Объемные изменения дисперсно наполненных композитов при испытании в условиях ползучести / В.В. Щербак, А.Я. Гольдман // Механика композитных материалов. – 1982. – № 3. – С. 549–552.

32. Ozupek, S. Constitutive Equations for Solid Propellants / S. Ozupek, E.B. Becker // Journal of Engineering Materials and Technology. – 1997. – Vol. 119, no. 2. – P. 125–132.

33. Быков, Д.Л. Определяющие соотношения деформирования и разрушения наполненных полимерных материалов в процессах преобладающего осевого растяжения в различных баротермических условиях / Д.Л. Быков, В.А. Пелешко // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2008. – № 6. – С. 40–65.

34. Shekhar, H. Longitudinal Strain Dependent Variation of Poissons Ratio for HTPB Based Solid Rocket Propellants in Uni-axial Tensile Testing / H. Shekhar, A.D. Sahasrabudhe // Propellants, Explosives, Pyrotechnics. – 2011. – Vol. 36, no. 6. – P. 558–563.

35. Cui, H.R. Study on viscoelastic Poisson's ratio of solid propellants using digital image correlation method / H.R. Cui, G.J. Tang, Z.B. Shen // Propellants Explosives Pyrotechnics. – 2016. – Vol. 41,  $N_{2}$  5. – P. 835–843.

36. Дзене, И.Я. Особенности процесса деформирования при ползучести и повторной ползучести полимеров в условиях одноосного растяжения. Часть 1 / И.Я. Дзене, А.Ф. Крегерс, У.К. Вилкс // Механика полимеров. – 1974. – № 3. – С. 399–405.

37. Lakes, R. Foam structure with a negative Poisson's ratio / R. Lakes // Science. - 1987. - Vol. 235. - Issue 4792. - pp. 1038-1040.

38. Friis, E.A. Negative Poisson's ratio polymeric and metallic materials / E.A. Friis, R.S. Lakes, J.B. Park // Journal of Materials Science. – 1988. – Vol. 23. – Issue 12. – pp. 4406–4414.

## Механика

39. Берлин, Ал.Ал. Структура изотропных материалов с отрицательным коэффициентом Пуассона / Ал.Ал. Берлин, Л. Ротенбург, Р. Басэрт // Высокомолекулярные соединения Б. – 1991. – Т. 33, № 8. – С. 619–621.

40. Берлин, Ал.Ал. Особенности деформации неупорядоченных полимерных и неполимерных тел / Ал.Ал. Берлин, Л. Ротенбург, Р. Басэрт // Высокомолекулярные соединения А. – 1992. – Т. 34, № 7. – С. 6–32.

41. Milton, G.W. Composite materials with Poisson's ratios close to -1 / G.W. Milton // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. -1992. - Vol. 40. - Issue 5. - P. 1105–1137.

42. Lakes, R.S. Indentability of Conventional and Negative Poisson's Ratio Foams / R.S. Lakes, K. Elms // Journal of Composite Materials. – 1993. – Vol. 27. – Issue 12. – P. 1193–1202.

43. Caddock, B.D. Negative Poisson ratios and strain-dependent mechanical properties in arterial prostheses / B.D. Caddock, K.E. Evans // Biomaterials. – 1995. – Vol. 16. – Issue 14. – P. 1109–1115.

44. Chan, N. Indentation resilience of conventional and auxetic foams / N. Chan, K.E. Evans // Journal of Cellular Plastics. – 1998. – Vol. 34. – Issue 3. – P. 231–260.

45. Alderson, K.L. The strain dependent indentation resilience of auxetic microporous polyethylene / K.L. Alderson, A. Fitzgerald, K.E. Evans // Journal of Materials Science. – 2000. – Vol. 35. – Issue 16. – P. 4039–4047.

46. Материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона (обзор) / Д.А. Конёк, К.В. Войцеховски, Ю.М. Плескачевский, С.В. Шилько // Механика композитных материалов и конструкций. – 2004. – Т. 10, № 1. – С. 35–69.

47. Poisson's ratio and modern materials / A.L. Greer, R.S. Lakes, T. Rouxel, G.N. Greaves // Nature Materials. – 2011. – Vol. 10, no. 11. – P. 823–837.

48. Fischer-Cripps A.C. Nanoindentation / A.C. Fischer-Cripps. – Springer-Verlag, New York, 2002. – 197 p.

49. Oliver, W.C. Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: advances in understanding and refinements to methodology / W.C. Oliver, G.M. Pharr // Journal of Materials Research. -2004. -Vol. 19. -Issue 1. -P. 3-20.

50. Oyen, M. Analytical techniques for indentation of viscoelastic materials / M. Oyen // Philosophical Magazine. – 2006. – Vol. 86. – Issue 33-35. – P. 5625–5641.

51. Головин, Ю.И. Наноиндентирование и его возможности / Ю.И. Головин. – Москва, Машиностроение, 2009. – 311 с.

Поступила в редакцию 30 августа 2018 г.

Bulletin of the South Ural State University Series "Mathematics. Mechanics. Physics" 2018, vol. 10, no. 4, pp. 65–77

DOI: 10.14529/mmph180408

### BEHAVIOR TYPES AND FEATURES OF LATERAL STRAIN AND POISSON'S RATIO OF ISOTROPIC RHEONOMOUS MATERIALS UNDER CREEP CONDITIONS DESCRIBED BY THE LINEAR THEORY OF VISCOELASTICITY

#### A.V. Khokhlov

Lomonosov Moscow State University, Institute of mechanics, Moscow, Russian Federation *E-mail:* andrey-khokhlov@ya.ru

The Boltzmann–Volterra linear constitutive equation for isotropic non-aging viscoelastic materials (with an arbitrary shear and bulk creep compliances) is studied analytically in order to find out its capabilities to provide an adequate qualitative description of rheological phenomena related to creep under uni-axial loading and types of evolution of the Poisson's ratio (lateral contraction ratio in creep) and to outline the control scopes of the material functions. The constitutive equation doesn't involve the third invariants of stress and strain tensors (or the Lode–Nadai coefficients) and implies that their hydrostatic and deviatoric parts don't depend on each other. It is controlled by two material functions of a positive real argument (that is shear creep compliance and bulk creep compliance); they are implied to be positive, differentiable, increasing and convex functions. General properties of the creep curves for volumet-

#### Хохлов А.В.

#### Особенности поведения поперечной деформации и коэффициента Пуассона изотропных реономных материалов при ползучести, ...

ric, longitudinal and lateral strain generated by the model under uni-axial loading are studied. Conditions for creep curves monotonicity and for existence of extrema and sign changes of strains and the Poisson's ratio evolution in time are studied. The influence of qualitative restrictions imposed on its material functions is analyzed. The expressions for Poisson's ratio through the strain triaxiality ratio and in terms of creep compliances are derived. Assuming creep compliances are arbitrary (permissible), general accurate two-sided bounds for the Poisson's ratio range are obtained; it is proved that the lateral contraction ratio in creep is greater than –1 and less than 0,5 at any moment of time. Additional restrictions on material functions and stress levels are derived to provide negative values of Poisson's ratio. Criteria for the Poisson's ratio increase or decrease and for its non-dependence on time are found. In particular, it is proved that the linear relation is able to simulate non-monotonic behavior and sign changes of lateral strain and Poisson's ratio under constant axial load.

Keywords: viscoelasticity; compressibility; axial creep; volumetric creep; non-monotonic lateral strain; negative Poisson's ratio.

#### References

1. Khokhlov A.V. Analysis of properties of creep curves generated by the linear viscoelasticity theory under arbitrary loading programs at initial stage. *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki* (J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.), 2018, Vol. 22, no. 1, pp. 65–95 (in Russ.). DOI: 10.14498/vsgtu1543

2. Khokhlov A.V. Dvustoronnie otsenki dlya funktsii relaksatsii lineynoy teorii nasledstvennosti cherez krivye relaksatsii pri ramp-deformirovanii i metodiki eye identifikatsii (Two-sided bounds for relaxation modulus in the linear viscoelasticity via relaxation curves at ramp strain histories and identification techniques). *Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Mekhanika tverdogo tela*, 2018, no. 3, pp. 81–104. (in Russ.). DOI: 10.7868/S0572329918030108

3. Khokhlov A.V. Analiz obshchikh svoystv krivykh polzuchesti pri tsiklicheskikh stupenchatykh nagruzheniyakh, porozhdaemykh lineynoy teoriey nasledstvennosti (Analysis of creep curves produced by the linear viscoelasticity theory under cyclic stepwise loadings). *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki (J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.)*, 2017, Vol. 21, no. 2, pp. 326–361. (in Russ.). DOI: 10.14498/vsgtu1533

4. Khokhlov A.V. Krivye dlitel'noy prochnosti, porozhdaemye lineynoy teoriey vyazkouprugosti v sochetanii s kriteriyami razrusheniya, uchityvayushchimi istoriyu deformirovaniya (Long-term strength curves produced by the linear viscoelasticity theory combined with failure criteria accounting for strain history). *Trudy MAI*, 2016, no. 91, pp. 1–32. (in Russ.).

5. Khokhlov A.V. Asymptotic behavior of creep curves in the Rabotnov nonlinear heredity theory under piecewise constant loadings and memory decay conditions. *Moscow University Mechanics Bulletin*, 2017, Vol. 72, no. 5, pp. 103–107. DOI: 10.3103/S0027133017050016

6. Khokhlov A.V. Analysis of Creep Curves General Properties under Step Loading Generated by the Rabotnov Nonlinear Relation for Viscoelastic Plastic Materials. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences*, 2017, no. 3(72), pp. 93–123. (in Russ.). DOI: 10.18698/1812-3368-2017-3-93-123

7. Khokhlov A.V. Analysis of properties of ramp stress relaxation curves produced by the Rabotnov non-linear hereditary theory. *Mechanics of Composite Materials*, 2018, Vol. 54, Issue 4, pp. 473–486. DOI: 10.1007/s11029-018-9757-1

8 Khokhlov A.V. Svoystva semeystva diagramm deformirovaniya, porozhdaemykh nelineynym sootnosheniem Rabotnova dlya vyazkouprugoplastichnykh materialov (Properties of stress-strain curves family generated by the Rabotnov non-linear relation for viscoelastic materials). *Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Mekhanika tverdogo tela*, 2018, no. 6. (in Russ.)

9. Rabotnov Yu.N. Ravnovesie uprugoy sredy s posledeystviem (Equilibrium of elastic medium with heredity). *Prikladnaya matematika i mekhanika*, 1948, Vol. 12, no. 1, pp. 53–62. (in Russ.).

10. Rabotnov Yu.N. *Polzuchest' elementov konstruktsiy* (Creep problems in structural members), Moscow, Nauka Publ., 1966, 752 p. (in Russ.).

11. Freydental' L., Geyringer X. *Matematicheskie teorii neuprugoy sploshnoy sredy* (The mathematical theories of the inelastic continuum), Moscow, Fizmatgiz Publ., 1962, 432 p. (in Russ.). [Freudental A.M., Geiringer H. The mathematical theories of the inelastic continuum. Berlin a. o., Springer Verl., 1958. (Handbuch der Physik. Hrsg.von S. Flügge. Bd. VI)]

## Механика

12. Il'yushin A.A., Pobedrya B.E. *Osnovy matematicheskoy teorii termovyazkouprugosti* (Fundamentals of the Mathematical Theory of Thermo-viscoelasticity), Moscow, Nauka Publ., 1970, 280 p. (in Russ.).

13. Christensen R.M. Theory of viscoelasticity. N.-Y., L., Acad. Press, 1971, 245 p.

14. Rabotnov Yu.N. Elements of hereditary solid mechanics. Moscow, Mir Publishers, 1980, 387 p.

15. Aynbinder S.B., Tyunina E.L., Tsirule K.I. Svoystva polimerov v razlichnykh napryazhennykh sostoyaniyakh (Properties of Polymers under various stress states), Moscow, Khimiya Publ., 1981, 232 p. (in Russ.).

16. Gol'dman A.Ya. *Ob"emnaya deformatsiya plastmass* (Volumetric deformation of plastics). Leningrad, Mashinostroenie Publ., 1984, 232 p. (in Russ.).

17. Lakes R.S. Viscoelastic Materials. Cambridge, Cambridge Univ. Press, 2009. 462 p.

18. Tschoegl N.W. Time Dependence in Material Properties: An Overview. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 1997, Vol. 1, Issue1, pp. 3–31. DOI: 10.1023/A:1009748023394

19. Hilton N.N. Implications and constraints of time-independent Poisson's Ratios in linear isotropic and anisotropic viscoelasticity. *Journal of elasticity and the physical science of solids*, 2001, Vol. 63, Issue 3, pp. 221–251. DOI: 10.1023/A:1014457613863

20. Tschoegl N.W., Knauss W.G., Emri I. Poisson's ratio in linear viscoelasticity – a critical review. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 2002, Vol. 6, Issue 1, pp. 3–51. DOI: 10.1023/A:1014411503170

21. Lomakin E.V. Mechanics of media with stress-state dependent properties. *Physical Mesome-chanics*, 2007, Vol. 10, Issues 5–6, pp. 255–264. DOI: 10.1016/j.physme.2007.11.004

22. O'Brien D.J., Sottos N.R., White S.R. Cure-dependent Viscoelastic Poisson's Ratio of Epoxy. *Experimental mechanics*, 2007, Vol. 47, Issue 2, pp. 237–249. DOI: 10.1007/s11340-006-9013-9

23. Tscharnuter D., Jerabek M., Major-Z., Lang R.W. Time-dependent Poisson's ratio of polypropylene compounds for various strain histories. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 2011, Vol. 15, no. 1, pp. 15–28. DOI 10.1007/s11043-010-9121-x

24. Zhukov A.M. O koeffitsiente Puassona v plasticheskoy oblasti (On Poisson's Ratio in plastic domain). *Izvestiya AN SSSR. Otd. tekhn. Nauk*, 1954, no. 12, pp. 86–91. (in Russ.).

25. Brekhova V.D. Investigation of the Poisson's ratio of certain crystalline polymers under a constant compressive load. *Polimer mechanics*, 1965, Vol. 1, Issue 4, pp. 23–24. DOI: 10.1007/BF00858886

26. Dzene I.Ya., Putans A.V. Poisson's ratio of polyethylene in one-dimensional creep. *Polimer me-chanics*, 1967, Vol. 3, Issue 5, pp. 626–627. DOI: 10.1007/BF00859258

27. Kalinnikov A.E., Vakhrushev A.V. O sootnoshenii poperechnoy i prodol'noy deformatsiy pri odnoosnoy polzuchesti raznosoprotivlyayushchikhsya materialov (Relation between lateral and longitudinal strains in materials with tension-compression asymmetry under uniaxil creep). *Mekhanika kompozitnykh materialov*, 1985, no. 2, pp. 351–354. (in Russ.).

28. Savinykh A.S., Garkushin G.V., Razorenov S.V., Kanel G.I. Longitudinal and bulk compressibility of soda-lime glass at pressures to 10 GPa. *Technical Physics*, 2007, Vol. 52, Issue 3, pp. 328–332. DOI: 10.1134/S1063784207030073

29. Kozhevnikova M.E. Plastic Zone Boundary and Poisson's Ratio Depending on Plastic Loosening. *Physical Mesomechanics*, 2013, Vol. 16, no. 2, pp. 162–169. DOI: 10.1134/S1029959913020070

30. Lomakin E.V. Nelineynaya deformatsiya materialov, soprotivlenie kotorykh zavisit ot vida napryazhennogo sostoyaniya (Non-linear deformation of materials with stress-state dependent properties). *Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Mekhanika tverdogo tela*, 1980, no. 4, pp. 92–99. (in Russ.).

31. Shcherbak V.V., Gol'dman A.Ya. Ob"emnye izmeneniya dispersno napolnennykh kompozitov pri ispytanii v usloviyakh polzuchesti (Volume changes in dispersely filled composites under creep tests). *Mekhanika kompozitnykh materialov*, 1982, no. 3, pp. 549–552. (in Russ.).

32. Ozupek S., Becker E.B. Constitutive Equations for Solid Propellants. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 1997, Vol. 119, no. 2, pp. 125–132. DOI: 10.1115/1.2805983

33. Bykov D.L., Peleshko V.A. Constitutive Relations for Strain and Failure of Filled Polymer Materials in Dominant Axial Tension Processes under Various Barothermal Conditions. *Mechanics of Solids*, 2008, Vol. 43, Issue 6, pp. 870–891. DOI: 10.3103/S0025654408060058

34. Shekhar H., Sahasrabudhe A.D. Longitudinal Strain Dependent Variation of Poissons Ratio for HTPB Based Solid Rocket Propellants in Uni-axial Tensile Testing. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2011, Vol. 36, no. 6, pp. 558–563. DOI: 10.1002/prep.200900079

35. Cui H.R., Tang G.J., Shen Z.B. Study on viscoelastic Poisson's ratio of solid propellants using digital image correlation method. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2016, Vol. 41, no. 5, pp. 835–843. DOI: 10.1002/prep.201500313

36. Dzene I.Ya., Kregers A.F., Vilks U.K. Characteristic features of the deformation process on creep and secondary creep of polymers under conditions of uni-axial tension. Part I. *Polimer mechanics*, 1974, Vol. 10, no. 3, pp. 337–342. DOI: 10.1007/BF00865585

37. Lakes R. Foam structure with a negative Poisson's ratio. Foam Structures with a Negative Poisson's Ratio. *Science*, 1987, Vol. 235, Issue 4792, pp. 1038–1040. DOI: 10.1126/science.235.4792.1038

38. Friis E.A., Lakes R.S., Park. J.B. Negative Poisson's ratio polymeric and metallic materials. *Journal of Materials Science*, 1988, Vol. 23, Issue 12, pp. 4406–4414. DOI: 10.1007/BF00551939

39. Berlin Al.Al., Rotenburg L., Basert R. Struktura izotropnykh materialov s otritsatel'nym koeffitsientom Puassona (Structure of isotropic materials with a negative Poisson's ratio). *Vysokomolekulyarnye soedineniya B*, 1991, Vol. 33, no. 8, pp. 619–621. (in Russ.).

40. Berlin Al.Al., Rotenburg L., Basert R. Osobennosti deformatsii neuporyadochennykh polimernykh i nepolimernykh tel (Specific features of deformation of non-ordered polymeric and non-polymeric solids). *Vysokomolekulyarnye soedineniya A*, 1992, Vol. 34, no. 7, pp. 6–32. (in Russ.).

41. Milton G.W. Composite materials with Poisson's ratios close to -1. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1992, Vol. 40, Issue 5, pp. 1105–1137. DOI: 10.1016/0022-5096(92)90063-8

42. Lakes R.S., Elms K. Indentability of Conventional and Negative Poisson's Ratio Foams. *Journal of Composite Materials*, 1993, Vol. 27, Issue 12, pp. 1193–1202. DOI: 10.1177/002199839302701203

43. Caddock B.D., Evans K.E. Negative Poisson ratios and strain-dependent mechanical properties in arterial prostheses. *Biomaterials*, 1995, Vol. 16, Issue 14, pp. 1109–1115. DOI: 10.1016/0142-9612(95)98908-W

44. Chan N., Evans K.E. Indentation resilience of conventional and auxetic foams. *Journal of Cellular Plastics*, 1998, Vol. 34, Issue 3, pp. 231–260. DOI: 10.1177/0021955X9803400304

45. Alderson K.L., Fitzgerald A., Evans K.E. The strain dependent indentation resilience of auxetic microporous polyethylene. *Journal of Materials Science*, 2000, Vol. 35, Issue 16, pp. 4039–4047. DOI: 10.1023/A:1004830103411

46. Konyek D.A., Voytsekhovski K.V., Pleskachevskiy Yu.M., Shil'ko S.V. Materialy s otritsatel'nym koeffitsientom Puassona (obzor) (Materials with negative Poisson's ratio. A review). *Mekhanika kompozitnykh materialov i konstruktsiy*, 2004, Vol. 10, no. 1, pp. 35–69. (in Russ.).

47. Greer A.L., Lakes R.S., Rouxel T., Greaves G.N. Poisson's ratio and modern materials. *Nature Materials*, 2011, Vol. 10, no. 11, pp. 823–837. DOI: 10.1038/nmat3134

48. Fischer-Cripps A.C. Nanoindentation. Springer-Verlag, New York, 2002, 197 p. DOI: 10.1007/978-0-387-22462-6

49. Oliver W.C., Pharr G.M. Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: advances in understanding and refinements to methodology. *Journal of Materials Research*, 2004, Vol. 19, Issue 1, pp. 3–20. DOI: 10.1557/jmr.2004.19.1.3

50. Oyen M. Analytical techniques for indentation of viscoelastic materials. *Philosophical Magazine*, 2006, Vol. 86, Issue 33-35, pp. 5625–5641. DOI: 10.1080/14786430600740666

51. Golovin Yu.I. *Nanoindentirovanie i ego vozmozhnosti* (Nanoindentation and its capabilities), Moscow, Mashinostroenie Publ., 2009, 311 p. (in Russ.).

Received August 30, 2018

# Физика

УДК 669.111.31

## АВ INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КРЕМНИЯ НА ОБРАЗОВАНИЕ КАРБИДА Fe<sub>3</sub>C В ОЦК-ЖЕЛЕЗЕ

#### А.В. Верховых, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация E-mail: avverkhovykh@susu.ru

> Представлены результаты первопринципного моделирования влияния кремния на энергию формирования цементита и парциальную энтальпию. Моделирование проводилось в рамках теории функционала плотности (DFT) полнопотенциальным методом линеаризованных присоединенных плоских волн (FP LAPW) с учетом обобщенного градиентного приближения (GGA'96) в программном пакете WIEN2k. Были изучены различные концентрации примеси кремния в цементите, а именно, 1,6, 3,2 и 6 ат. % как в позиции замещения атома железа (S и G-позиции), так и атома углерода (С-позиция). Была выполнена объемная оптимизация структур. Найдены равновесные параметры решетки как цементита без примеси, так и в присутствии кремния, которые отлично согласуются с экспериментальными и теоретическими данными. Энергия формирования для концентрации 3,2 ат. % в C-позиции оказалась -0,03 эВ, что может говорить о стабилизации цементита. Но при этом парциальная энтальпия для всех положений кремния положительна, и значит, кремний остается в твердом растворе ОЦК-Fe, что находится в хорошем согласии с результатами других теоретических и экспериментальных работ. Было получено, что чем больше концентрация кремния, тем ниже средний магнитный момент на атомах железа.

> Ключевые слова: первопринципное моделирование; цементит; кремний; энергия формирования; парциальная энтальпия.

#### Введение

Промышленные материалы, такие как стали и сплавы на основе железа, всегда содержат примеси внедрения (углерод, азот, кислород, водород) и замещения (кремний, фосфор, сера), которые либо преднамеренно добавляют в сплав, либо данные примеси попадают в материал при изготовлении. Даже небольшая концентрация этих примесей может существенно повлиять на свойства материала [1–4]. Углерод является одной из наиболее важных примесей, так как увеличивает долговечность сталей и повышает порог хладноломкости. Примесь кремния всегда присутствует в сплаве, поскольку его добавляют специально во время плавления для удаления оксида железа и увеличения срока службы и предела текучести стали.

Свойства железоуглеродистых сплавов во многом определяются образованием карбида железа, цементита  $Fe_3C$ , который обладает высокой прочностью и служит основной упрочняющей фазой в сталях, но в то же время делает сталь более хрупкой. Хорошо известно, что стабильность данного карбида является очень чувствительной к примесям, например, экспериментально показано, что V, Cr, Mn и Mo стабилизируют цементит [5]. Что же касается примеси кремния, то его влияние до сих пор не установлено. Поскольку растворимость Si в цементите низкая, а влияние кремния на растворимость углерода в феррите (ОЦК-железе), и, следовательно, на стабильность цементита, имеет противоречивые экспериментальные данные [6–9].

Согласно данным фазовой диаграммы [10], для того чтобы структура цементита оставалась стабильной, необходимо, чтобы примесь кремния не превышала 4 ат. %. Ранее уже были проведены исследования влияния примеси кремния на образование цементита, но в работах была использована система, в которой концентрация примеси кремния составляла либо 6 ат. % [11–13], либо 0,8 ат. % [14, 15]. Поэтому представляет интерес исследование влияния различных

концентраций примесей кремния на образования Fe<sub>3</sub>C (1,6; 3,2 и 6 ат. %) как в позиции замещения атома железа, так и атома углерода.

#### Методы

Все расчеты проводились в программном пакете WIEN2k [16] полнопотенциальным методом линеаризованных присоединенных плоских волн с учетом обобщенного градиентного приближения, что обеспечивает высокую точность результатов моделирования в рамках теории функционала плотности. Для расчетов использовался мощный вычислительный комплекс Торнадо.

Цементит Fe<sub>3</sub>C имеет орторомбическую решетку, принадлежащую к пространственной группе *Рпта*. Элементарная ячейка с параметрами a = 4,524; b = 5,089; c = 6,744 Å [17] содержит 12 атомов железа и 4 атома углерода. Атомы железа в решетке цементита занимают две кристаллографически неэквивалентные позиции – G (general) и S (special). Суперячейки состояли из 16, 32 и 64 узлов орторомбической решетки  $(1\times1\times1)$ ,  $(1\times1\times2)$  и  $(2\times1\times2)$ , заполненных 12, 24 и 48 атомами железа и 4, 8 и 16 атомами углерода соответственно. Один из атомов Fe (в позиции G или S) или из атомов C (в позиции C) был заменен 1 атомом примеси замещения – Si. При интегрировании в обратном пространстве и вычислении электронной плотности использовалась схема Монхорста–Пака с сеткой  $8 \times 8 \times 8$ ,  $6 \times 6 \times 6$  и  $4 \times 4 \times 4$  *k*-точек зоны Бриллюэна, соответственно. Расчеты проводились при значениях параметров моделирования: параметр сходимости  $K_{\rm max}$  = 5 а.е.<sup>-1</sup>, радиусы МТ-сфер  $R_{mt}$ (Fe) = 2,00 а.е.,  $R_{mt}$ (Si) = 2,00 а.е. (в позиции замещения *G* и *S*) и 1,70 а.е. (в позиции замещения С),  $R_{\rm mt}$ (С) = 1,45 а.е.,  $E_{\rm cut}$ = -7,0 Рб (340 эВ). Для кремния в позиции замещения углерода, ввиду малости поры, радиус МТ-сферы был уменьшен до 1,70 а.е. Для ферромагнитного α-железа был определен равновесный параметр решетки 2,842 Å, что хорошо согласуется с экспериментальным значением 2,867 Å [18]. Критерием сходимости для всех расчетов было воспроизведение полной энергии и заряда с точностью не менее  $10^{-4}$  Рб и  $10^{-3}e^{-1}$ соответственно, а силы на каждом из атомов не превышали значения 1 мРб/а.e (0,025 эВ/Å). Все это обеспечивает погрешность результатов расчетов не более 0,01 эВ.

Энергия формирования,  $E_f$ , для цементита была оценена с помощью формулы:

$$E_f = E(\operatorname{Fe}_k \operatorname{C}_n) - kE(\operatorname{Fe}) - nE(\operatorname{C})$$

где  $Fe_k C_n$  – полная энергия кристалла цементита (k – количество атомов Fe, n – количество атомов C); E(Fe) – энергия 1 атома Fe в ОЦК структуре; E(C) – энергия 1 атома углерода в структуре графита.

Энергия формирования цементита в присутствии примеси кремния была вычислена как

$$E_f^{Si} = E(\operatorname{Fe}_{k-m}\operatorname{Si}_m \operatorname{C}_n) - (k-m)E(\operatorname{Fe}) - mE(\operatorname{Si}) - nE(\operatorname{C})$$

где  $E(\text{Fe}_{k-m}\text{Si}_m\text{C}_n)$  – полная энергия кристалла цементита с примесью кремния (k – количество атомов Fe, m – количество атомов Si, n – количество атомов C; E(Si) – энергия 1 атома кремния в структуре алмаза. Аналогичное уравнение применяется для случая замены атома углерода кремнием.

При этом изменение энергии формирования цементита при добавлении примеси кремния определялось как

$$\Delta E_f = E_f^{Si} - E_f \, .$$

Положительная энергия образования свидетельствует о невозможности существования стабильной фазы при нормальных условиях, то есть соединение нестабильно по отношению к разделению на отдельные фазы, и возможны принципиальные трудности его синтеза. Близкое к нулю положительное значение может означать, что данная фаза является метастабильной, но выбором условий синтеза (температура, быстрая закалка, напыление и т. д.) можно реализовать такое состояние.

В стали легирующие элементы при достаточно низких концентрациях обычно не находятся в своих исходных состояниях, а растворяются либо в ОЦК-Fe, либо в цементите. Следовательно, целесообразно будет определить такую величину, как парциальная энтальпия [14]

$$E_p^{\text{Fe}} = E(\text{Fe}_q) + E(\text{Fe}_{k-1}\text{SiC}_n) - E(\text{Fe}_{q-1}\text{Si}) - E(\text{Fe}_k\text{C}_n),$$

#### Физика

где  $E(\text{Fe}_q)$  и  $E(\text{Fe}_{q-1}\text{Si})$  – энергии ОЦК структуры железа из 54 атомов и в присутствии примеси кремния, соответственно.

$$E_p^{\mathsf{C}} = \frac{q-f}{q} E(\operatorname{Fe}_q) + E(\operatorname{Fe}_{k-1}\operatorname{SiC}_n) - E(\operatorname{Fe}_{q-1}\operatorname{Si}) - \frac{p-1}{p} E(\operatorname{Fe}_k \operatorname{C}_n),$$

где коэффициенты q = 54, f = 4 (количество атомов в формульной единице), p = N/f (N -количество атомов в системе).

Стабилизация влечет за собой перенос Si из твердого раствора Si в OUK-Fe в цементитную фазу, в то время как дестабилизация подразумевает, что легирующий элемент остается в твердом растворе OUK-Fe. Отсюда следует, что (положительное) отрицательное значение  $E_p$  указывает на то, что легирующий элемент (де)стабилизирует структуру и переходит в (OUK-Fe) цементитную фазу.

#### Результаты и обсуждение

#### Объемная оптимизация систем

Начальные параметры решетки чистого цементита совпадали с экспериментальными данными (объем элементарной ячейки 155,32 Å<sup>3</sup>) [17]. В первую очередь были зафиксированы отношения a/b, a/c, b/c. При сохранении данных величин изменялся полный объем системы от -2 % до 2 % (рис. 1, a). Оптимизация по объему проводилась путем проведения серии расчетов, позволяющих выявить зависимость энергии системы от ее объема. Аппроксимация полученных данных проводилась с помощью уравнения состояния Мурнагана. Для того чтобы не писать громоздкие значения энергии введена относительная энергия, равная разнице между энергией системы и 419588,492 эВ.



Рис.1. Объемная оптимизация параметров решетки Fe<sub>3</sub>C. Зависимость относительной энергии системы от объема (а); от значения *a* (б); от значения параметра *b* (в); от значения параметра *c* (г)

Согласно уравнению Мурнагана наименьшей энергии отвечает объем системы, соответствующий 153,925 Å<sup>3</sup>:  $a_1 = 4,512$ ;  $b_1 = 5,074$ ;  $c_1 = 6,723$  Å. После этого фиксируются параметры *b* и *c*, а варьируется параметр *a* от -2 % до 2 % (рис. 1, *б*). Наименьшей энергии отвечает объем системы имеющий значение 153,85 Å<sup>3</sup>:  $a_2 = 4,510$  (-0,05 % от  $a_1$ );  $b_1 = 5,074$ ;  $c_1 = 6,723$  Å. Далее фиксируются параметры *a* и *c*, а меняется параметр *b* от -2 % до 2 % (рис. 1, *в*). В соответствии с уравнением Мурнагана, наименьшей энергии отвечает объем системы,

#### Верховых А.В., Мирзоев А.А., Мирзаев Д.А.

## Аb initio моделирование влияния кремния на образование карбида Fe<sub>3</sub>C в ОЦК-железе

равный 153,508 Å<sup>3</sup>:  $a_2 = 4,510$ ;  $b_2 = 5,063$  (-0,22 % от  $b_1$ );  $c_1 = 6,723$  Å. На завершающем этапе параметры a и b принимают фиксированное значение, а параметр c варьируется в диапазоне значений от -2 % до 2 % (рис. 1, c). Таким образом, было получено, что минимальной энергии системы соответствуют следующие параметры решетки (154,045 Å<sup>3</sup>):  $a_2 = 4,510$ ;  $b_2 = 5,063$ ;  $c_2 = 6,747$  Å (+0,36 % от  $c_1$ ). В табл. 1 представлено сравнение наших результатов с другими данными как теоретическими, так и экспериментальными.

Таблица 1

Параметр	Данная работа	Вычисления [11]	Вычисления [14]	Эксперимент [17]
а	4,510 Å	4,462 Å	4,477 Å	4,525 Å
b	5,063 Å	5,128 Å	5,032 Å	5,089 Å
С	6,747 Å	6,651 Å	6,708 Å	6,744 Å
Объем эл. ячейки	154,04 Å <sup>3</sup>	152,20 Å <sup>3</sup>	151,12 Å <sup>3</sup>	155,32 Å <sup>3</sup>

Параметры решетки цементита. Сравнение полученных результатов с данными других авторов

На одну элементарную ячейку цементита приходится объем, равный 154,04 Å<sup>3</sup>, что на 0,8 % меньше экспериментального значения. Исходя из зависящих от температуры экспериментальных констант решетки [19], экстраполяция до нулевой температуры дает объем решетки 154,4 Å<sup>3</sup>, что примерно на 0,23 % больше расчетного. Что указывает на хорошее согласие наших результатов с экспериментальными данными. Аналогичным образом была выполнена объемная оптимизация систем цементит-кремний, результаты представлены в табл. 2.

Таблица 2

Результаты объемной оптимизации структур цементита с примесью кремния в G и S позициях замещения (в системе, состоящей из N = 16, 32 и 64 атомов). Объем элементарной ячейки (V) и изменение объема относительно чистого цементита (ΔV)

Тип	Параметры	16	32	64			
G	<i>a, b, c</i> (Å)	4,529; 5,032 ; 6,757	4,528; 5,044; 6,753	4,510; 5,055; 6,756			
	$V_{,}$ (Å <sup>3</sup> )	154,01 (151,97 [11])	154,24	154,02			
	$\Delta V$ , (Å <sup>3</sup> )	-0,03 (-0,23 [11])	0,19	-0,02			
S	<i>a, b, c</i> (Å)	4,531; 5,027; 6,707	4,515; 5,040; 6,737	4,513; 5,052; 6,736			
	$V_{,}$ (Å <sup>3</sup> )	152,77 (151,44 [11])	153,29	153,58			
	$\Delta V, (\text{\AA}^3)$	-1,28 (-0,76 [11])	-0,76	-0,46 Å <sup>3</sup>			

#### Таблица 3

Расстояния между Si и ближайшими атомами (*I*), и соответствующий объем многогранника Вороного для атома кремния (*V*<sub>B</sub>) (в системе, состоящей из *N* = 16, 32 и 64 атомов) (в скобках значения объема многограниика Вороного для атома (C G S) инстого цементита)

	многогранника вороного для атома (С, G, S) чистого цементита)							
Тип	Параметры	16	32	64				
G	<i>l</i> (Å)	2,44 2,495 2,284 2,637	2,418 2,184 2,610 2,474	2,612 2,513 2,382 2,368				
		2,7 2,597 2,525 2,552	2,891 2,460 2,461 2,536	2,594 2,190 2,863 2,481				
		2,475 2,481 2,541 2,566	2,529 2,381 2,571 2,580	2,705 2,454 2,473 2,573				
		2,181 2,718	2,701 2,441	2,559 2,466				
	$V_{B}$ , (Å <sup>3</sup> )	10,67 (10,24)	10,66 (10,24)	10,68 (10,24)				
S	<i>l</i> (Å)	2,692 2,575 2,692 2,034	2,571 2,474 2,599 2,673	2,453 2,563 2,677 2,080				
		2,691 2,575 2,667 2,667	2,036 2,673 2,699 2,473	2,686 2,678 2,065 2,562				
		2,474 2,033 2,595 2,596	2,571 2,048 2,675 2,583	2,453 2,700 2,611 2,611				
		2,474 2,586	2,583 2,676	2,700 2,608				
	$V_{B}$ , (Å <sup>3</sup> )	10,51 (10,61)	10,66 (10,24)	10,65 (10,61)				
С	<i>l</i> (Å)	2,224 2,380 2,210 2,222	2,219 2,551 2,243 2,219	2,203 2,203 2,206 2,206				
		2,202 2,202 2,213 2,379	2,227 2,397 2,242 2,397	2,766 2,408 2,223 2,222				
		2,554	2,225	2,408				
	$V_{B}$ , $(Å^3)$	9,22 (7,45)	9,41 (7,45)	9,40 (7,45)				

Из данных, представленных в табл. 2, можно увидеть, что для случая положения атома кремния в G и S-позициях при увеличении количества атомов в системе объем, приходящийся на

## Физика

элементарную ячейку изменяется незначительно для всех случаев. Необходимо отметить, что для случая расположения кремния в С-позиции (16 атомов) при выполнении объемной оптимизации происходит существенное изменение объема ( $\Delta V = 9,54$  Å<sup>3</sup>), что согласуется с данными другой работы (~10 Å<sup>3</sup> [14]). Поэтому для правильной оценки энергетических характеристик взаимодействия кремния с цементитом в С-позиции объемная оптимизация не выполнялась.

В табл. 3 представлены расстояния между атомом кремния и ближайшим окружением, а также соответствующий объем многогранника Вороного для атома Si.

Из данных, представленных в табл. 3, можно увидеть, что для случая расположения атома кремния в *C*-позиции (рис. 2, *в*) с увеличением количества атомов в системе объем многогранника Вороного, приходящийся на атом Si, уменьшается. Максимальное изменение *V* наблюдается при расположении Si в *S*-позиции (рис. 2, *б*) (с 10,51 Å<sup>3</sup> при 16 атомах до 10,65 Å<sup>3</sup> при 64 атомах). Для случая расположения кремния в G-позиции (рис. 2, *а*) наблюдаются незначительные изменения, порядка 0,05 Å<sup>3</sup>.



Рис. 2. Первое окружение для атома кремния в Fe₃C: а) G-позиция; б) S-позиция; в) C-позиция

Результаты расчетов энергии формирования (энтальпии), ее изменение и парциальной энтальпии, которые являются характеристикой стабильности системы приведены в табл. 4.

Таблица 4 Энергетические характеристики систем цементит-кремний.  $E_f$  – энергия формирования цементита,  $E_f^{Si}$  – энергия формирования цементита в присутствии кремния,  $\Delta E_f$  – изменение энергии формирования цементита,  $E_n^X$  –

парциальная	энтальпия (	(X = Fe.	C)

N	Тип	$E_f$ ,эВ	$E_{f}^{Si}$ , эВ	$\Delta {E_f}$ , эВ	$\Delta E_f$ , эВ/ф.е.	$E_p^X$ , эВ
	С		1,02	0,11	0,03	1,62
16	S	0,91	1,32	0,41 (0,34[11,13])	0,10	1,69 (1,65[13])
	G		1,15	0,24 (0,24[11], 0,18[13])	0,06	1,52 (1,55[15], 1,40[13] )
	С		1,78	-0,03	0,00	1,47
32	S	1,82	2,23	0,41	0,05	1,69
	G		1,94	0,13	0,02	1,41
	С		3,81	0,17	0,01	1,57
64	S	3,64	4,02	0,38	0,02	1,66
	G		3,76	0,12	0,01	1,40

Полученное значение энергии образования для Fe<sub>3</sub>C (0,227 эВ или 0,06 эВ/атом) находится в хорошем согласии с экспериментальными данными (0,05÷0,08 эВ/атом) [20, 21] и результатами предшествующих теоретических оценок (0,22, 0,22, 0,26) [11, 12, 13]. Энергия образования Fe<sub>3</sub>C является положительной величиной, что согласуется с метастабильным характером цементита, в частности с его достаточно легким распадом, сопровождающимся образованием свободного углерода в виде графита.

При рассмотрении результатов изменения энергии формирования мы видим, что для состояния атома кремния в *C*-позиции (32 атома) эта величина отрицательна, и, следовательно, можно говорить о стабилизации цементита. Однако, если мы обратим внимание на парциальную энтальпию, то для всех положений кремния она положительна, и значит, кремний остается в твердом растворе ОЦК-Fe, что находится в хорошем согласии с другими данными [14, 15]. Кроме

того, это согласуется с экспериментальными данными, поскольку Si используются для подавления образования цементита в TRIP-сталях [22]. Из результатов изменения энергии формирования цементита в присутствии кремния на формульную единицу и парциальной энтальпии наблюдается существенная зависимость данных от размера суперячейки. Данный эффект связан с периодическими граничными условиями и показывает наличие взаимодействия между атомами кремния в соседних суперячейках.

Рассчитанные средние локальные магнитные моменты на атомах железа, углерода и кремния, а также полная намагниченность приведены в табл. 5 для различной концентрации последнего. Также для сравнения представлены значения средних магнитных моментов атомов железа и углерода в чистом цементите. Полученные результаты для магнитных моментов на атомах железа для Fe<sub>3</sub>C (2,00 и 1,91 $\mu_B$  на атомах Fe<sub>s</sub> и Fe<sub>g</sub>, соответственно) хорошо согласуются как с данными предыдущих расчетов [11–13, 15], так и с экспериментальным средним значением 1,78 $\mu_B$  [23]. На атомах углерода наблюдается небольшой индуцированный магнитный момент – 0,11 $\mu_B$ .

элементарную ячеику) в системе с одним атомом кремния							
Ν	Тип	$m^{\text{Fes}}$	$m^{ m Feg}$	$m^{\rm C}$	$m^{Si}$	М	
16	С	1,94	1,79	-0,11	-0,05	21,43	
	S	1,95	1,76	-0,09	-0,05	19,21	
	G	1,81	1,75	-0,09	-0,07	18,77	
32	С	1,97	1,87	-0,11	-0,05	22,08	
	S	1,97	1,84	-0,10	-0,05	20,83	
	G	1,94	1,87	-0,10	-0,07	20,99	
64	С	2,01	1,90	-0,11	-0,06	22,45	
	S	1,99	1,89	-0,11	-0,06	21,79	
	G	1,98	1,90	-0,11	-0,08	21,83	
Fe <sub>3</sub> C		2,00	1,91	-0,11	_	22,50	

Таблица 5 Средние локальные магнитные моменты на атомах Fe, C и Si (*m*, μ<sub>B</sub>) и полная намагниченность (*M*, μ<sub>B</sub> на элементарную ячейку) в системе с одним атомом кремния

При замещении Fe или C на Si наблюдается существенное изменение магнитных моментов атомов железа, которое практически исчезает для системы, состоящей из 64 атомов. Рассчитанный магнитный момент на атоме кремния имеет небольшое отрицательное значение  $-0,05 \div -0,08\mu_B$ , что незначительно отличается от теоретического значения, полученного для Si в ОЦК-железе ( $-0,09 \mu_B$ ), а также согласуется с данными других теоретических работ [11–13]. Намагниченность систем и магнитные моменты на атомах снижаются с увеличением концентрации Si, связано это, прежде всего, с деформацией решетки. Наблюдается явный упругий эффект, который является дальнодействующим и при увлечении размера системы его влияние уменьшается (см. табл. 3).

На рис. З изображена полная плотность электронных состояний (DoS) для 16 и 64-атомных систем (как примеры объемной и вытянутой структур). В структуре DoS легко выделяются парциальные полосы подрешетки железа (от –7,5 до 5 эВ), локальные пики углерода (от –13,6 до –11,5 эВ) и кремния (от –10 до –8 эВ).

Примесь кремния дает вклад в DoS выше -5 эВ, что указывает на образование прямых связей между Si3p-Fe3d, что является причиной понижения магнитного момента на атомах железа. В случае G-позиции кремния происходит непосредственное связывание Si-Fe, в то время как для S-позиции – через соседний атом углерода. Также для C и G-позиции кремния наблюдается щель в p-d-полосе. Для системы из 64 атомов пики для атома кремния более узкие по сравнению с 16-атомной системой, то есть повышается высота Fe3d-полосы, что и приводит к увеличению магнитного момента на атомах железа. В силу операции трансляции при малом размере ячейки атомы кремния и углерода находятся близко, и происходит существенное перераспределение электронной плотности между железом, углеродом и кремнием с понижением среднего магнитного момента у атомов железа. С увеличением размера ячейки данный эффект ослабевает.



Рис. 3. Полная плотность состояний системы: *a*) При расположении атома Si в системы из 16 атомов; *б*) При расположении атома Si в системы из 64 атомов. Вертикальная сплошная линия обозначает уровень Ферми

#### Заключение

Проведенные расчеты кремния в цементите показали, что для всех исследуемых случаев наиболее энергетически выгодны замещения позиций атома углерода, что указывает на отталкивающий эффект между данными примесями. С ростом концентрации Si при его расположении в позиции углерода намагниченность системы возрастает. В случае же расположения кремния в *G*- и *S*-позициях наблюдается резкое уменьшение намагниченности. Связано это, прежде всего, с деформацией решетки. Было получено, что для атома кремния в С-позиции (32 атома) энергия формирования отрицательна, и, следовательно, можно говорить о стабилизации цементита. Однако парциальная энтальпия для всех положений кремния положительна и значит, кремний остается в твердом растворе ОЦК-Fe, что в целом согласуются с экспериментальными наблюдениями. Было получено, что чем больше концентрация кремния, тем ниже средний магнитный момент на атомах железа. Данный эффект является следствием использования при расчетах периодических граничных условий и указывает на наличие взаимодействий между атомами кремния в соседних суперячейках.

Исследование поддержано грантом Российского научного фонда № 16-19-10252.

#### Литература

1. Bain, E.C. Alloying elements in steel / E.C. Bain, H.W. Paxton. – Metals Park, Ohio: Amer. Soc. for Metals, 1966. – 254 p.

2. Deeley, P.D. Ferroalloys & alloying additives handbook / P.D. Deeley, K.J.A. Kundig, H.R. Spendelow. – Newfield, N.J.: Shieldalloy Corp., 1981. – 127 p.

3. Гуляев, А.П. Металловедение / А.П. Гуляев. – М. : Металлургия, 1986. – 541 с.

4. Гудремон, Э. Специальные стали / Э. Гудремон. – Москва: Металлургиздат, 1959. – Т. 1. – 1959. – 952 с.

5. Umemoto, M. Influence of alloy additions on production and properties of bulk cementite / M. Umemoto, Z.G. Liu, K. Masuyama, K. Tsuchiya // Scripta Materialia. – 2001. – Vol. 45, no. 4. – P. 391–397.

6. Influence of substitutional atoms on the solubility limit of carbon in BCC iron / H. Saitoh, K. Ushioda, N. Yoshinaga, W. Yamada // Scripta Materialia. – 2011. – Vol. 65, no. 10. – P. 887–890.

7. Imai, Y. Influence of alloying elements on solubility of carbon and nitrogen in ferrite iron / Y. Imai, K. Masumoto, M. Sakamoto // Bulletin of the Japan Institute of Metals. – 1968. – Vol. 7. – Issue 3. – P. 137–152.

8. Borchers, H. Zementitbildung in Stählen mit niedrigem Kohlenstoffgehalt / H. Borchers, W. König // Archiv für das Eisenhüttenwesen. – 1963. – Vol. 34, no. 6. – P. 453–463.

9. Leak, D.A. Solubility and Diffusion of Carbon in a Silicon-Iron Alloy / D.A. Leak, G.M. Leak // J. Iron Steel Inst. – 1958. – Vol. 189, № 3. – P. 256–262.

10. Лякишев, Н.П. Диаграммы состояния двойных металлических систем / Н.П. Лякишев. – Т.1. – М.: Машиностроение, 1996. – 991 с.

11. Jang, J.H. Substitutional solution of silicon in cementite: A first-principles study / J.H. Jang, I.G. Kim, H.K.D.H. Bhadeshia // Computational Materials Science. – 2009. – Vol. 44, no. 4. – P. 1319–1326.

12. Electronic structure and magnetic properties of  $Fe_3C$  with 2p and 3p impurities / O.Y. Gutina, N.I. Medvedeva, I.R. Shein *et al.* // Physica status solidi (b). – 2009. – Vol. 246, no. 9. – P. 2167–2171.

13. Ande, C.K. First-principles prediction of partitioning of alloying elements between cementite and ferrite / C.K. Ande, M.H.F. Sluiter // Acta Materialia. – 2010. – Vol. 58, no. 19. – P. 6276–6281.

14. Ande, C.K. First-principles calculations on stabilization of iron carbides (Fe<sub>3</sub>C, Fe<sub>5</sub>C<sub>2</sub> and  $\eta$ -Fe<sub>2</sub>C) in steels by common alloying elements / C.K. Ande, M.H.F. Sluiter // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2012. – Vol. 43. – Issue 11. – P. 4436–4444.

15. Partitioning of Cr and Si between cementite and ferrite derived from first-principles thermodynamics / H. Sawada, K. Kawakami, F. Körmann *et al.* // Acta Materialia. – 2016. – Vol. 102. – P. 241–250.

16. Schwarz, K. Solid state calculations using WIEN2k / K. Schwarz, P. Blaha // Computational Materials Science. – 2003. – Vol. 28, no. 2. – P. 259–273.

17. Fasiska, E.J. On the cementite structure / E.J. Fasiska, G.A. Jeffrey // Acta Crystallographica. – 1965. – Vol. 19, no. 3. – P. 463–471.

18. Эмсли, Д. Элементы / Д. Эмсли. – М.: Мир, 1993. – 255 с.

19. Thermal expansion and crystal structure of cementite,  $Fe_3C$ , between 4 and 600 K determined by time-of-flight neutron powder diffraction / I.G. Wood, L.Vočadlo, K.S. Knight, D.P. Dobson *et al.* // Journal of Applied Crystallography. – 2004. – Vol. 37, no. 1. – P. 82–90.

20. Meschel, S.V. Standard enthalpies of formation of some 3d transition metal carbides by high temperature reaction calorimetry / S.V. Meschel, O.J. Kleppa // Journal of alloys and compounds. – 1997. – Vol. 257, no. 1-2. – P. 227–233.

21. Guillermet, A.F. Cohesive properties and vibrational entropy of 3d-transition metal carbides / A.F. Guillermet, G. Grimvall // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 1992. – Vol. 53, no. 1. – P. 105–125. DOI: 10.1016/0022-3697(92)90019-A

22. Influence of alloying elements on the kinetics of strain-induced martensitic nucleation in lowalloy, multiphase high-strength steels / L. Samek, E. De Moor, J. Penning, B.C. De Cooman // Metallurgical and Materials Transactions A. -2006. – Vol. 37, no. 1. – P. 109–124.

23. Shull, C.G. Neutron diffraction studies of the magnetic structure of alloys of transition elements / C.G. Shull, M.K. Wilkinson // Physical Review. – 1955. – Vol. 97, no. 2. – P. 304–310. DOI: 10.1103/PhysRev.97.304

Поступила в редакцию 4 июня 2018 г.

#### DOI: 10.14529/mmph180409

# AB INITIO SIMULATION OF SILICON INFLUENCE ON Fe<sub>3</sub>C CARBIDE FORMATION IN BCC-IRON

#### A.V. Verkhovykh, A.A. Mirzoev, D.A. Mirzaev

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation *E-mail:* avverkhovykh@susu.ru

Results of first-principles simulation of silicon influence of the energy of cementite formation and on partial enthalpy are presented in the article. Simulation was carried out in the frameworks of the Density Functional Theory (DFT) using the full-potential-linearized-augumented-plane-wave method (FP LAPW) taking into account the generalized gradient approximation (GGA'96) in WIEN2k software package. Various concentrations of silicon admixtures in cementite were studied, namely 1,6, 3,2 and 6 at. % for both the position of displacement of iron atom (positions S and G) and of carbon atom (position C). Volumetric optimization of all structures was carried out. Equilibrium parameters of the grid were determined both for cementite without admixtures (a = 4,510; b = 5,063; c = 6,747 Å), and for cementite with silicon, which excellently comply with experimental and theoretical data. Formation energy for concentration of 3,2 at. % in position C turned out to be -0.03 electron-volt, which can signify cementite's stabilization. Though at that, partial enthalpy for all positions of silicon is positive which means that silicon remains in solid solution BCC-Fe, which is in a good compliance with results of other theoretical and experimental works. It was determined that the more is concentration of silicon, the lower is average magnetic moment on iron atoms. Moreover, it became possible to show that energy characteristics of the system significantly depend on the size of a super cell. This effect is connected with the use of periodic boundary conditions during calculations, and shows the presence of interactions between silicon atoms in neighboring super cells.

Keywords: first-principles simulation; cementite; silicon; formation energy; partial enthalpy.

#### References

1. Bain E.C., Paxton H.W. Alloying elements in steel. Metals Park, Ohio: Amer. Soc. for Metals, 1966, 254 p.

2. Deeley P.D., Kundig K.J.A., Spendelow H.R. *Ferroalloys & alloying additives handbook*. New-field, N.J.: Shieldalloy Corp., 1981, 127 p.

3. Gulyaev A.P. *Metallovedenie* (Metal science). Moscow, Metallurgiya Publ., 1986, 541 p. (in Russ.).

4. Houdremont Von Ed. *Handbuch der Sonderstahlkunde* (Manual of special steel customer). Springer, Berlin u. Verlag Stahleisen, Düsseldorf, 1956. 874 p. DOI: 10.1002/maco.19570080821

5. Umemoto M., Liu Z. G., Masuyama K., Tsuchiya K. Influence of alloy additions on production and properties of bulk cementite. *Scripta Materialia*, 2001, Vol. 45, no. 4, pp. 391–397. DOI: 10.1016/S1359-6462(01)01016-8

6. Saitoh H., Ushioda K., Yoshinaga N., Yamada W. Influence of substitutional atoms on the solubility limit of carbon in BCC iron. *Scripta Materialia*, 2011, Vol. 65, no. 10, pp. 887–890. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2011.07.057

7. Imai Y., Masumoto K., Sakamoto M. Influence of alloying elements on solubility of carbon and nitrogen in ferrite iron. *Bulletin of the Japan Institute of Metals*, 1968, Vol. 7, Issue 3, pp. 137–152. (in Japan). DOI: 10.2320/materia1962.7.137

8. Borchers H., König W. Zementitbildung in Stählen mit niedrigem Kohlenstoffgehalt. Archiv für das Eisenhüttenwesen, 1963, Vol. 34, no. 6, pp. 453–463. DOI: 10.1002/srin.196303467

9. Leak D.A., Leak G.M. Solubility and Diffusion of Carbon in a Silicon-Iron Alloy. J. Iron Steel Inst., 1958, Vol. 189, no. 3, pp. 256–262.

10. Lyakishev N.P. *Diagrammy sostoyaniya dvoynykh metallicheskikh system. T. 1* (State diagrams of double metallic systems. Vol. 1), Moscow, Mashinostroenie Publ., 1996, 991 p. (in Russ.).

11. Jang J.H., Kim I.G., Bhadeshia H.K.D.H. Substitutional solution of silicon in cementite: A first-principles study. *Computational Materials Science*, 2009, Vol. 44, no. 4, pp. 1319–1326. DOI: 10.1016/j.commatsci.2008.08.022

12. Gutina O.Y., Medvedeva N.I., Shein I.R., Ivanovskii A.L., Medvedeva J.E. Electronic structure and magnetic properties of Fe<sub>3</sub>C with 2p and 3p impurities. *Physica status solidi (b)*, 2009, Vol. 246, no. 9, pp. 2167–2171. DOI: 10.1002/pssb.200945064

13. Ande C.K., Sluiter M.H.F. First-principles prediction of partitioning of alloying elements between cementite and ferrite. *Acta Materialia*, 2010, Vol. 58, no. 19, pp. 6276–6281. DOI: 10.1016/j.actamat.2010.07.049

14. Ande C.K., Sluiter M.H.F. First-principles calculations on stabilization of iron carbides (Fe<sub>3</sub>C, Fe  $_5C_2$  and  $\eta$ -Fe<sub>2</sub>C) in steels by common alloying elements. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2012, Vol. 43, Issue 11, pp. 4436–4444. DOI: 10.1007/s11661-012-1229-y

15. Sawada H., Kawakami K., Körmann F., Grabowski B., Hickel T., Neugebauer J. Partitioning of Cr and Si between cementite and ferrite derived from first-principles thermodynamics. *Acta Materialia*, 2016, Vol. 102, pp. 241–250. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.09.010

16. Schwarz K., Blaha P. Solid state calculations using WIEN2k. Computational Materials Science, 2003, Vol. 28, no. 2, pp. 259–273. DOI: 10.1016/S0927-0256(03)00112-5

17. Fasiska E.J., Jeffrey G.A. On the Cementite Structure. *Acta Crystallographica*, 1965, Vol. 19, no. 3, pp. 463–471. DOI: 10.1107/S0365110X65003602

18. Emsley J. The Elements. Oxford, Clarendon Press, 1991, 251 p.

19. Wood I.G., Vočadlo L., Knight K.S., Dobson D.P., Marshall W.G., Price G.D., Brodholt J. Thermal expansion and crystal structure of cementite, Fe<sub>3</sub>C, between 4 and 600 K determined by time-of-flight neutron powder diffraction. *Journal of Applied Crystallography*, 2004, Vol. 37, no. 1, pp. 82–90. DOI: 10.1107/S0021889803024695

20. Meschel S.V., Kleppa O.J. Standard enthalpies of formation of some 3d transition metal carbides by high temperature reaction calorimetry. *Journal of alloys and compounds*, 1997, Vol. 257, no. 1-2, pp. 227–233. DOI: 10.1016/S0925-8388(97)00023-6

21. Guillermet A.F., Grimvall G. Cohesive properties and vibrational entropy of 3d-transition metal carbides. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1992, Vol. 53, no. 1, pp. 105–125. DOI: 10.1016/0022-3697(92)90019-A

22. Samek L., De Moor E., Penning J., De Cooman B. C. Influence of alloying elements on the kinetics of strain-induced martensitic nucleation in low-alloy, multiphase high-strength steels. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2006, Vol. 37, no. 1, pp. 109–124. DOI: 10.1007/s11661-006-0157-0

23. Shull C.G., Wilkinson M.K. Neutron diffraction studies of the magnetic structure of alloys of transition elements. *Physical Review*, 1955, Vol. 97, no. 2, pp. 304–310. DOI: 10.1103/PhysRev.97.304

Received June 4, 2018

#### 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 редколлегию предоставляется электронная (документ MS Word 2003) версия работы объемом не более 6 страниц, экспертное заключение о возможности опубликования работы в открытой печати, сведения об авторах (Ф.И.О., место работы, звание и должность для всех авторов работы), контактная информация ответственного за подготовку рукописи.

3. Структура статьи: УДК, название (не более 12–15 слов), список авторов, аннотация (150–250 слов), список ключевых слов, текст работы, литература (в порядке цитирования, в скобках, если это возможно, дается ссылка на оригинал переводной книги или статьи из журнала, переводящегося на английский язык). После текста работы следует название, расширенная аннотация (реферат статьи) объемом до 1800 знаков с пробелами, список ключевых слов и сведения об авторах на английском языке.

4. Параметры набора. Поля: зеркальные, верхнее – 23, нижнее – 23, внутри – 22, снаружи – 25 мм. Шрифт – Times New Roman 11 pt, масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 пт, межстрочный интервал – одинарный.

5. Формулы. Стиль математический (цифры, функции и текст – прямой шрифт, переменные – курсив), основной шрифт – Times New Roman 11 pt, показатели степени 71 % и 58 %. Выключенные формулы должны быть выровнены по центру.

6. Рисунки все черно-белые. Желательно предоставить рисунки и в виде отдельных файлов.

7. Адрес редакционной коллегии журнала «Вестник ЮУрГУ» серии «Математика. Механика. Физика»:

Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, факультет математики, механики и компьютерных технологий, кафедра математического и компьютерного моделирования, главному редактору профессору Загребиной Софье Александровне. [Prof. Zagrebina Sophiya Aleksandrovna, Mathematical and Computer Modeling Department, SUSU, 76, Lenin prospekt, Chelyabinsk, Russia, 454080].

8. Адрес электронной почты: mmph@susu.ru

9. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта журнала: см. http://vestnik.susu.ru/mmph.

10. Журнал распространяется по подписке. Электронная версия: см. www.elibrary.ru, http://vestnik.susu.ru/mmph, http://вестник.юургу.рф/mmph.

11. Плата с аспирантов за публикацию не взимается.

#### СВЕДЕНИЯ О ЖУРНАЛЕ

Журнал основан в 2009 году. Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-57362 выдано 24 марта 2014 г. Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

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

Главный редактор журнала – д.ф.-м.н., проф. С.А. Загребина.

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук» по следующим отраслям наук и группам специальностей: 01.01.00 – математика; 01.02.00 – механика; 01.04.00 – физика, 05.13.00 – Информатика, вычислительная техника и управление.

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНИТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международных справочных системах по периодическим и продолжающимся изданиям "Ulrich's Periodicals Directory", "Zentralblatt MATH", "Russian Science Citation Index on Web of Science".

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России», E29211 в Интернет-каталоге агентства «Книга-Сервис».

Периодичность выхода – 4 номера в год.

Адрес редакции, издателя: 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76, Издательский центр ЮУрГУ, каб. 32.

#### ВЕСТНИК ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА Серия «МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА» Том 10, № 4 2018

Редакторы: О. Шаханская, А. Полякова Техн. редактор А.В. Миних

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 23.10.2018. Дата выхода в свет 31.10.2018. Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 10,69. Тираж 500 экз. Заказ 411/476. Цена свободная.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.