

ВЕСТНИК



**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

**2019
Т. 11, № 1**

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

СЕРИЯ

«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»

Решением ВАК России включен в Перечень рецензируемых научных изданий

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

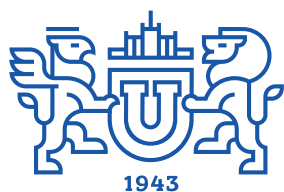
Основной целью серии «Математика. Механика. Физика» является публикация и распространение оригинальных результатов научных исследований в области математики, механики и физики, а также их приложений в естественных, технических и экономических науках.

Редакционная коллегия

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

Редакционный совет

д.т.н., профессор **Богомолов А.В.** (Государственный научный центр Российской Федерации – Федеральный медицинский биофизический центр имени А.И. Бурназяна, г. Москва)
д.ф.-м.н. **Бржезинская М.М.** (Берлинский центр материалов и энергии им. Гельмгольца, г. Берлин, Германия)
д.ф.-м.н., профессор **Бровко Г.Л.** (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва)
профессор **Гуидетти Д.** (Болонский университет, г. Болонья, 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, ИНА-Университет, г. Инчон, Южная Корея)
д.ф.-м.н., профессор **Кундикова Н.Д.** (Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург)
д.ф.-м.н., профессор **Меньших В.В.** (Воронежский институт МВД Российской Федерации, г. Воронеж)
д.ф.-м.н., профессор **Пинчук С.И.** (Университет штата Индиана, г. Блумингтон, США)
Ph. D., ассистент-профессор **Пузырев Е.С.** (Университет Вандербильта, г. Нэшвилл, США)
д.т.н., профессор **Равшанов Н.К.** (Ташкентский университет информационных технологий, г. Ташкент, Узбекистан)
д.т.н., профессор **Уткин Л.В.** (Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург)
Prof. dr. ir. **Ферпуст И.** (Католический университет, г. Лёвен, Бельгия)
д.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Штраус В.А.** (Университет Симона Боливара, г. Каракас, Венесуэла)



BULLETIN

OF THE SOUTH URAL
STATE UNIVERSITY

2019
Vol. 11, no. 1

SERIES

“MATHEMATICS.
MECHANICS. PHYSICS”

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

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

South Ural State University

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

Editorial Board

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

Editorial Council

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

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

- ЗАЛЯПИН В.И., ХАРИТОНОВА Е.В. Уравнения типа свертки со случайными данными..... 5
- KADCHENKO S.I., ZAKIROVA G.A., RYAZANOVA L.S., TORSHINA O.A. Calculation of Discrete Semi-Bounded Operators' Eigenvalues with Large Numbers..... 10
- СЕДОВ А.И. О вычислении собственных чисел и функций дискретного оператора с ядерной резольвентой, возмущенного ограниченным..... 16
- ТОКМАЧЕВ М.С. Correlations Between Elements and Sequences in a Numerical Prism 24
- УШАКОВ А.Л. Быстрое решение модельной задачи для бигармонического уравнения..... 34

Механика

- SAPOZHNIKOV S.B., KHERUVIMOV A.V., KHORUZHIIY A.S. Control of Composite Nonlinear Deformation by Local Curvature of Yarns 43
- ЦАРЕНКО С.Н. Крутильные колебания стержневых конструкций с осевой неоднородностью геометрических характеристик 50

Физика

- ZAGREBIN M.A., SOKOLOVSKIY V.V., BUCHELNIKOV V.D. First-Principles Investigations of Reference States of Co_2CrIn Heusler Alloys..... 59
- ЧИРКОВ П.В., МИРЗОЕВ А.А., МИРЗАЕВ Д.А. Молекулярно-динамическое моделирование образования кластеров углерода при отпуске мартенсита Fe–C..... 67

Информация

- Борис Яковлевич Зельдович. Памяти коллеги 75

CONTENTS

Mathematics

- ZALYAPIN V.I., KHARITONOVA E.V. Equations of Convolution Type with Random Data 5
- KADCHENKO S.I., ZAKIROVA G.A., RYAZANOVA L.S., TORSHINA O.A. Calculation of Discrete Semi-Bounded Operators' Eigenvalues with Large Numbers..... 10
- SEDOV A.I. On Calculation of Eigenvalues and Eigenfunctions of a Discrete Operator with a Nuclear Resolvent Perturbed by a Bounded Operator..... 16
- TOKMACHEV M.S. Correlations Between Elements and Sequences in a Numerical Prism 24
- USHAKOV A.L. Fast Solution of a Model Problem for the Biharmonic Equation..... 34

Mechanics

- SAPOZHNIKOV S.B., KHERUVIMOV A.V., KHORUZHIY A.S. Control of Composite Nonlinear Deformation by Local Curvature of Yarns 43
- TSARENKO S.N. Torsional Vibrations of a Rod with an Axial Geometric Inhomogeneity 50

Physics

- ZAGREBIN M.A., SOKOLOVSKIY V.V., BUCHELNIKOV V.D. First-Principles Investigations of Reference States of Co₂CrIn Heusler Alloys..... 59
- CHIRKOV P.V., MIRZOEV A.A., MIRZAEV D.A. Molecular Dynamics Simulation of Carbon Clusterization under Martensite Tempering 67

Information

- Boris Yakovlevich Zeldovich. In Memory of a Colleague..... 75

УРАВНЕНИЯ ТИПА СВЕРТКИ СО СЛУЧАЙНЫМИ ДАННЫМИ

В.И. Заляпин, Е.В. Харитонова

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

E-mail: zaljapinvi@susu.ru

Обсуждается возможность использования преобразования Лапласа для решения интегральных уравнений типа свертки с неточно известными исходными данными. В предположении, что ошибки измерений могут быть описаны стационарным случайным процессом с нулевым средним (отсутствие систематических ошибок измерения) и известной корреляционной функцией, получены основные характеристики погрешности восстанавливаемого сигнала. Продемонстрировано, что численная реализация метода Лапласа технически значительно усложняет процедуру регуляризации.

Ключевые слова: уравнения типа свертки; преобразование Лапласа; регуляризация.

Введение

При решении различных прикладных задач, в частности задач теории динамических измерений, часто возникает потребность в решении интегральных уравнений Вольтерры типа свертки:

$$\int_0^t K(t-\tau)z(\tau)d\tau = u(t). \quad (1)$$

Здесь $z(t)$ – неизвестная функция, $u(t)$ – экспериментально измеренная функция, $K(s)$ – ядро уравнения (1), характеризующее исследуемую линейную систему. Предполагается, что уравнение (1) рассматривается на промежутке времени $[0; T]$, так что упомянутые функции определены для $0 \leq t \leq T$, $T \leq +\infty$.

Хорошо известно (например, [1–3]), что задача решения уравнения (1) с неточно заданной правой частью неустойчива относительно ошибок измерения. Если допустить, что уравнение (1) обладает единственным решением $z_0(t)$ для некоторой правой части $u_0(t)$, то допущенные (может быть, даже малые) отклонения от $u_0(t)$ могут приводить к значительным отклонениям от $z_0(t)$. Подобная неустойчивость к настоящему времени хорошо изучена и предложены различные методы регуляризации (метод А.Н. Тихонова, метод М.М. Лаврентьева, метод В.К. Иванова и др.), позволяющие элиминировать ошибки правой части и минимизировать погрешности вычислительных процедур.

Метод Лапласа

Одним из теоретически эффективных методов решения уравнения (1) является переход из временной в частотную область с помощью преобразования Лапласа ([4]). Если $L[\varphi]$ – преобразование Лапласа функции $\varphi(t)$, определенной на полупрямой $[0; +\infty)$, то в силу теоремы о свертке уравнение (1) перейдет в алгебраическое уравнение:

$$L[u] = L[K] \cdot L[z],$$

относительно преобразований Лапласа (изображений) функций $u(t)$, $z(t)$ и $K(s)$, из которого легко находится изображение неизвестной функции. Для определения функции $z(t)$ теперь достаточно по изображению восстановить оригинал, положив:

$$z(t) = L^{-1} \left[\frac{L[u]}{L[k]} \right]. \quad (2)$$

Математика

Хорошо известно (например, [4]), что преобразование Лапласа функции $\varphi(t)$, такой, что $|\varphi(t)| \leq M \exp(s_0 t)$ определено и представляет собой аналитическую функцию в полуплоскости $\operatorname{Re} p > s_0$. При этом, если $\psi(p) = L[\varphi]$, то обращение преобразования Лапласа задается формулой Меллина–Бромвича

$$\varphi(t) = L^{-1}[\psi] = \frac{1}{2\pi i} \int_{s-i\infty}^{s+i\infty} \psi(p) e^{tp} dp, \quad s = \operatorname{Re} p > s_0.$$

Регуляризация

Сам по себе метод Лапласа решения уравнения (1) не решает проблем, связанных с упомянутой выше неустойчивостью. Поэтому прямое использование соотношения (2) не приводит к удовлетворительному результату в ситуации, когда правая часть уравнения (1) известна неточно. Как показывает более тонкий анализ (например, [2]), связано это обстоятельство с наличием у измеряемого сигнала высокочастотных составляющих. Естественным выходом в этой ситуации является подавление высокочастотных составляющих правой части уравнения (1).

Достигается это следующим образом. Пусть $h(\alpha; \mu)$ – функция двух действительных переменных, определенная для всех μ и $\alpha > 0$, такая, что:

- 1) $\forall \alpha, \mu \quad 0 \leq h(\alpha, \mu) \leq 1$;
- 2) $h(0; \mu) = 1$;
- 3) $\exists \lim_{|\mu| \rightarrow \infty} h(\alpha; \mu) = 0$;
- 4) $\exists \lim_{\alpha \rightarrow 0} h(\alpha; \mu) = 1$.

Полагая

$$\hat{z}(p) = \frac{L[u]}{L[K]} h(\alpha; \mu), \quad \mu = \operatorname{Im} p,$$

рассмотрим

$$z_\alpha(t) = L^{-1}[\hat{z}] = L^{-1} \left[\frac{L[u]}{L[K]} h \right].$$

Пусть

$$u(t) = u_0(t) + \Delta u(t).$$

Тогда:

$$L[u] = L[u_0] + L[\Delta u]$$

и

$$z_\alpha(t) - z_0(t) = L^{-1} \left[\frac{L[u_0]}{L[K]} (h-1) \right] + L^{-1} \left[\frac{L[\Delta u]}{L[K]} h \right]. \quad (3)$$

В этом соотношении первое слагаемое описывает точность замены решения $z_0(t)$ функцией $z_\alpha(t)$ (т.н. *точность регуляризации*), второе – погрешность решения, обусловленную ошибками $\Delta u(t)$ измерения правой части уравнения (1). Можно доказать ([2]), что при $\alpha \rightarrow 0$ первое слагаемое стремится к нулю, в то время как второе может неограниченно возрастать. При надлежащем выборе параметра регуляризации α и стабилизирующей функции $h(\alpha; \mu)$ точность замены решения $z_0(t)$ функцией $z_\alpha(t)$ будет иметь тот же порядок, что и ошибки измерения правой части уравнения (1). Заметим, что уклонение $z_\alpha(t)$ от $z_0(t)$ оценивается в соответствии с выбором нормированного пространства, в которое погружены эти функции. Чаще всего рассматриваются пространства $C_{[0;T]}$, $C_{[0;T]}^r$, $L_{[0;T]}$ и $L_{[0;T]}^2$.

Случайные ошибки измерений

Пусть теперь ошибки $\Delta u(t)$ описываются стационарным случайным процессом $\Delta u(t) = \xi(t)$ с нулевым средним ($M \xi(t) = 0$) и корреляционной функцией $R_\xi(t - \tau)$ ([5]). В этом случае и ре-

шение уравнения (1) – случайный процесс (вообще говоря, необязательно стационарный). Разумной мерой отклонения $z_\alpha(t)$ от $z(t)$ в конкретной точке $t \in [0; T]$ может служить величина дисперсии разности (3) в этой точке:

$$\rho^2(z_\alpha; z) = M |z_\alpha - z|^2,$$

а мерой отклонения $z_\alpha(t)$ от $z_0(t)$ как элементов функционального пространства – норма функции ρ как функции переменной t в этом пространстве.

Найдем вероятностные характеристики процесса $L[\xi]$. Несложные выкладки дают:

$$ML[\xi] = 0, \quad \text{Cov } L[\xi] = \frac{1}{p_1 + \bar{p}_2} (L[R_\xi](p_1) + L[R_\xi](\bar{p}_2)).$$

В частности, рассеяние преобразования Лапласа случайной ошибки измерений описывается дисперсией, даваемой предыдущим соотношением при $p_1 = p_2$:

$$D(L[\xi]) = M |L[\xi]|^2 = \frac{L[R_\xi](p) + L[R_\xi](\bar{p})}{2 \text{Re } p}.$$

Пусть теперь $\Delta(\alpha; t)$ – составляющая погрешности (3), обусловленная ошибками измерения правой части уравнения (1):

$$\Delta(\alpha; t) = L^{-1} \left[\frac{L[\xi]}{L[K]} h(\alpha; \text{Im } p) \right].$$

В силу стационарности процесса $\xi(t)$ его преобразование Лапласа представимо в виде:

$$L[\xi] = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\xi(dw)}{p - iw}, \quad \text{Re } p > s_0,$$

где $\zeta(w)$ – спектральный процесс для $\xi(t)$:

$$M |\zeta(dw)|^2 = dF_\xi(w) = f_\xi(w)dw,$$

а $F_\xi(w)$, $f_\xi(w)$ – спектральная функция и спектральная плотность, соответственно, процесса $\xi(t)$. Применяя формулу Меллина–Бромвича, заключаем, что

$$\Delta(\alpha; t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g_\alpha(t; w) \zeta(dw),$$

где

$$g_\alpha(t; w) = \frac{1}{2\pi i} \int_{s-i\infty}^{s+i\infty} \frac{h(\alpha; \text{Re } p)}{L[K](p)(p - iw)} e^{pt} dp, \quad \text{Re } p > s_0.$$

Отсюда, дисперсия величины $\Delta(\alpha; t)$ дается соотношением:

$$D(\Delta(\alpha; t)) = \int_{-\infty}^{+\infty} |g_\alpha(t; w)|^2 dF_\xi(w) = \int_{-\infty}^{+\infty} |g_\alpha(t; w)|^2 f_\xi(w) dw. \quad (4)$$

Заметим, что:

$$|g_\alpha(t; w)|^2 \leq \frac{e^{2st}}{4\pi^2} \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|h(\alpha; \mu)|}{|L[K]|} \frac{e^{\mu t}}{\sqrt{s^2 + (\mu - w)^2}} d\mu \right)^2.$$

Применяя к интегралу в правой части неравенство Коши–Буняковского, получаем неравенство:

$$|g_\alpha(t; w)|^2 \leq \frac{e^{2st}}{4\pi s} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{h(\alpha; \mu)}{L[K]} \right|^2 d\mu,$$

и следующую из него оценку для дисперсии величины $\Delta(\alpha; t)$:

$$D(\Delta(t; \alpha) \leq R_{\xi}(0) \cdot \frac{e^{2st}}{4\pi s} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{h(\alpha; \mu)}{L[K]} \right|^2 d\mu, s > s_0.$$

Замечание о численной реализации

При реализации метода Лапласа для решения уравнения (1) наиболее проблематичным моментом является обращение скорректированного изображения, т.е. вычисление интеграла Меллина–Бромвича. Классические аналитические методы обращения преобразования Лапласа (например, [4, 6]) в реальных прикладных задачах, как правило, неприменимы и возникает необходимость использования численных методов. Достаточно полный обзор возможных численных процедур решения этой задачи представлен, например, в книгах [7, 8].

Следует, однако, заметить, что задача приближенного обращения преобразования Лапласа некорректна и требует регуляризации в той же мере, что и исходная задача решения уравнения (1).

Действительно, если мы хотим по изображению $\psi(p), \operatorname{Re} p > s_0$ восстановить оригинал $\varphi(t), t > 0$, то фактически мы ставим задачу решения интегрального уравнения:

$$\int_0^{+\infty} \varphi(t) e^{-pt} dt = \psi(p),$$

относительно функции $\varphi(t)$ по заданной (неточно!) функции $\psi(p)$.

Это обстоятельство технически значительно усложняет предложенную процедуру решения уравнения (1) и ориентирует исследователей в прикладных областях на использование для решения уравнения (1) прямых методов регуляризации (метод невязки, метод квазирешений и т.п.), технически более простых в численной реализации, нежели метод Лапласа.

Литература

1. Верлань, А.Ф. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы и программы. Справочное пособие / А.Ф. Верлань, В.С. Сизиков. – Киев: Наукова думка, 1986. – 542 с.
2. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – М.: Наука, 1986. – 286 с.
3. Иванов, В.К. Теория линейных некорректных задач и её приложения / В.К. Иванов, В.В. Васин, В.П. Танана. – М.: Наука, 1978. – 206 с.
4. Диткин, В.А. Операционное исчисление / В.А. Диткин, А.П. Прудников. – М.: Высшая школа, 1975. – 407 с.
5. Гихман, И.И. Введение в теорию случайных процессов / И.И. Гихман, А.В. Скороход. – М.: Наука, 1977. – 567 с.
6. Bateman, H. Tables of integral transforms. Vol. I / H. Bateman, A. Erdelyi. – New York–Toronto–London, McGrawhill, 1954. – 391 p.
7. Рябов, В.М. Численное обращение преобразования Лапласа / В.М. Рябов. – СПб.: Изд. дом Санкт-Петербургского гос. ун-та, 2013. – 185 с.
8. Крылов, В.И. Методы приближенного преобразования Фурье и обращение преобразования Лапласа / В.И. Крылов, Н.С. Скобля. – М.: Наука, 1974. – 223 с.

Поступила в редакцию 22 ноября 2018 г.

EQUATIONS OF CONVOLUTION TYPE WITH RANDOM DATA

V.I. Zalyapin, E.V. Kharitonova

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: zaliapinvi@susu.ru

The possibility of using the Laplace transform to solve integral equations of convolution type with imprecise initial data is being discussed. Theoretically, the possibility of reducing the integral equation to an algebraic equation should greatly simplify the procedure for its solution. However, the measurement errors present in the actual measuring process cause the need to filter the interference in the frequency domain. Assuming that measurement errors can be described with a stationary random process with zero mean (the absence of systematic measurement errors) and a given correlation function, the main characteristics of the error in the signal under regeneration are obtained.

It is shown that technically, numerical implementation of the Laplace method, connected with the restoration of the Laplace original from its image, significantly complicates the procedure of its regularization due to impossibility of using the Mellin–Bromwich inversion formula.

Keywords: equations of convolution type; Laplace transform; regularization.

References

1. Verlan' A.F., Sizikov V.S. *Integral'nye uravneniya: metody, algoritmy i programmy. Spravochnoe posobie* (Integral equations: Methods, algorithms and programs. Reference manual). Kiev, Naukova dumka Publ., 1986, 542 p. (in Russ.).
2. Tikhonov A.N., Arsenin V.Ya. *Metody resheniya nekorrektnykh zadach* (Methods for solving ill-posed problems). Moscow, Nauka Publ., 1986, 286 p. (in Russ.).
3. Ivanov V.K., Vasin V.V., Tanana V.P. *Teoriya lineynykh nekorrektnykh zadach i eye prilozheniya* (The theory of linear ill-posed problems and its applications). Moscow, Nauka Publ., 1978, 206 p. (in Russ.).
4. Ditkin V.A., Prudnikov A.P. *Operatsionnoe ischislenie* (Operational calculus). Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1975, 407 p. (in Russ.).
5. Gikhman I.I., Skorokhod A.V. *Vvedenie v teoriyu sluchaynykh protsessov* (Introduction to the theory of random processes). Moscow, Nauka Publ., 1977, 567 p. (in Russ.).
6. Bateman H., Erdelyi A. *Tables of integral transforms. Vol. I*. New York–Toronto–London, McGrawhill, 1954, 391 p.
7. Ryabov V.M. *Chislennoe obrashchenie preobrazovaniya Laplasa* (Numerical inversion of the Laplace transform). Sankt-Peterburg, Izd. dom Sankt-Peterburgskogo gos. un-ta Publ., 2013, 185 p. (in Russ.).
8. Krylov V.I., Skoblya N.S. *Metody priblizhennogo preobrazovaniya Fur'e i obrashchenie preobrazovaniya Laplasa* (Methods for the approximate Fourier transform and the inversion of the Laplace transform). Moscow, Nauka Publ., 1974, 223 p. (in Russ.).

Received November 22, 2018

CALCULATION OF DISCRETE SEMI-BOUNDED OPERATORS' EIGENVALUES WITH LARGE NUMBERS

S.I. Kadchenko¹, G.A. Zakirova², L.S. Ryazanova¹, O.A. Torshina¹

¹ Magnitogorsk State Technical University of G.I. Nosova, Magnitogorsk, Russian Federation

² South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: kadchenko@masu.ru

In previous works of the article's authors on development of the Galerkin method, linear formulas for calculating the approximate eigenvalues of discrete lower semi-bounded operators have been obtained. The formulas allow calculating the eigenvalues of the specified operators of any number, regardless of whether the eigenvalues of the previous numbers are known or not. At that, it is possible to calculate the eigenvalues with large numbers when application of the Galerkin method is becoming difficult. It is shown that eigenvalues of small numbers of various boundary-value problems, generated by discrete lower semi-bounded operators and calculated by linear formulas and by the Galerkin method, are in a good conformity.

In this paper we use linear formulas to calculate approximate eigenvalues with large numbers of discrete lower semi-bounded operators. Results of calculation of eigenvalues by linear formulas and by known asymptotic formulas for two spectral problems are given. Comparison of the results of calculations of the approximate eigenvalues shows that they almost coincide for sufficiently large numbers. This proves the fact that linear formulas can be used for the considered spectral problems and sufficiently large numbers of eigenvalues.

Keywords: spectral problem; discrete operators; semi-bounded operators; eigenvalues and eigenfunctions of an operator; Galerkin method.

Introduction

It is known that the spectrum of a discrete operator consists of isolated points that have no limit points other than infinity. Moreover, each eigenvalue of a discrete operator has finite multiplicity.

Let L be a discrete semi-bounded from below operator, defined in the separable Hilbert space H . Its eigenvalues μ are determined by finding non-trivial solutions of the equation:

$$Lu = \mu u, \quad (1)$$

which satisfies the given homogeneous boundary conditions. Enumerate them in order of increasing values of eigenvalues, taking into account the multiplicity $\{\mu_n\}_{n=1}^{\infty}$.

To find the eigenvalues of the operator L we use the Galerkin method. Consider a sequence $\{H_n\}_{n=1}^{\infty}$ of finite dimensional spaces $H_n \subseteq H$, which is complete in H . Suppose, that the orthonormal basis of space H_n is known and consists of functions $\{\phi_k\}_{k=1}^n$. Wherein the functions ϕ_k must satisfy all boundary conditions of the problem. Following the Galerkin method, we will find the approximate solution of the spectral problem (1) in the form:

$$u_n = \sum_{k=1}^n a_k(n) \phi_k. \quad (2)$$

The following theorems were proved in [1].

Theorem 1. *Let L be a discrete semi-bounded from below operator acting in a separable Hilbert space H . If the system of coordinate functions $\{\phi_k\}_{k=1}^n$ is a basis in the space H , then the Galerkin method applied to the problem of finding the eigenvalues of the spectral problem (1), constructed on this system of functions, converges.*

Theorem 2. *Let L be a discrete semi-bounded from below operator acting in a separable Hilbert space H . If the system of coordinate functions $\{\phi_k\}_{k=1}^n$ is an orthonormal basis in the space H , then*

$$\tilde{\mu}_n(n) = (L\phi_n, \phi_n) + \delta_n, \quad (3)$$

where $\delta_n = \sum_{k=1}^{n-1} [\tilde{\mu}_k(n-1) - \tilde{\mu}_k(n)]$, $\tilde{\mu}_k(n)$ is the Galerkin approximation of order n to the corresponding eigenvalues μ_k of the operator L .

Formulas (3) allow, as shown in [1], to calculate the approximate eigenvalues of discrete semi-bounded operators with high computational efficiency. Unlike classical methods, they drastically reduce the amount of computation, solve the problem of finding the eigenvalues of any matrices of high order. Also formulas (3) allows to find eigenvalues regardless of whether know eigenvalues with lower numbers or not and solve the problem of calculating all necessary points of the spectrum of discrete semi-bounded operators.

Numerous eigenvalue calculations $\tilde{\mu}_n$ of boundary problems generated by discrete semi-bounded from below operators for $n \leq 50$ calculated by formulas (3) and the Galerkin method are in good agreement [1].

In this work, for further verification of the developed methodology for calculating the eigenvalues of discrete semi-bounded operators using formulas (3), we compare the results of their calculation using these formulas with the calculations using known asymptotic formulas for the following spectral problems.

1. Asymptotic formulas for the eigenvalues of the spectral problems under consideration

Consider the classical spectral problem of the form:

$$-y''(x) + q(x)y(x) = \mu y(x), \quad \mu = \lambda^2 \text{ or } \mu = S^2, \quad 0 < x < \pi \quad (4)$$

with boundary conditions

$$y(0) = 0, \quad y(\pi) = 0, \quad (5)$$

or

$$y(0) = 0, \quad y'(\pi) - hy(\pi) = 0 \quad (6)$$

with the requirement that the potential $q(x)$, satisfying the condition:

$$\int_0^\pi x|q(x)|dx < \infty.$$

In the thesis of Z.M. Gasimov [2] it was shown, that for eigenvalues μ_n of spectral problems (4), (5) and (4), (6) the following asymptotic formulas:

$$\mu_n = \lambda_n^2, \quad \lambda_n = n + \frac{1}{\pi n} \int_0^\pi q(t) \sin^2(nt) dt + O(r_n^2), \quad (7)$$

$$\mu_n = S_n^2, \quad S_n = n - 0,5 - \frac{h}{\pi(n-0,5)} + \frac{1}{\pi(n-0,5)} \int_0^\pi q(t) \sin^2[(n-0,5)t] dt + O(\tilde{r}_n^2) \quad (8)$$

are true respectively. Here:

$$\tilde{r}_n = \frac{1}{n} + r_n, \quad r_n = \int_0^{2/n} t|q(t)|dt + \frac{1}{n} \int_{1/2n}^\pi |q(t)|dt.$$

To find the approximate eigenvalues of the spectral problem (4), (5) we construct a system of coordinate functions, each function of which is an eigenfunction of the spectral problem

$$-\phi''(x) = \beta\phi(x), \quad 0 < x < \pi, \quad (9)$$

$$\phi(0) = 0, \quad \phi(\pi) = 0.$$

It is not difficult to show, that the spectral problem (9) has a set of eigenvalues $\{n^2\}_{n=1}^\infty$, which corresponds to an orthogonal system of eigenfunctions $\{C_n \sin(nx)\}_{n=1}^\infty$. Constants C_n are found from the normalization conditions.

To find the approximate eigenvalues of the spectral problem (4), (6) we construct a system of coordinate functions, each function of which is an eigenfunction of the spectral problem:

$$\begin{aligned}
 -\phi''(x) &= \gamma\phi(x), \quad 0 < x < \pi, \\
 \phi(0) &= 0, \quad \phi'(\pi) - h\phi(\pi) = 0.
 \end{aligned}
 \tag{10}$$

The set of eigenvalues $\{\gamma_n\}_{n=1}^{\infty}$ of the spectral problem (10) has no finite limit points. All the eigenvalues are real, non-negative, simple. They are the roots of the transcendental equation

$$\sqrt{\gamma} \cos(\pi\sqrt{\gamma}) - h \sin(\pi\sqrt{\gamma}) = 0,
 \tag{11}$$

and the corresponding system of eigenfunctions is orthogonal and have the form $\{C_n \sin(\sqrt{\gamma_n}x)\}_{n=1}^{\infty}$. Constants C_n are found from the normalization conditions.

In case you need to find the eigenvalue γ_n with a sufficiently large number it is difficult to use the transcendental equation (11), because it is necessary to consistently find all the values γ_n with smaller numbers. This leads to a sharp increase in computational calculations. Therefore, in such cases it is necessary to use asymptotic formulas, which can be easily obtained from formulas (8), assuming that $q(t) \equiv 0$:

$$\gamma_n = S_n^2, \quad S_n = n - 0,5 - \frac{h}{\pi(n - 0,5)} + O(\tilde{r}_n^2), \quad \tilde{r}_n = \frac{1}{n}.
 \tag{12}$$

2. Numerical experiments

Denote by $\tilde{\mu}_n$ the approximate eigenvalues of spectral problems (4), (5) and (4), (6), found by the Galerkin method, by $\hat{\mu}_n$ the eigenvalues found by formulas (3), by $\bar{\mu}_n$ the eigenvalues found by asymptotic formulas (7) or (8). In all the above calculations it was assumed that $\delta_n = 0$.

In tables 1 and 2 the eigenvalues of problem (4), (5), found by formulas (3), and asymptotic formulas (7) with potential $q(x) = x^2 - 5x + 13 - \sin(6x) + 2e^x$ are given.

Table 1

n	$\tilde{\mu}_n$	$\hat{\mu}_n$	$\bar{\mu}_n$	$ \tilde{\mu}_n - \bar{\mu}_n $	$ \hat{\mu}_n - \bar{\mu}_n $
12	166,712	166,503	167,382	$6,705 \cdot 10^{-1}$	$8,792 \cdot 10^{-1}$
13	191,685	191,507	192,257	$5,719 \cdot 10^{-1}$	$7,494 \cdot 10^{-1}$
14	218,663	218,511	219,157	$4,935 \cdot 10^{-1}$	$6,463 \cdot 10^{-1}$
15	247,646	247,513	248,076	$4,302 \cdot 10^{-1}$	$5,632 \cdot 10^{-1}$
16	278,632	278,515	279,010	$3,784 \cdot 10^{-1}$	$4,951 \cdot 10^{-1}$
17	311,620	311,517	311,956	$3,354 \cdot 10^{-1}$	$4,386 \cdot 10^{-1}$
18	346,611	346,519	346,910	$2,993 \cdot 10^{-1}$	$3,913 \cdot 10^{-1}$
19	383,602	383,520	383,871	$2,687 \cdot 10^{-1}$	$3,512 \cdot 10^{-1}$
20	422,595	422,521	422,838	$2,426 \cdot 10^{-1}$	$3,170 \cdot 10^{-1}$
...
43	1871,545	1871,529	1871,598	$5,261 \cdot 10^{-2}$	$6,863 \cdot 10^{-2}$
44	1958,544	1958,529	1958,595	$5,025 \cdot 10^{-2}$	$6,554 \cdot 10^{-2}$
45	2047,544	2047,529	2047,592	$4,804 \cdot 10^{-2}$	$6,266 \cdot 10^{-2}$
46	2138,543	2138,529	2138,589	$4,597 \cdot 10^{-2}$	$5,997 \cdot 10^{-2}$
47	2231,543	2231,529	2231,587	$4,404 \cdot 10^{-2}$	$5,744 \cdot 10^{-2}$
48	2326,542	2326,529	2326,584	$4,222 \cdot 10^{-2}$	$5,508 \cdot 10^{-2}$
49	2423,542	2423,529	2423,582	$4,052 \cdot 10^{-2}$	$5,285 \cdot 10^{-2}$
50	2522,541	2522,529	2522,580	$3,892 \cdot 10^{-2}$	$5,076 \cdot 10^{-2}$
51	2623,541	2623,530	2623,578	$3,740 \cdot 10^{-2}$	$4,879 \cdot 10^{-2}$
...
63	3991,538	3991,530	3991,562	$2,448 \cdot 10^{-2}$	$3,197 \cdot 10^{-2}$
64	4118,537	4118,530	4118,561	$2,366 \cdot 10^{-2}$	$3,098 \cdot 10^{-2}$
65	4247,537	4247,530	4247,560	$2,294 \cdot 10^{-2}$	$3,004 \cdot 10^{-2}$
66	4378,537	4378,530	4378,559	$2,208 \cdot 10^{-2}$	$2,913 \cdot 10^{-2}$

End of the Table 1

n	$\tilde{\mu}_n$	$\hat{\mu}_n$	$\bar{\mu}_n$	$ \tilde{\mu}_n - \bar{\mu}_n $	$ \hat{\mu}_n - \bar{\mu}_n $
67	4511,538	4511,530	4511,558	$2,045 \cdot 10^{-2}$	$2,827 \cdot 10^{-2}$
68	4646,539	4646,530	4646,558	$1,849 \cdot 10^{-2}$	$2,744 \cdot 10^{-2}$
69	4783,543	4783,530	4783,557	$1,348 \cdot 10^{-2}$	$2,665 \cdot 10^{-2}$
70	4922,577	4922,530	4922,556	$2,053 \cdot 10^{-2}$	$2,590 \cdot 10^{-2}$
71	5063,898	5063,530	5063,555	$3,426 \cdot 10^{-1}$	$2,517 \cdot 10^{-2}$

Table 2

n	$\hat{\mu}_n$	$\bar{\mu}_n$	$ \hat{\mu}_n - \bar{\mu}_n $
1000	1000022,531	1000022,531	$1,269 \cdot 10^{-4}$
1001	1002023,531	1002023,531	$1,267 \cdot 10^{-4}$
1002	1004026,531	1004026,531	$1,264 \cdot 10^{-4}$
1003	1006031,531	1006031,531	$1,262 \cdot 10^{-4}$
1004	1008038,531	1008038,531	$1,259 \cdot 10^{-4}$
...
10000	100000022,531	100000022,531	$1,269 \cdot 10^{-6}$
10001	100020023,531	100020023,531	$1,267 \cdot 10^{-6}$
10002	100040026,531	100040026,531	$1,264 \cdot 10^{-6}$
10003	100060031,531	100060031,531	$1,268 \cdot 10^{-6}$
10004	100080038,531	100080038,531	$1,268 \cdot 10^{-6}$
...
100000	1000000022,531	1000000022,531	$1,269 \cdot 10^{-8}$
100001	10000200023,531	10000200023,531	$1,269 \cdot 10^{-8}$
100002	10000400026,531	10000400026,531	$1,269 \cdot 10^{-8}$
100003	10000600031,531	10000600031,531	$1,269 \cdot 10^{-8}$
100004	10000800038,531	10000800038,531	$1,269 \cdot 10^{-8}$

Numerical calculations showed that the results of calculations of eigenvalues in three ways are in good agreement. As the number of eigenvalues increases, the difference between them decreases.

The results of calculations for sufficiently large numbers of the eigenvalues of the spectral problem (4), (5) are given in the table 2. The calculation of eigenvalues with such numbers by the Galerkin method causes difficulties due to the large dimensions of the matrices with which you have to work. Therefore, a comparison is made between the approximate eigenvalues found by formulas (3) and the asymptotic formulas (8). For $n > 100\ 000$ the values $\hat{\mu}_n$ and $\bar{\mu}_n$ are almost the same.

In Tables 3 and 4 the approximate eigenvalues of the spectral problem (4), (6) calculated by formulas (3) and asymptotic formulas (8) with $h = 0,5$ and $q(x) = x^3 - 4x + 5 - \cos(3x) + e^x$ are given.

Table 3

n	$\tilde{\mu}_n$	$\hat{\mu}_n$	$\bar{\mu}_n$	$ \tilde{\mu}_n - \bar{\mu}_n $	$ \hat{\mu}_n - \bar{\mu}_n $
8	78,633	78,572	78,742	$1,097 \cdot 10^{-1}$	$1,740 \cdot 10^{-1}$
9	96,619	96,572	96,708	$8,864 \cdot 10^{-2}$	$1,362 \cdot 10^{-1}$
10	116,610	116,572	116,683	$7,314 \cdot 10^{-2}$	$1,114 \cdot 10^{-1}$
11	138,603	138,572	138,665	$6,137 \cdot 10^{-2}$	$9,280 \cdot 10^{-2}$
12	162,598	162,572	162,650	$5,221 \cdot 10^{-2}$	$7,849 \cdot 10^{-2}$
...
36	1338,574	1338,571	1338,581	$6,287 \cdot 10^{-3}$	$9,177 \cdot 10^{-3}$
37	1412,574	1412,571	1412,580	$5,957 \cdot 10^{-3}$	$8,694 \cdot 10^{-4}$
38	1488,574	1488,571	1488,580	$5,653 \cdot 10^{-3}$	$8,248 \cdot 10^{-4}$
39	1566,574	1566,571	1566,579	$5,371 \cdot 10^{-3}$	$7,836 \cdot 10^{-4}$
40	1646,574	1646,571	1646,579	$5,110 \cdot 10^{-3}$	$7,454 \cdot 10^{-3}$
...

End of the Table 3

n	$\tilde{\mu}_n$	$\hat{\mu}_n$	$\bar{\mu}_n$	$ \tilde{\mu}_n - \bar{\mu}_n $	$ \hat{\mu}_n - \bar{\mu}_n $
66	4428,572	4428,571	4428,574	$1,771 \cdot 10^{-3}$	$2,764 \cdot 10^{-3}$
67	4562,573	4562,571	4562,574	$1,561 \cdot 10^{-3}$	$2,683 \cdot 10^{-3}$
68	4698,573	4698,571	4698,574	$1,104 \cdot 10^{-3}$	$2,605 \cdot 10^{-3}$
69	4836,577	4836,571	4836,574	$3,285 \cdot 10^{-3}$	$2,530 \cdot 10^{-3}$
70	4976,588	4976,571	4976,574	$1,422 \cdot 10^{-2}$	$2,459 \cdot 10^{-3}$

Table 4

n	$\hat{\mu}_n$	$\bar{\mu}_n$	$ \hat{\mu}_n - \bar{\mu}_n $
1000	99906,571	99906,571	$1,221 \cdot 10^{-5}$
1001	1001006,571	1001006,571	$1,219 \cdot 10^{-5}$
1002	1003008,571	1003008,571	$1,216 \cdot 10^{-5}$
1003	1005012,571	1005012,571	$1,214 \cdot 10^{-5}$
1004	1007018,571	1007018,571	$1,211 \cdot 10^{-5}$
...
10000	99990006,571	99990006,571	$1,220 \cdot 10^{-6}$
10001	100010006,571	100010006,571	$1,220 \cdot 10^{-6}$
10002	100030008,571	100030008,571	$1,219 \cdot 10^{-6}$
10003	100050012,571	100050012,571	$1,219 \cdot 10^{-6}$
10004	100070018,571	100070018,571	$1,219 \cdot 10^{-6}$
...
100000	9999900006,571	9999900006,571	$1,220 \cdot 10^{-9}$
100001	10000100006,571	10000100006,571	$1,220 \cdot 10^{-9}$
100002	10000300008,571	10000300008,571	$1,220 \cdot 10^{-9}$
100003	10000500012,571	10000500012,571	$1,220 \cdot 10^{-9}$
100004	10000700018,571	10000700018,571	$1,220 \cdot 10^{-9}$

The results of calculations of the approximate eigenvalues of the spectral problem (4), (6), given in Tables 3 and 4 are in good agreement.

Conclusion

Comparison of the results of calculations of the approximate eigenvalues of the spectral problems (4), (5) and (4), (6), carried out according to formulas (3) and asymptotic formulas (7) and (8), show that for sufficiently large numbers the results are almost the same.

In previous papers in the development of the Galerkin method linear formulas for calculating the approximate eigenvalues of discrete semibounded from below operators were obtained by the authors of the article. Formulas allow you to calculate the eigenvalues of the specified operators with any of their numbers, regardless of whether the eigenvalues with the previous numbers are known or not. In this case, it is possible to calculate the eigenvalues with large numbers, when the application of the Galerkin method becomes difficult. To test the new method for calculating the eigenvalues of discrete semi-bounded operators, computational experiments were conducted, which showed that the eigenvalues of small numbers of various boundary-value problems calculated by linear formulas and the Galerkin method are in good agreement. For further verification of the obtained linear formulas, it became necessary to find out how they behave when calculating eigenvalues with large numbers when asymptotic formulas begin to work. In this paper we use linear formulas to calculate approximate eigenvalues with large numbers of discrete semi-bounded from below operators. The results of calculating the eigenvalues by linear formulas and by known asymptotic formulas for two spectral problems are given. Comparison of the results of the calculations of the approximate eigenvalues show that for sufficiently large numbers they almost coincide. This confirms the fact that linear formulas can be used for the considered spectral problems and sufficiently large numbers of eigenvalues.

In the spectral problems considered, linear formulas give the same result as asymptotic formulas. This confirms the possibility of applying linear formulas to the approximate calculation of any eigenvalue of a discrete semi-bounded operator. By virtue of the linearity of formulas, finding eigenvalues becomes computationally efficient compared to any classical method.

References

1. Kadchenko S.I., Zakirova G.A. A numerical method for inverse spectral problems. *Bulletin of South Ural State University. Series of "Mathematical Modelling, Programming & Computer Software"*, 2015, Vol. 8, no. 3, pp. 116–126. DOI: 10.14529/mmp150307

2. Gasyimov Z.M. *Reshenie obratnoy zadachi po dvum spektram dlya singulyarnogo uravneniya Shturma–Liuvillya: dis. ... kand. fiz.-mat. nauk* (Solution of an inverse problem by two spectra for the singular Sturm–Liouville equation. Cand. phys. and math. sci. diss.), Baku, 1992, 121 p. (in Russ.).

Received December 10, 2018

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2019, vol. 11, no. 1, pp. 10–15

УДК 519.642.8

DOI: 10.14529/mmph190102

ВЫЧИСЛЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ С БОЛЬШИМИ НОМЕРАМИ ДИСКРЕТНЫХ ПОЛУОГРАНИЧЕННЫХ ОПЕРАТОРОВ

С.И. Кадченко¹, Г.А. Закирова², Л.С. Рязанова¹, О.А. Торшина¹

¹ Магнитогорский государственный технический университет, г. Магнитогорск,
Российская Федерация

² Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация
E-mail: kadchenko@masu.ru

В предыдущих работах авторов статьи в развитии метода Галеркина получены линейные формулы для вычислений приближенных собственных значений дискретных полуограниченных снизу операторов. Формулы позволяют вычислять собственные значения указанных операторов любого номера независимо от того, известны ли собственные значения с предшествующими номерами или нет. При этом можно вычислять собственные значения и с большими номерами, когда применение метода Галеркина становится затруднительным. Показано, что собственные значения небольших номеров различных краевых задач, порожденных дискретными полуограниченными снизу операторами, вычисленные по линейным формулам и методом Галеркина, хорошо согласуются.

В работе применены линейные формулы для вычисления приближенных собственных значений с большими номерами дискретных полуограниченных снизу операторов. Приведены результаты вычислений собственных значений по линейным формулам и по известным асимптотическим формулам для двух спектральных задач. Сравнение результатов проведенных вычислений приближенных собственных значений показывает, что для достаточно больших номеров они практически совпадают. Это подтверждает тот факт, что для рассматриваемых спектральных задач и достаточно больших номеров собственных значений можно использовать линейные формулы.

Ключевые слова: спектральная задача; дискретные операторы; полуограниченные операторы; собственные числа и собственные функции оператора; метод Галеркина.

Литература

1. Kadchenko, S.I. A numerical method for inverse spectral problems / S.I. Kadchenko, G.A. Zakirova // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2015. – Т. 8, № 3. – С. 116–126.

2. Гасымов, З.М. Решение обратной задачи по двум спектрам для сингулярного уравнения Штурма–Лиувилля: дис. ... канд. физ.-мат. наук / З.М. Гасымов. – Баку, 1992. – 121 с.

Поступила в редакцию 10 декабря 2018 г.

О ВЫЧИСЛЕНИИ СОБСТВЕННЫХ ЧИСЕЛ И ФУНКЦИЙ ДИСКРЕТНОГО ОПЕРАТОРА С ЯДЕРНОЙ РЕЗОЛЬВЕНТОЙ, ВОЗМУЩЕННОГО ОГРАНИЧЕННЫМ

А.И. Седов

Магнитогорский государственный технический университет, г. Магнитогорск,
Российская Федерация
E-mail: sedov-ai@yandex.ru

Рассматривается задача вычисления собственных чисел и собственных функций возмущенного линейного самосопряженного оператора с ядерной резольвентой, возмущенного ограниченным оператором, действующим в сепарабельном гильбертовом пространстве. Для решения задачи применяется метод регуляризованных следов предложенный В.А. Садовничим и В.В. Дубровским и развитый их учениками. Классический метод регуляризованных следов для повышения точности вычислений предполагает вычисление нескольких членов ряда. Сложность вычисления каждого последующего члена ряда нелинейно возрастает. Предлагаемое в работе изменение классического метода приводит к другому ряду, скорость сходимости которого значительно больше, что позволяет уменьшить количество членов ряда используемых в вычислениях. Развивая предложенный метод, в работе приводятся формулы для вычисления коэффициентов Фурье разложения возмущенных собственных функций в ряд по невозмущенным. Для вычисления первых собственных функций используется обратная матрица Вандермонда. Приводятся оценки остатков рядов.

Ключевые слова: собственные числа; собственные функции; ядерный оператор; возмущенный оператор.

Введение

Рассмотрим дискретный самосопряженный оператор T с ядерной резольвентой и линейный ограниченный оператор P , действующие в гильбертовом пространстве H . Для простоты изложения предположим, что оператор T – положительный с простым спектром $\sigma(T) = \{\lambda_n\}_{n=1}^{\infty}$. Собственные числа λ_n оператора T занумеруем в порядке возрастания. Обозначим через $\sigma(T) = \{\mu_n\}_{n=1}^{\infty}$ собственные числа оператора $T + P$, занумерованные в порядке возрастания действительных частей с учетом алгебраической кратности.

Можно показать (см., например [1]), что если существует номер N такой, что для любых $n \geq N$ выполняется неравенство $q_n = \frac{2\|P\|}{\lambda_{n+1} - \lambda_n} < 1$, то первые N собственных чисел $\{\mu_n\}_{n=1}^N$ оператора $T + P$ являются решениями системы N уравнений:

$$\sum_{k=1}^N \mu_k^s = \sum_{k=1}^N \lambda_k^s + \sum_{k=1}^{t_N} \alpha_k^{(s)}(N) + \varepsilon_{t_N}^{(s)}(N), \quad t_N \in N, \quad s = \overline{1, N}. \quad (1)$$

Здесь $\alpha_k^{(s)}(N) = \frac{(-1)^k s}{2\pi i k} Sp \int_{\Gamma_N} \lambda^{s-1} [PR_0(\lambda)]^k d\lambda$ – поправки теории возмущений,

$\varepsilon_{t_N}^{(s)}(N) = \sum_{k=t_N+1}^{\infty} \alpha_k^{(s)}(N)$, Γ_N – окружность радиуса $\rho_N = \frac{\lambda_N + \lambda_{N+1}}{2}$ с центром в начале координат, R_0 резольвента оператора T .

Правые части уравнений (1) явно выражаются через собственные числа и собственные функции невозмущенного оператора T и возмущающий оператор P . В.А. Садовничий и В.В. Дубровский в работе [2] высказали идею нового метода вычисления собственных чисел возмущен-

ных операторов с помощью системы (1). Серия работ В.А. Садовниченко, В.В. Дубровского, С.И. Кадченко, В.Ф. Кравченко, И.И. Кинзиной [1, 3–9] привела к созданию и обоснованию метода вычисления собственных чисел возмущенного оператора, а также созданию численных алгоритмов, реализующих данный метод. Идея метода состоит в следующем. Используя теорию симметрических многочленов и формулы Ньютона, нахождение корней системы (1) сводится к нахождению корней многочлена степени N , коэффициенты которого могут быть найдены со сколь угодно большой точностью. Поэтому погрешность вычисления N первых собственных чисел μ_n зависит от того, как точно вычислены правые части системы (1). Несмотря на приведенные в работах [1, 4, 6–9] численные примеры, найденные там оценки остатков

$$\varepsilon_{t_N}^{(s)}(N) \approx sN\rho_N^s \frac{q_N^{t_N+1}}{1-q_N} \approx N\lambda_N^s q_N^{t_N+1},$$

нельзя назвать хорошими. Добиться малости $\varepsilon_{t_N}^{(s)}(N)$ возможно только за счет увеличения степени $t_N + 1$ числа $q_N < 1$, что в свою очередь ведет к увеличению числа поправок теории возмущения $\alpha_k^{(s)}$, которые приходится вычислять. Сложность вычисления поправок нелинейно растет с увеличением номера поправки, что значительно увеличивает трудности практического применения метода и ведет к накоплению ошибок округления.

В представленной работе делается попытка уменьшить оценки остатков рядов.

1. Вычисление собственных чисел

Введем обозначения: $r_n = \frac{1}{2} \min_{k \neq n} \{ |\lambda_n - \lambda_k| \}$, $\gamma_n = \{ \lambda : |\lambda - \lambda_n| = r_n \}$, $\Gamma_n = \{ \lambda : |\lambda| = \lambda_n + r_n \}$, $R_0(\lambda) = (T - \lambda E)^{-1}$, $R(\lambda) = (T + P - \lambda E)^{-1}$, $r = \inf_{n \geq N} r_n$, $\Omega_N = \{ \lambda : |\lambda| > \lambda_N + r_N \} \cap \bigcap_{n > N} \{ |\lambda_n - \lambda| > r_n \}$, $\rho(T)$ – резольвентное множество.

Приведем известные, но необходимые для целостного изложения результаты в виде нескольких лемм.

Лемма 1. Если $\|P\| < r$, то $T + P$ – дискретный и справедливо разложение в сходящийся по норме ряд

$$R(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k R_0(\lambda) (PR_0(\lambda))^k, \quad \lambda \in \Omega_N. \quad (2)$$

Обозначим собственные числа оператора $T + P$, через μ_n занумерованные в порядке возрастания действительных частей с учетом алгебраической кратности.

Лемма 2. [10] Если $\|P\| < r_N$, то внутри контура Γ_N будет находиться одинаковое количество собственных чисел λ_n и μ_n (с учетом кратности), $n \leq N$. Если $\|P\| < r_n$, то внутри контура γ_n будет находиться одинаковое количество собственных чисел λ_n и μ_n (с учетом кратности).

Интегрированием по частям доказывается следующая:

Лемма 3. Если g – однозначная аналитическая функция, γ – замкнутый контур, то имеет место равенство:

$$Sp \int_{\gamma} g(\lambda) R_0(\lambda) (PR_0(\lambda))^k d\lambda = -\frac{1}{k} Sp \int_{\gamma} g'(\lambda) (PR_0(\lambda))^k d\lambda, \quad k \in N.$$

Обозначим через v_n и u_n ортонормированные в H собственные функции операторов T и $T + P$, соответствующие собственным числам λ_n и μ_n , и перейдем к доказательству основного результата.

Теорема 1. Если $\|P\| < r_N$, то первые N собственных чисел μ_n оператора $T + P$ являются решениями системы уравнений:

$$\sum_{l=1}^N \frac{1}{(z - \mu_l)^s} = \sum_{l=1}^N \frac{1}{(z - \lambda_l)^s} + \sum_{l=1}^N \frac{s(Pv_l, v_l)}{(z - \lambda_l)^{s+1}} + \sum_{k=2}^{M-1} \alpha_k^{(s)}(N) + \varepsilon_s, \quad s = \overline{1, N},$$

где $\alpha_k^{(s)}(N) = \frac{(-1)^k s}{2\pi i k} Sp \int_{\Gamma_N} \frac{1}{(\lambda - z)^{s+1}} [PR_0(\lambda)]^k d\lambda$ – поправки теории возмущений, z некоторое фиксированное число, ε_s – зависящие от z и M сколь угодно малые числа.

Доказательство. Умножим ряд (2) на число $-\frac{1}{2\pi i (z - \lambda)^s}$, $s = \overline{1, N}$, проинтегрируем по контуру Γ_N и найдем след. Число $z > \lambda_N + r_N$ выберем позднее. Получим:

$$-\frac{1}{2\pi i} Sp \int_{\Gamma_N} \frac{R(\lambda)}{(\lambda - z)^s} d\lambda = -\frac{1}{2\pi i} Sp \int_{\Gamma_N} \frac{1}{(\lambda - z)^s} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k R_0(\lambda) [PR_0(\lambda)]^k d\lambda.$$

Вычислим интеграл в левой части и первые слагаемые в правой части. Используя леммы 1 и 2, можно показать, что оператор $\int_{\Gamma_N} R(\lambda) d\lambda$ является проектором на пространство, натянутое на

линейную оболочку $\{u_n\}_{n=1}^N$. Имеем

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\pi i} Sp \int_{\Gamma_N} \frac{R(\lambda)}{(z - \lambda)^s} d\lambda &= -\frac{1}{2\pi i} \sum_{l=1}^N \left(\int_{\Gamma_N} \frac{R(\lambda)}{(z - \lambda)^s} d\lambda u_l, u_l \right) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{l=1}^N \left(\int_{\Gamma_N} \frac{R(\lambda) u_l}{(z - \lambda)^s} d\lambda, u_l \right) = \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \sum_{l=1}^N \left(\int_{\Gamma_N} \frac{u_l}{(z - \lambda)^s (\mu_l - \lambda)} d\lambda, u_l \right) = -\sum_{l=1}^N (u_l, u_l) \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_N} \frac{1}{(z - \lambda)^s (\mu_l - \lambda)} d\lambda = \sum_{l=1}^N \frac{1}{(z - \mu_l)^s}. \end{aligned}$$

Аналогично, при $k = 0$:

$$-\frac{1}{2\pi i} Sp \int_{\Gamma_N} \frac{R_0(\lambda)}{(z - \lambda)^s} d\lambda = \sum_{l=1}^N \frac{1}{(z - \lambda_l)^s}.$$

При $k = 1$, используя лемму 3, имеем:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} Sp \int_{\Gamma_N} \frac{R_0(\lambda) PR_0(\lambda)}{(z - \lambda)^s} d\lambda &= -\frac{s}{2\pi i} Sp \int_{\Gamma_N} \frac{PR_0(\lambda)}{(z - \lambda)^{s+1}} d\lambda = \\ &= -\frac{s}{2\pi i} \sum_{l=1}^N (Pv_n, v_n) \int_{\Gamma_N} \frac{1}{(z - \lambda)^{s+1} (\lambda_l - \lambda)} d\lambda = \sum_{l=1}^N \frac{s(Pv_n, v_n)}{(z - \lambda_l)^{s+1}}. \end{aligned}$$

Оценим M -й остаток ряда.

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2\pi i} Sp \int_{\Gamma_N} \frac{1}{(z - \lambda)^s} \sum_{k=M}^{\infty} (-1)^k R_0(\lambda) (PR_0(\lambda))^k d\lambda \right| &= \left| \frac{s}{2\pi i} Sp \int_{\Gamma_N} \frac{1}{(z - \lambda)^{s+1}} \sum_{k=M}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} (PR_0(\lambda))^k d\lambda \right| \leq \\ &\leq \frac{s}{2\pi} \int_{\Gamma_N} \frac{1}{|z - \lambda|^{s+1}} \sum_{k=M}^{\infty} \frac{1}{k} \|PR_0(\lambda)\|^k |d\lambda| \leq \frac{s}{2\pi} \frac{1}{(z - \lambda_N - r_N)^{s+1}}; \text{ длина } \Gamma_N \sum_{k=M}^{\infty} \frac{1}{k} \max_{\lambda \in \Gamma_N} \|PR_0(\lambda)\|^k \leq \\ &\leq \frac{s(\lambda_N + r_N)}{(z - \lambda_N - r_N)^{s+1}} \frac{q_N^M}{1 - q_N^M}. \end{aligned}$$

За счет выбора числа M и, главным образом, числа z погрешности

$$\varepsilon_s \leq \frac{s(\lambda_N + r_N)}{(z - \lambda_N - r_N)^{s+1}} \frac{q_N^M}{1 - q_N^M}$$

можно сделать сколь угодно малыми. Доказательство закончено.

Заметим, что если ввести обозначения $\beta_n = \frac{1}{z - \mu_n}$, $\eta_n = \frac{1}{z - \lambda_n}$, то система переписывается в виде (1)

$$\sum_{l=1}^N \beta_l^s = \sum_{l=1}^N \eta_l^s + \sum_{l=1}^N s(Pv_n, v_n) \eta_l^{s+1} + \sum_{k=2}^{M-1} \alpha_k^{(s)}(N) + \varepsilon_s.$$

Обоснование существования и единственности решения данной системы, а также алгоритмы поиска решения можно найти в работах [1, 3–8].

Предположим далее $n > N$.

Теорема 2. Если $\|P\| < r_n$ и λ_n однократное, то собственное число μ_n можно вычислить по формуле

$$\beta_n^s = \eta_n^s + s(Pv_n, v_n) \eta_n^{s+1} + \sum_{k=2}^{M-1} \alpha_k^{(s)}(n) + \varepsilon_s,$$

где $\alpha_k^{(s)}(n) = \frac{(-1)^k s}{2\pi i k} \oint_{\gamma_n} \frac{1}{(\lambda - z)^{s+1}} [PR_0(\lambda)]^k d\lambda$, z – некоторое фиксированное число, ε_s – зависящее от z сколь угодно малое число.

Доказательство аналогично теореме 2. Умножим ряд (2) на $-\frac{1}{2\pi i (z - \lambda)^s}$, проинтегрируем

по контуру γ_n и найдем след. Числа $z > \lambda_n + r_n$, $M \geq 3$ и $s \in N$ выберем таким образом, чтобы погрешности

$$\varepsilon_s \leq \frac{sr_n}{M(z - \lambda_n - r_n)^{s+1}} \frac{q_n^M}{1 - q_n^M},$$

были достаточно малы.

Обобщение на случай кратного спектра можно сделать аналогично [9].

2. Вычисление собственных функций возмущенного оператора

Из леммы 2 и введенных обозначений следует, что внутри контура γ_n находятся только числа λ_n и μ_n , а внутри контура Γ_N – числа λ_k , μ_k , $k = \overline{1, N}$. Пусть сначала $n \leq N$. Разложим собственные функции v_n в ряд Фурье по ортонормированному базису $\{u_n\}$.

$$v_n = \sum_{k=1}^{\infty} c_{nk} u_k, \quad c_{nk} = (v_n, u_k). \quad (3)$$

Умножим равенство на $\frac{1}{(z - \lambda)^m}$, $z > \lambda_{N+1}$, подействуем проектором $-\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_N} R(\lambda) d\lambda$ и получим:

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_N} \frac{R(\lambda) v_n}{(z - \lambda)^m} d\lambda = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{k=1}^{\infty} c_{nk} \int_{\Gamma_N} \frac{R(\lambda) u_k}{(z - \lambda)^m} d\lambda. \quad (4)$$

Преобразуем правую часть равенства (4) следующим образом:

$$-\frac{1}{2\pi i} \sum_{k=1}^{\infty} c_{nk} \int_{\Gamma_N} \frac{R(\lambda) u_k}{(z - \lambda)^m} d\lambda = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{k=1}^{\infty} c_{nk} u_k \int_{\Gamma_N} \frac{1}{(z - \lambda)^m (\mu_k - \lambda)} d\lambda = \sum_{k=1}^N \frac{c_{nk} u_k}{(z - \mu_k)^m}.$$

Для вычисления левой части (4) воспользуемся представлением (2):

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_N} \frac{R(\lambda) v_n}{(z - \lambda)^m} d\lambda = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_N} \frac{1}{(z - \lambda)^{m+k}} R_0(\lambda) (PR_0(\lambda))^k v_n d\lambda. \quad (5)$$

Оценим s -й остаток ряда (5):

$$\left\| \sum_{k=s}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_N} \frac{1}{(z-\lambda)^m} R_0(\lambda) (PR_0(\lambda))^k v_n d\lambda \right\|_H \leq \frac{1}{2\pi} \sum_{k=s}^{\infty} \int_{\Gamma_N} \frac{\|R_0(\lambda)P\|^k}{|z-\lambda|^m |\lambda_n-\lambda|} \|v_n\|_H |d\lambda| \leq$$

$$\frac{\lambda_N+r}{(\lambda_N+r-\lambda_n)(z-\lambda_N-r)^m} \sum_{k=s}^{\infty} \max_{\lambda \in \Gamma_N} \|R_0(\lambda)P\|^k = \frac{\lambda_N+r}{(\lambda_N+r-\lambda_n)(z-\lambda_N-r)^m} \frac{q^s}{1-q},$$

где $q = \frac{\|P\|}{r} < 1$. Таким образом, при некотором s , а также за счет выбора z , можно получить достаточно малую оценку. Пусть, например, такая оценка получена при $s=2$. Вычислим два первых члена ряда (5). При $k=0$ имеем

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_N} \frac{R_0(\lambda)v_n}{(z-\lambda)^m} d\lambda = -\frac{v_n}{2\pi i} \int_{\Gamma_N} \frac{1}{(z-\lambda)^m (\lambda_n-\lambda)} d\lambda = \frac{v_n}{(z-\lambda_n)^m}.$$

При $k=1$ воспользуемся представлением резольвенты в виде ряда [11, гл. 5, § 3]:

$$R_0(\lambda) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\cdot, v_k)v_k}{\lambda_k - \lambda}.$$

Тогда:

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_N} \frac{R_0(\lambda)PR_0(\lambda)v_n}{(z-\lambda)^m} d\lambda = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_N} \frac{R_0(\lambda)Pv_n}{(z-\lambda)^m (\lambda_n-\lambda)} d\lambda =$$

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_N} \frac{1}{(z-\lambda)^m (\lambda_n-\lambda)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(Pv_n, v_k)v_k}{\lambda_k - \lambda} d\lambda =$$

$$\frac{m(Pv_n, v_n)v_n}{(z-\lambda_n)^{m+1}} + \sum_{\substack{k \leq N, \\ k \neq n}} \left(\frac{(Pv_n, v_k)v_k}{(z-\lambda_n)^m (\lambda_n-\lambda_k)} + \frac{(Pv_n, v_k)v_k}{(z-\lambda_k)^m (\lambda_k-\lambda_n)} \right) + \sum_{k > N} \frac{(Pv_n, v_k)v_k}{(z-\lambda_n)^m (\lambda_n-\lambda_k)}.$$

Подставляя все вычисленные интегралы в (4), получим:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{c_{nk}u_k}{(z-\mu_k)^m} = \frac{v_n}{(z-\lambda_n)^m} +$$

$$\frac{m(Pv_n, v_n)v_n}{(z-\lambda_n)^{m+1}} + \sum_{\substack{k \leq N, \\ k \neq n}} \left(\frac{(Pv_n, v_k)v_k}{(z-\lambda_n)^m (\lambda_n-\lambda_k)} + \frac{(Pv_n, v_k)v_k}{(z-\lambda_k)^m (\lambda_k-\lambda_n)} \right) + \sum_{k > N} \frac{(Pv_n, v_k)v_k}{(z-\lambda_n)^m (\lambda_n-\lambda_k)} + R_2^m, \quad (6)$$

где $\|R_2^m\|_H \leq \frac{\lambda_N+r}{(\lambda_N+r-\lambda_n)(z-\lambda_N-r)^m} \frac{q^s}{1-q}$.

Далее **предположим**, что все числа $\mu_n, n \leq N$ различны. Тогда матрица Вандермонда

$$\left(\frac{1}{(z-\mu_k)^m} \right)_{\substack{k=1, N, \\ m=0, N-1}}$$

обратима. Обозначим элементы обратной матрицы через w_{km} . Умножим на

обратную матрицу систему уравнений (6), разрешив ее относительно неизвестных $c_{nk}u_k$.

$$c_{nk}u_k = \sum_{m=0}^{N-1} w_{km} \left[\frac{v_n}{(z-\lambda_n)^m} + \sum_{m=0}^{N-1} \frac{m(Pv_n, v_n)v_n}{(z-\lambda_n)^{m+1}} + \sum_{\substack{k \leq N, \\ k \neq n}} \left(\frac{(Pv_n, v_k)v_k}{(z-\lambda_n)^m (\lambda_n-\lambda_k)} + \frac{(Pv_n, v_k)v_k}{(z-\lambda_k)^m (\lambda_k-\lambda_n)} \right) + \sum_{k > N} \frac{(Pv_n, v_k)v_k}{(z-\lambda_n)^m (\lambda_n-\lambda_k)} + R_2^m \right]. \quad (7)$$

Для нахождения неизвестных коэффициентов c_{nk} умножим скалярно равенство (7) на v_n . Получим:

$$c_{nk}^2 = \sum_{m=0}^{N-1} w_{km} \left(\frac{1}{(z - \lambda_n)^m} + \frac{m(Pv_n, v_n)}{(z - \lambda_n)^{m+1}} + (R_2^m, v_n) \right).$$

Таким образом, все неизвестные ортонормированные собственные функции u_k , $k \leq N$ будут найдены.

Остальные функции u_k , $k > N$ можно находить аналогично, действуя на равенство (3) проектором $-\frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_n} R(\lambda) d\lambda$. В силу леммы (2) внутри контура γ_n будет находиться по одному собственному числу. После преобразований получим аналогичное равенству (6), но более простое представление:

$$c_{nm} u_n = v_n + \sum_{k \neq n} \frac{(Pv_n, v_k) v_k}{\lambda_n - \lambda_k} + R_2,$$

где $\|R_2\|_H \leq \frac{q^2}{1-q}$.

При необходимости можно вычислить не два первых члена ряда (5), а несколько. Однако сложность вычисления каждого следующего члена возрастает.

Литература

1. Кадченко, С.И. Вычисление собственных значений возмущенных дискретных полуограниченных операторов / С.И. Кадченко, И.И. Кинзина // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2006. – Т. 46, № 7. – С. 1265–1272.
2. Дубровский, В.В. К обоснованию метода вычислений собственных чисел дискретного оператора с помощью регуляризованных следов / В.В. Дубровский, В.А. Садовничий // Совместные заседания семинара имени И.Г. Петровского по дифференциальным уравнениям и математическим проблемам физики и Московского математического общества (тринадцатая сессия, 2–5 февраля 1990 г.). – Успехи математических наук. – 1990. – Т. 45, № 4(274). – С. 120.
3. Садовничий, В.А. Замечание об одном новом методе вычисления собственных значений и собственных функций дискретных операторов / В.А. Садовничий, В.В. Дубровский // Тр. семинара им. И.Г. Петровского. – 1994. – № 17. – С. 244–248.
4. Вычисление первых собственных чисел краевой задачи Орра–Зоммерфельда с помощью теории регуляризованных следов / В.В. Дубровский, С.И. Кадченко, В.Ф. Кравченко, В.А. Садовничий // Электромагнитные волны и электронные системы. – 1997. – Т. 2, № 6. – С. 13–19.
5. Вычисление первых собственных чисел дискретного оператора / В.В. Дубровский, С.И. Кадченко, В.Ф. Кравченко, В.А. Садовничий // Электромагнитные волны и электронные системы. – 1998. – Т. 3, № 2. – С. 6–8.
6. Садовничий, В.А. Вычисление первых собственных чисел краевой задачи гидродинамической устойчивости течения Пуазейля в круглой трубе / В.А. Садовничий, В.В. Дубровский, С.И. Кадченко, В.Ф. Кравченко // Дифференциальные уравнения. – 1998. – № 1. – С. 50–53.
7. Кадченко, С.И. Новый метод вычисления собственных чисел спектральной задачи Орра–Зоммерфельда / С.И. Кадченко // Электромагнитные волны и электронные системы. – 2000. – Т. 5, № 6. – С. 4–10.
8. Новый метод приближенного вычисления первых собственных чисел спектральной задачи Орра–Зоммерфельда / В.В. Дубровский, С.И. Кадченко, В.Ф. Кравченко, В.А. Садовничий // Доклады Академии Наук. – 2001. – Т. 378, № 4. – С. 443–445.
9. Кинзина, И.И. Вычисление собственных чисел дискретного самосопряженного оператора, возмущенного ограниченным оператором / И.И. Кинзина // Известия вузов. Математика. – 2008. – № 6. – С. 16–24.
10. Садовничий, В.А. Регуляризованный след ограниченного оператора с ядерной резольвентой / В.А. Садовничий, В.Е. Подольский // Дифференциальные уравнения. – 1999. – Т. 35, № 4. – С. 556–564.
11. Като, Т. Теория возмущений линейных операторов / Т. Като. – М.: Мир, 1972. – 740 с.

Поступила в редакцию 4 января 2019 г.

**ON CALCULATION OF EIGENVALUES AND EIGENFUNCTIONS
OF A DISCRETE OPERATOR WITH A NUCLEAR RESOLVENT PERTURBED
BY A BOUNDED OPERATOR****A.I. Sedov***Magnitogorsk State Technical University of G.I. Nosova, Magnitogorsk, Russian Federation
E-mail: sedov-ai@yandex.ru*

The problem of calculating eigenvalues and eigenfunctions of a perturbed linear self-adjoint operator with a nuclear resolvent, perturbed by a bounded operator operating in a separable Hilbert space, is being considered. In order to solve the problem, the method of regularized traces proposed by V.A. Sadovnichy and V.V. Dubrovsky and developed by their followers is used. The classical method of regularized traces for enhancement of calculations' accuracy assumes calculation of several terms of a series. The complexity of calculation of each subsequent term of a series non-linearly increases. Alteration of the classical method, which is proposed in this work, leads to another series, the rate of convergence of which is significantly higher, which allows decreasing the number of terms of the series that are used for calculation. Developing the proposed method, there are formulas for calculation of Fourier coefficients for expansion of perturbed eigenfunctions in a series by non-perturbed ones provided in the article. Inverse Vandermonde matrix is used for calculation of first eigenfunctions. Assessments of series remainders are given.

Keywords: eigenvalues; eigenfunctions; kernel operator; perturbed operator.

References

1. Kadchenko I. S.I., Kinzina I. Computation of eigenvalues of perturbed discrete semibounded operators. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2006, Vol. 46, no. 7, pp. 1200–1206. DOI: 10.1134/S0965542506070116
2. Dubrovskiy V.V., Sadovnichiy V.A. K obosnovaniyu metoda vychisleniy sobstvennykh chisel diskretnogo operatora s pomoshch'yu regulyazirovannykh sledov (To the substantiation of the method of calculating the eigenvalues of a discrete operator using regularized traces). Joint sessions of the seminar I.G. Petrovsky on differential equations and mathematical problems of physics and the Moscow Mathematical Society (thirteenth session, February 2–5, 1990). *Uspekhi matematicheskikh nauk*, 1990, Vol. 45, no. 4(274), p. 120. (in Russ.).
3. Sadovnichiy V.A., Dubrovskiy V.V. Zamechanie ob odnom novom metode vychisleniya sobstvennykh znacheniy i sobstvennykh funktsiy diskretnykh operatorov (Remark on a new method of calculation eigenvalues and eigenfunctions for discrete operators). *Tr. seminara im. I.G. Petrovskogo* (Proc. the seminar named after I.G. Petrovsky), 1994, no. 17, pp. 244–248. (in Russ.).
4. Dubrovskiy V.V., Kadchenko S.I., Kravchenko V.F., Sadovnichiy V.A. Vychislenie pervykh sobstvennykh chisel kraevoy zadachi Orra–Zommerfel'da s pomoshch'yu teorii regulyazirovannykh sledov (Calculation of the first eigenvalues of the Orr–Sommerfeld boundary value problem using the theory of regularized traces). *Elektromagnitnye volny i elektronnye sistemy*, 1997, Vol. 2, no. 6, pp. 13–19. (in Russ.).
5. Dubrovskiy V.V., Kadchenko S.I., Kravchenko V.F., Sadovnichiy V.A. Vychislenie pervykh sobstvennykh chisel diskretnogo operatora (Calculation of the first eigenvalues of a discrete operator). *Elektromagnitnye volny i elektronnye sistemy*, 1998, Vol. 3, no. 2, pp. 6–8. (in Russ.).
6. Sadovnichiy V.A., Dubrovskii V.V., Kadchenko S.I., Kravchenko V.F. Computation of the first eigenvalues of a boundary value problem on the hydrodynamic stability of a Poiseuille flow in a circular tube. *Differential Equations*, 1998, Vol. 34, no. 1, pp. 49–53.

7. Kadchenko, S.I. Novyy metod vychisleniya sobstvennykh chisel spektral'noy zadachi Orra–Zommerfel'da (New method for calculating the eigenvalues of the Orr–Sommerfeld spectral problem). *Elektromagnitnye volny i elektronnye sistemy*, 2000, Vol. 5, no. 6, pp. 4–10. (in Russ.).

8. Dubrovskiy V.V., Kadchenko S.I., Kravchenko V.F., Sadovnichiy V.A. Novyy metod priblizhennogo vychisleniya pervykh sobstvennykh chisel spektral'noy zadachi Orra–Zommerfel'da (A new method for the approximate calculation of the first eigenvalues of the Orr–Sommerfeld spectral problem). *Doklady Akademii Nauk*, 2001, Vol. 378, no. 4, pp. 443–445. (in Russ.).

9. Kinzina I.I. Calculation of eigenvalues of a discrete self-adjoint operator perturbed by a bounded operator. *Russian Mathematics (Izvestiya VUZ. Matematika)*, 2008, Vol. 52, no. 6, pp. 13–21. DOI: 10.3103/S1066369X08060029

10. Sadovnichii V.A., Podolskii V.E. A regularized trace of a bounded perturbation of an operator with a trace-class resolvent. *Differential Equations*, 1999, Vol. 35, no. 4, pp. 557–566.

11. Kato T. *Teoriya vozmushcheniy lineynykh operatorov* (Theory of perturbations of linear operators), Moscow, Mir Publ., 1972, 740 p. (in Russ.). [Kato T. *Perturbation theory for linear operators*. Springer-Verlag, 1966, 592 p.]

Received January 4, 2019

CORRELATIONS BETWEEN ELEMENTS AND SEQUENCES IN A NUMERICAL PRISM

M.S. Tokmachev

Yaroslav-the-Wise Novgorod State University, Veliky Novgorod, Russian Federation

E-mail: mtokm@yandex.ru

A numerical prism, previously introduced by the author as an ordered set regarding the research of a three-parameter probability distribution of the hyperbolic-cosine type, which is a generalization of the known two-parameter Meixner distribution, is being considered. In geometry-related terminology, elements of a numerical prism are the coefficients of moment-forming polynomials for the specified distribution, which are obtained with the use of both differential and algebraic recurrence correlations.

Each one of the infinite number of elements depends on three indices determining its position in a prism. Fixation of one or two indices results in cross-sections of the prism, which are numerical triangles or sequences. Among them, there are such well-known cross-sections as the Stirling number triangle, number triangle of coefficients in the Bessel polynomials, sequences of tangent and secant numbers, and others. However, the majority of numerical sets in the prism's cross-sections have never been described in literature before.

Considering the structure and construction algorithm, cross-sections of the numerical prism turn out to be interconnected not only by the general construction formula but also by certain correlations. As a result, formulas of connection between various groups of elements are presented in the article. In particular, expansion of secant numbers for the sum of products grouped by the number of tangent numbers' cofactors with specification of corresponding coefficients in the expansion, representation (automatic expression) of elements of a sequence of alternating secant and tangent number through the previous ones, as well as a number of other correlations for the sequences and particular elements is determined.

Keywords: hyperbolic cosine distribution; cumulants; moments; numerical prism; cross-sections; secant numbers; tangent numbers.

Introduction

We obtained the numerical set $\{U(n; k, j)\}$ structured as a «numerical prism» in the paper [1]. The construction of the numerical prism is based on relations between the cumulants χ_n and the initial moments α_n , where $n \in \mathbf{N}$, of the hyperbolic-cosine-type probability distribution defined [2, 3] by the characteristic function:

$$f(t) = \left(\operatorname{ch} \frac{\beta}{\mu} t - i \frac{\mu}{\beta} \operatorname{sh} \frac{\beta}{m} t \right)^{-m}, \text{ where } \mu, \beta, m \in \mathbf{R}; m > 0, \beta \neq 0, i = \sqrt{-1}. \quad (1)$$

The obtained three-parameter distribution is described in [4] and is a generalization of the Meixner two-parameter distribution [5].

Theorem 1 ([1]). For a hyperbolic-cosine-type distribution with the characteristic function (1), the formula for calculating the cumulants χ_n , $n = 1, 2, \dots$, is the following:

$$\chi_n = m \left(\frac{\beta}{m} \right)^n P_n \left(\frac{\mu}{\beta} \right) = m \left(\frac{\beta}{m} \right)^n \sum_{j=0}^n V(n; j) \left(\frac{\mu}{\beta} \right)^j, \quad (2)$$

where $P_n(b)$ are polynomials of the form:

$$P_n(b) = \sum_{j=0}^n V(n; j) b^j, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3)$$

and the coefficients $V(n; j)$ of the polynomials are calculated by the recurrence relation:

$$\begin{aligned} V(1; 1) &= 1, \quad V(1; j) = 0 \text{ for all } j \neq 1, \\ V(n+1; j) &= (j-1)V(n; j-1) + (j+1)V(n; j+1) \text{ for } n \in \mathbf{N}. \end{aligned} \quad (4)$$

The polynomials $P_n(b)$ follow differentiation of the tangent function, and are known [6, 7] as *Derivative polynomials*.

Theorem 2 ([1]). For a hyperbolic-cosine-type distribution with the characteristic function (1), the formula for calculating the n -th order moments is the following:

$$M(X^n) = \alpha_n = \left(\frac{\beta}{m}\right)^n P_n\left(m, \frac{\mu}{\beta}\right) = \left(\frac{\beta}{m}\right)^n \sum_{k=1}^n \sum_{j=0}^n U(n; k, j) m^k \left(\frac{\mu}{\beta}\right)^j, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (5)$$

where the moment-forming polynomials of two arguments $P_n(m, b)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, can be represented in the form:

$$P_n(m, b) = \sum_{k=1}^n \sum_{j=0}^n U(n; k, j) m^k b^j, \quad (6)$$

$b \equiv \mu/\beta$, $\{U(n; k, j)\}$ is a system of the integer coefficients of the polynomials related by the equations:

$$\begin{aligned} U(0; 0, 0) &= 1, \quad U(0; k, j) = 0 \text{ for any } k, j \neq 0, \\ U(n+1; k, j) &= U(n; k-1, j-1) + (j-1)U(n; k, j-1) + (j+1)U(n; k, j+1), \end{aligned} \quad (7)$$

for $n = 0, 1, 2, \dots$.

The identity $U(n; 1, j) \equiv V(n; j)$ follows directly from equations (4) and (7). Therefore, the numbers $V(n; j)$ are only special cases of numbers $U(n; k, j)$ for $k = 1$.

For each fixed k , where $k \in \mathbf{N}$, the corresponding subset of $\{U(n; k, j)\}$ forms a numerical triangle. In terms of geometry, the set $\{U(n; k, j)\}$ is a set of numerical triangles ordered by k , and can be considered as a «numerical prism», where for each given k the triangle is a section of the prism [1, 8]. Similarly, we can obtain sections of the prism by fixing the argument j , $j = 0, 1, 2, \dots$. These sets are usually novel.

Let us either fix two of the parameters n, k, j , or express two of them through the remaining parameter. The numerical sequences obtained in the numerical prism include many well-known sequences (tangent numbers, secant numbers, Stirling numbers of the first kind, coefficients in expansions of various functions, for example, in the Bessel polynomials, etc.) [9]. However, the overwhelming majority of the obtained sequences is not mentioned in the literature. The issue of novelty is solved with the help of a sufficiently complete on-line encyclopedia of integer sequences (OEIS) [10].

We notice the lasting interest in numerical sequences and triangles. For example, the paper [11] presents a numerical pyramid which sections are known numerical sets: those of Deleham, Euler, MacMahon, Stirling. Also, the paper [11] gives a series of numerical sequences, among which only the sequences A000182, A000184, A00147, and A085734 in OEIS are common with the numerical prism. Other sequences and triangles are also present as subsets in the considered numerical prism. The paper [12] identifies the first elements of the numerical triangle $\{U(n; 1, j)\}$ as the numbers $T_{n,k}$ calculated by the recurrence relation $T_{n,k} = \delta_{1k}$, $T_{n+1,k} = (k-1)T_{n,k-1} + (k+1)T_{n,k+1}$. This is a special case of relation (7). Along with interest in finding new numerical sequences, there is an increasing interest in classical sets of numbers considered from different points of view. In particular, the paper [13] presents simple and asymptotically fast algorithms for calculating tangent and secant numbers. In the considered numerical prism, we can not only easily calculate these sequences, but also establish structural relations between the sequences.

Cumulants and moments in the numerical prism structure

Therefore, the considered numerical prism is an ordered set $\{U(n; k, j)\}$ of the coefficients of the polynomials $P_n(b)$ and $P_n(m, b)$ that form, respectively, the cumulants and moments of the hyperbolic-cosine-type probability distribution [1]. Moreover, according to (2) and in view of the equality

Математика

$U(n; 1, j) \equiv V(n; j)$, the distribution cumulants are completely determined by the distribution parameters μ, β, m and the set of coefficients $\{U(n; 1, j)\}$:

$$\chi_n = m \left(\frac{\beta}{m} \right)^n P_n \left(\frac{\mu}{\beta} \right) = m \left(\frac{\beta}{m} \right)^n \sum_{j=0}^n V(n; j) \left(\frac{\mu}{\beta} \right)^j = m \left(\frac{\beta}{m} \right)^n \sum_{j=0}^n U(n; 1, j) b^j, \text{ where } b = \frac{\mu}{\beta}. \quad (8)$$

For $n = \overline{1, 12}$, $j = \overline{0, 10}$, the corresponding section $\{U(n; 1, j)\}$ is partially presented in table 1. According to (7), subsequent values are calculated simply, without using differential relations. Note that the section $\{U(n; 1, j)\}$ is the known [10: A008293] triangle of coefficients in the expansion of $\text{tg}^{(n)} x$ in powers of $\text{tg} x$.

Table 1

Section $\{U(n; 1, j)\}$ of the numerical prism

$n \backslash j$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1		1									
2	1		1								
3		2		2							
4	2		8		6						
5		16		40		24					
6	16		136		240		120				
7		272		1232		1680		720			
8	272		3968		12096		13440		5040		
9		7936		56320		129024		120960		40320	
10	7936		176896		814080		1491840		1209600		362880
11		353792		3610112		12207360		18627840		13305600	
12	353792		11184128		71867136		191431680		250145280		159667200

In order to calculate the initial moments α_n of the hyperbolic-cosine-type distribution (see (5)), we use the parameters μ, β, m along with all sections of the numerical prism $\{U(n; k, j)\}$ determined by k , where $k = \overline{1, n}$.

Let us consider the relation between the moments and cumulants with reference to the set $\{U(n; k, j)\}$.

As is well known, the moments $\{\alpha_n\}$ and cumulants $\{\chi_s\}$ of probability distributions are connected by the following polynomial relations:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \chi_1; \\ \alpha_2 &= \chi_2 + \chi_1^2; \\ \alpha_3 &= \chi_3 + 3\chi_1\chi_2 + \chi_1^3; \\ \alpha_4 &= \chi_4 + (3\chi_2^2 + 4\chi_1\chi_3) + 6\chi_1^2\chi_2 + \chi_1^4; \\ \alpha_5 &= \chi_5 + (5\chi_1\chi_4 + 10\chi_2\chi_3) + (10\chi_1^2\chi_3 + 15\chi_1\chi_2^2) + 10\chi_1^3\chi_2 + \chi_1^5; \\ \alpha_6 &= \chi_6 + (6\chi_1\chi_5 + 15\chi_2\chi_4 + 10\chi_3^2) + (15\chi_1^2\chi_4 + 60\chi_1\chi_2\chi_3 + 15\chi_2^3) \\ &\quad + (20\chi_1^3\chi_3 + 45\chi_1^2\chi_2^2) + 15\chi_1^4\chi_2 + \chi_1^6; \\ &\dots \end{aligned} \quad (9)$$

In the above expressions, the terms are grouped according to the number of cumulants-factors in the product. For any n , $n \in \mathbf{N}$, the relation takes the form:

$$\alpha_n = \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{s_1+s_2+\dots+s_k=n, \\ s_i \neq 0}} a_{s_1, s_2, \dots, s_k} \chi_{s_1} \chi_{s_2} \dots \chi_{s_k}, \quad (10)$$

where k is the number of the multiplied cumulants, a_{s_1, s_2, \dots, s_k} are the corresponding coefficients at the products $\chi_{s_1} \chi_{s_2} \dots \chi_{s_k}$, and s_i is the order of the cumulant χ_{s_i} .

Theorem 3. For the hyperbolic-cosine-type distribution, consider the decomposition of the initial moments α_n into sum (10) of the cumulant products with given coefficients. Then the number of cumulants-factors in the corresponding terms is determined by the parameter k in the formula:

$$\alpha_n = \left(\frac{\beta}{m}\right)^n \sum_{k=1}^n m^k \sum_{j=0}^n U(n; k, j) b^j. \tag{11}$$

Proof. As it follows from (5), (10),

$$\alpha_n = \left(\frac{\beta}{m}\right)^n \sum_{k=1}^n \sum_{j=0}^n U(n; k, j) m^k b^j = \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{s_1+s_2+\dots+s_k=n, \\ s_i \neq 0}} a_{s_1, s_2, \dots, s_k} \chi_{s_1} \chi_{s_2} \dots \chi_{s_k}. \tag{12}$$

According to (8), the cumulants considered in (12) can be represented as:

$$\chi_{s_i} = m \left(\frac{\beta}{m}\right)^{s_i} \sum_{j=0}^{s_i} U(s_i; 1, j) b^j. \tag{13}$$

Note that, regardless of the order s_i of the cumulant, there is a factor m in equation (13). Consequently, there is a factor m^k in each product of k cumulants, despite of different orders s_1, s_2, \dots, s_k of the cumulants $\chi_{s_1} \chi_{s_2} \dots \chi_{s_k}$.

Substitute the cumulants in the form of (13) into the right side of (12):

$$\alpha_n = \left(\frac{\beta}{m}\right)^n \sum_{k=1}^n \sum_{j=0}^n U(n; k, j) m^k b^j = \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{s_1+s_2+\dots+s_k=n, \\ s_i \neq 0}} a_{s_1, s_2, \dots, s_k} \prod_{i=1}^k \left[\left(\frac{\beta}{m}\right)^{s_i} m \sum_{j=0}^{s_i} U(s_i; 1, j) b^j \right],$$

i.e.

$$\alpha_n = \left(\frac{\beta}{m}\right)^n \sum_{k=1}^n m^k \sum_{j=0}^n U(n; k, j) b^j = \left(\frac{\beta}{m}\right)^n \sum_{k=1}^n m^k \sum_{\substack{s_1+s_2+\dots+s_k=n, \\ s_i \neq 0}} a_{s_1, s_2, \dots, s_k} \prod_{i=1}^k \left[\sum_{j=0}^{s_i} U(s_i; 1, j) b^j \right], \tag{14}$$

where each term of the polynomials of variables m and b on the right side of (14) is such that the parameter k of m^k indicates the number of cumulants-factors in the corresponding product. Since the polynomials on both sides of (14) are equal, coefficients at the same powers of m are also equal. Then, the following equality holds for any m :

$$m^k \left(\frac{\beta}{m}\right)^n \sum_{j=0}^n U(n; k, j) b^j = \left(\frac{\beta}{m}\right)^n m^k \sum_{\substack{s_1+s_2+\dots+s_k=n, \\ s_i \neq 0}} a_{s_1, s_2, \dots, s_k} \prod_{i=1}^k \left[\sum_{j=0}^{s_i} U(s_i; 1, j) b^j \right]. \tag{15}$$

Therefore,

$$m^k \left(\frac{\beta}{m}\right)^n \sum_{j=0}^n U(n; k, j) b^j = \sum_{\substack{s_1+s_2+\dots+s_k=n, \\ s_i \neq 0}} a_{s_1, s_2, \dots, s_k} \chi_{s_1} \chi_{s_2} \dots \chi_{s_k} \text{ for } k = 1, 2, \dots, n.$$

At the same time, the power k and number of cumulants in the product are equal for each term on the right side of the equation.

This completes the proof of Theorem 3.

Theorem 4. There are the following relations for coefficients of the polynomials $P_n(m, b)$:

$$\sum_{j=0}^n U(n; k, j) b^j = \sum_{\substack{s_1+s_2+\dots+s_k=n, \\ s_i \neq 0}} a_{s_1, s_2, \dots, s_k} \prod_{i=1}^k \left[\sum_{j=0}^{s_i} U(s_i; 1, j) b^j \right], \text{ where } k = \overline{1, n}. \tag{16}$$

Proof. Divide both sides of (15) by $(\beta/m)^n$ and compare expressions of the same powers of m in the polynomials.

Corollary 4.1. For any b , the following condition holds for the section $\{U(n;2,j)\}$ of the numerical prism:

$$\sum_{j=0}^n U(n;2,j)b^j = \sum_{\substack{s+l=n, \\ s,l \neq 0}} a_{s,l} \left[\sum_{j_s=0}^s U(s;1,j_s)b^{j_s} \right] \cdot \left[\sum_{j_l=0}^l U(l;1,j_l)b^{j_l} \right]. \quad (17)$$

In particular, compare coefficients of the same powers of b in the polynomials and obtain:

$$U(n;2,j) = \sum_{\substack{s+l=n, \\ s,l \neq 0}} a_{s,l} \left[\sum_{j_s+j_l=j} U(s;1,j_s) \cdot U(l;1,j_l) \right], \text{ where } j = \overline{0,n}. \quad (18)$$

Corollary 4.2. For any b , the following condition holds for the section $\{U(n;3,j)\}$ of the numerical prism:

$$\sum_{j=0}^n U(n;3,j)b^j = \sum_{\substack{i+s+l=n, \\ i,s,l \neq 0}} a_{i,s,l} \left[\sum_{j_i=0}^i U(i;1,j_i)b^{j_i} \right] \left[\sum_{j_s=0}^s U(s;1,j_s)b^{j_s} \right] \cdot \left[\sum_{j_l=0}^l U(l;1,j_l)b^{j_l} \right]. \quad (19)$$

In particular, compare coefficients of the same powers of b in the polynomials and obtain:

$$U(n;3,j) = \sum_{\substack{i+s+l=n, \\ i,s,l \neq 0}} a_{i,s,l} \left[\sum_{j_i+j_s+j_l=j} U(i;1,j_i) \cdot U(s;1,j_s) \cdot U(l;1,j_l) \right], \text{ where } j = \overline{0,n}. \quad (20)$$

Corollary 4.3. If $b = 1$, then relation (16) implies the following relation for coefficients of the polynomials $P_n(m,b)$:

$$\sum_{j=0}^n U(n;k,j) = \sum_{\substack{s_1+s_2+\dots+s_k=n, \\ s_i \neq 0}} a_{s_1,s_2,\dots,s_k} \prod_{i=1}^k \left[\sum_{j_i=0}^{s_i} U(s_i;1,j_i) \right], \text{ where } k = \overline{1,n}. \quad (21)$$

Corollary 4.4. If $b = 0$, then relation (16) implies the following relation for coefficients of the polynomials $P_n(m,b)$:

$$U(n;k,0) = \sum_{\substack{s_1+s_2+\dots+s_k=n, \\ s_i \neq 0}} a_{s_1,s_2,\dots,s_k} \prod_{i=1}^k U(s_i;1,0), \text{ where } k = \overline{1,n}. \quad (22)$$

In particular,

$$U(n;1,0) = \sum_{s_1=n} a_{s_1} U(s_1;1,0) = U(n;1,0);$$

$$U(n;2,0) = \sum_{\substack{s+l=n, \\ s,l \neq 0}} a_{s,l} U(s;1,0)U(l;1,0); \quad (23)$$

$$U(n;3,0) = \sum_{\substack{i+s+l=n, \\ i,s,l \neq 0}} a_{i,s,l} U(i;1,0) \cdot U(s;1,0) \cdot U(l;1,0). \quad (24)$$

Corollary 4.5. If $b = 0$, then the following relation is obtained from (22) by summation over k :

$$\sum_{k=1}^n U(n;k,0) = \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{s_1+s_2+\dots+s_k=n, \\ s_i \neq 0}} a_{s_1,s_2,\dots,s_k} \prod_{i=1}^k U(s_i;1,0). \quad (25)$$

Theorem 5. In a section of the numerical prism $\{U(n;k,j)\}$, the numerical triangle $\{U(2n;k,0)\}$ is a decomposition of the secant numbers $\{E_n\}$ into the sum of products grouped by the number of factors of the tangent numbers $\{T_n\}$. Namely,

$$E_0 = 1, E_n = \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{2s_1+2s_2+\dots+2s_k=2n, \\ s_i \neq 0}} a_{2s_1, 2s_2, \dots, 2s_k} T_{s_1} \cdot T_{s_2} \cdot \dots \cdot T_{s_k}, \tag{26}$$

where $n \in \mathbf{N}$, $a_{2s_1, 2s_2, \dots, 2s_k}$ are the positive integer coefficients in the representation, see (9), of the initial probability moments $a_{2n} = E_n$ as the sum of products of the cumulants $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{2n}$ ($2s_1, 2s_2, \dots, 2s_k$ are even orders of the multiplied cumulants).

Proof. According to [8], if the parameters of the hyperbolic-cosine-type distribution are $\mu = 0, \beta = 1, m = 1$, then the cumulants $\{\chi_{2n}\}$ are tangent numbers $\chi_{2n} = T_n, n \in \mathbf{N}$, and the initial moments $\{a_{2n}\}$ are secant numbers: $E_0 = 1, a_{2n} = E_n$, for $n \in \mathbf{N}$. In addition, for $\mu = 0, \beta = 1, m = 1$, relation (13) implies that:

$$\chi_{2n} = U(2n; 1, 0), \chi_{2n-1} = U(2n-1; 1, 0) = 0; \tag{27}$$

and relation (11) implies that:

$$a_{2n} = \sum_{k=1}^{2n} U(2n; k, 0), a_{2n-1} = \sum_{k=1}^{2n-1} U(2n-1; k, 0) = 0,$$

since $U(2n-1; k, 0) = 0$ for $n, k \in \mathbf{N}$.

We use relation (25) only for even n and s_i (since $U(n; k, 0)$ and $U(s_i; 1, 0)$ are equal to zero, if n and s_i are odd). Redesignate the indices and obtain:

$$\sum_{k=1}^{2n} U(2n; k, 0) = \sum_{k=1}^{2n} \sum_{\substack{2s_1+2s_2+\dots+2s_k=2n, \\ s_i \neq 0}} a_{2s_1, 2s_2, \dots, 2s_k} \prod_{i=1}^k U(2s_i; 1, 0).$$

For nonzero summation indices, if $2s_1 + 2s_2 + \dots + 2s_k = 2n$, i.e. $s_1 + s_2 + \dots + s_k = n$, then $k \leq n$. Consequently, in the equality above, the summation over k is conducted from 1 to n . Therefore,

$$\sum_{k=1}^n U(2n; k, 0) = \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{2s_1+2s_2+\dots+2s_k=2n, \\ s_i \neq 0}} a_{2s_1, 2s_2, \dots, 2s_k} \prod_{i=1}^k U(2s_i; 1, 0),$$

i. e.

$$a_{2n} = \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{2s_1+2s_2+\dots+2s_k=2n, \\ s_i \neq 0}} a_{2s_1, 2s_2, \dots, 2s_k} \prod_{i=1}^k \chi_{2s_i}. \tag{28}$$

Replace the moments and cumulants by the corresponding secant and tangent numbers $a_{2n} = E_n, \chi_{2s_i} = T_{s_i}$ in (28). We arrive at relation (26):

$$E_n = \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{2s_1+2s_2+\dots+2s_k=2n, \\ s_i \neq 0}} a_{2s_1, 2s_2, \dots, 2s_k} T_{s_1} \cdot T_{s_2} \cdot \dots \cdot T_{s_k}.$$

This completes the proof of Theorem 5.

Theorem 6. For fixed $k, k = 1, 2, \dots, 2n$, each of sequences $\{U(2n; k, 0)\}$ is a sequence of such terms in the decomposition of secant numbers $\{E_n\}$ that contain k factors consisting of tangent numbers. Namely,

$$U(2n; k, 0) = \sum_{\substack{2s_1+2s_2+\dots+2s_k=2n, \\ s_i \neq 0}} a_{2s_1, 2s_2, \dots, 2s_k} T_{s_1} \cdot T_{s_2} \cdot \dots \cdot T_{s_k}, \tag{29}$$

$$E_n = \sum_{k=1}^n U(2n; k, 0), \tag{30}$$

where $\{T_i\}$ are tangent numbers, $a_{2s_1, 2s_2, \dots, 2s_k}$ are positive integer coefficients in the representation, see (9), of the initial moments $a_{2n} = E_n$ as the sum of products of the cumulants $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{2n}$.

Proof. In order to obtain equation (29), replace n by $2n$ in (22) and use relation (27), where $\chi_{2s_i} = T_{s_i}$. Relation (30) follows from (26) and (29).

Corollary 6.1. The sequence $\{U(2n;1,0)\}$ is a sequence of the tangent numbers $\{T_n\}$.

The statement directly follows from (29), since $2s_1 + 2s_2 + \dots + 2s_k = 2n$, $a_{2s_1, 2s_2, \dots, 2s_k} \equiv a_{2n}$ for $k = 1$, and all coefficients a_{2n} of the highest cumulants χ_{2n} in formulas (9) are equal to 1.

Corollary 6.2. The sequence $\{U(2n;2,0)\}$ satisfies the following relation:

$$U(2n;2,0) = \sum_{\substack{2s+2l=2n, \\ s,l \neq 0}} a_{2s,2l} U(2s;1,0)U(2l;1,0) = \sum_{\substack{2s+2l=2n, \\ s,l \neq 0}} a_{2s,2l} T_s \cdot T_l.$$

The statement is a special case of (29) and (23), since $T_s = \chi_{2s} = U(2s;1,0)$ for any $s, s \in \mathbb{N}$.

Corollary 6.3. The sequence $\{U(2n;3,0)\}$ satisfies the following relation:

$$U(2n;3,0) = \sum_{\substack{2i+2s+2l=2n, \\ i,s,l \neq 0}} a_{2i,2s,2l} U(2i;1,0) \cdot U(2s;1,0) \cdot U(2l;1,0) = \sum_{\substack{2i+2s+2l=2n, \\ i,s,l \neq 0}} a_{2i,2s,2l} T_i \cdot T_s \cdot T_l.$$

The statement is a special case of (29) and (24), since $T_s = \chi_{2s} = U(2s;1,0)$ for any $s, s \in \mathbb{N}$.

Using the formulas for representation of cumulants in terms of moments, we can also obtain inverse relations expressing the tangent numbers $\{T_i\}$ in terms of the secant numbers $\{E_n\}$ indicated in the section $\{U(n;k,0)\}$.

By analogy with Theorems 5 and 6, we can also represent relations between other sequences. Let us give two examples. Let $\mu = 1, \beta = 1, m = 1$. Then cumulants and moments of distribution connected by mutually inverse relations are the sequence (1, 2, 4, 16, 80, 512, 3904, 34816, ...) [10: A000831] and the sequence (1, 1, 3, 11, 57, 361, 2763, 24611, ...) [10: A001586], respectively. The latter sequence is given by generalized Euler numbers. For $\mu = 1, \beta = 1, m = 2$, a sequence of cumulants, i.e. a sequence of alternating secant and tangent numbers, and a sequence of moments are equal up to a shift on two positions: $\chi_k = \alpha_{k-2}, k = 2, 3, \dots$ [8]. Therefore, this sequence can be restored by the previous elements (autoexpression). If we know the structure (representation of cumulants through moments and, conversely, moments through cumulants), then we can use the numerical prism to find specific terms in the expression of each sequence through its pair sequence.

Remark 1. For $2n \leq 12$, if all moments and cumulants of odd order are equal to zero, then the coefficients $a_{2s_1, 2s_2, \dots, 2s_k}$ used in the formulas to connect moments and cumulants of even order are as follows:

$$\begin{aligned} \alpha_2 &= \chi_2; \\ \alpha_4 &= \chi_4 + (3\chi_2^2); \\ \alpha_6 &= \chi_6 + (15\chi_2\chi_4) + (15\chi_2^3); \\ \alpha_8 &= \chi_8 + (28\chi_2\chi_6 + 35\chi_4^2) + (210\chi_2^2\chi_4) + (105\chi_2^4); \\ \alpha_{10} &= \chi_{10} + (45\chi_2\chi_8 + 210\chi_4\chi_6) + (630\chi_2^2\chi_6 + 1575\chi_2\chi_4^2) + (3150\chi_2^3\chi_4) + (945\chi_2^5); \\ \alpha_{12} &= \chi_{12} + (66\chi_2\chi_{10} + 462\chi_6^2 + 495\chi_4\chi_8) + (1485\chi_2^2\chi_8 + 13860\chi_2\chi_4\chi_6 + 5775\chi_4^3) + \\ &\quad + (13860\chi_2^3\chi_6 + 51975\chi_2^2\chi_4^2) + (51975\chi_2^4\chi_4) + (10395\chi_2^6); \\ &\dots \end{aligned} \tag{31}$$

Remark 2. In order to illustrate the theory, the fragment of section $\{U(n;k,0)\}$ of the numerical prism is given in table 2 (initial values for $n = \overline{1, 16}, k = \overline{1, 8}$). The rows present terms in the expansion of secant numbers by tangent numbers.

Conclusion

In the present work, the structured values of the numerical prism result in different relations and regularities in the field of numbers. At the same time, the numerical set $\{U(n;k,j)\}$ has other applica-

tions. For example, for given coefficients $\{U(n; k, j)\}$ and formulas for the density of the hyperbolic-cosine-type distribution [14], we can use the relation between the initial moments and derivatives of the characteristic function in order to obtain analytically values of improper integrals for a certain class of functions. For the parameters μ, β, m , the papers [15–17] present the general form of exact formulas for the integrals of expressions containing a beta function with complex-conjugate variable arguments. In particular, according to [16], values of the integrals of a combination of a power function, an exponential function, a hyperbolic secant or cosecant, and some polynomials with different parameters are obtained for $m \in \mathbb{N}$.

Table 2

Section $\{U(n; k, 0)\}$ of the numerical prism

$\begin{matrix} k \\ n \end{matrix}$	1	2	3	4	5	6	7	8
1								
2	1							
3								
4	2	3						
5								
6	16	30	15					
7								
8	272	588	420	105				
9								
10	7936	18960	16380	6300	945			
11								
12	353792	911328	893640	429660	103950	10395		
13								
14	22368256	61152000	65825760	36636600	11351340	1891890	135135	
15								
16	1903757312	5464904448	6327135360	3918554640	1427025600	310269960	37837800	2027025

Therefore, the integer set $\{U(n; k, j)\}$ introduced from probabilistic considerations is also of independent interest for mathematical analysis, number theory, coding theory, etc. A number of relations of the numerical prism and more detailed initial fragments of sections are presented in the author's monograph [17].

References

1. Tokmachev M.S. Calculation of cumulants and moments of the Meixner distribution. *Bulletin of the Novgorod State University*, 2013, no. 75-2, pp. 47–51. (in Russ.).
2. Tokmachev M.S. *Dep. in VINITI*, 21.06.94, no. 1542, B94, 11 p. (in Russ.).
3. Tokmachev M.S. Postoyanstvo regressii kvadrachnoy statistiki na lineynuyu statistiku (A constant regression of a quadratic statistics on a linear statistics). *Bulletin of the Novgorod State University*, 1995, no. 1, pp. 139–141. (in Russ.).
4. Tokmachev M.S., Tokmachev A.M. Raspredelenie tipa giperbolicheskogo kosinusa (A distribution of the hyperbolic cosine type). *Bulletin of the Novgorod State University*, 2001, no. 17, pp. 85–88. (in Russ.).
5. Lai C.D. Meixner Classes and Meixner Hyper–Geometric Distributions. *Australian & New Zealand Journal of Statistics*, 1982, Vol. 24, Issue 2, pp. 221–233. DOI: 10.1111/j.1467-842X.1982.tb00828.x
6. Hoffman M.E. Derivative polynomials for tangent and secant. *The American Mathematical Monthly*, 1995, Vol. 102, no. 1, pp. 23–30. DOI: 10.2307/2974853
7. Hoffman M.E. Derivative polynomials, Euler polynomials, and associated integer sequences. *Electronic Journal of Combinatorics*, 1999, Vol. 6, #R21
8. Tokmachev M.S. About number sets and sequences in connection with a distribution of the hyperbolic cosine type. *Vestnik NovSU. Issue: Physico-Mathematical Sciences*, 2015, no. 3(86), part 2, pp. 35–39. (in Russ.).

9. Tokmachev M.S. *Dep. in VINITI*, 09.06.2016, no. 91-B2016, 90 p. (in Russ.).
10. *The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences™ (OEIS™)*. <http://oeis.org> (last access: 5.05.2018).
11. Franssens G.R. On a Number Pyramid Related to the Binomial, Deleham, Eulerian, MacMahon and Stirling number triangles. *Journal of Integer Sequences*, 2006, Vol. 9, Issue 1, Article 06.4.1. <http://www.cs.uwaterloo.ca/journals/JIS>
12. Knuth D.E., Buckholtz T.J., Computation of tangent, Euler and Bernoulli numbers. *Math. Comp.*, 1967, Vol. 21, pp. 663–688. DOI: 10.1090/S0025-5718-1967-0221735-9
13. Brent R.P., Harvey D. Fast computation of Bernoulli, Tangent and Secant numbers. *arXiv preprint*, 2011, arXiv:1108.0286 [math.CO].
14. Tokmachev M.S. Prikladnoy aspekt obobshchennogo raspredeleniya giperbolicheskogo kosinusa (Applications of the generalized hyperbolic cosine distribution). *Bulletin of the Novgorod State University*, 2005, no. 34, pp. 96–99 (in Russ.).
15. Tokmachev, M.S. Nekotorye integraly, svyazannye s raspredeleniem tipa giperbolicheskogo kosinusa (Some integrals related to the hyperbolic cosine type distribution). *Matematika v vuze i v shkole: Trudy XXIV Mezhdunarodnoy nauchno-metodicheskoy konferentsii* (Mathematics in high school and in school: Proceedings of the XXIV International Scientific and Methodical Conference), St. Petersburg, Petersburg state transport university, 2012, pp. 185–186. (in Russ.).
16. Tokmachev M.S. Evaluation of integrals for some class of functions with probabilistic interpretation. *Vestnik NovSU. Issue: Physico-Mathematical Sciences*, 2014, no. 80, pp. 42–46. (in Russ.).
17. Tokmachev M.S. *Veroyatnostnye raspredeleniya: ot kharakterizatsii k chislovyim mnozhestvam* (Probability distributions: from characterization to numerical sets). Saarbrücken, LAP LAMBERT Publ., 2018, 224 p. (in Russ.).

Received December 7, 2018

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2019, vol. 11, no. 1, pp. 24–33*

УДК 519.24; 511.3

DOI: 10.14529/mmph190104

СООТНОШЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ И ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ В ЧИСЛОВОЙ ПРИЗМЕ

М.С. Токмачев

*Новгородский государственный университет им. Ярослава Мудрого, г. Великий Новгород,
Российская Федерация
E-mail: mtokm@yandex.ru*

Рассматривается числовая призма, ранее введенная автором как упорядоченное множество в связи с исследованием трехпараметрического вероятностного распределения типа гиперболического косинуса, являющегося обобщением известного двухпараметрического распределения Майкснера. В геометрической терминологии элементы числовой призмы – коэффициенты моментобразующих полиномов для указанного распределения, которые получаются с помощью как дифференциальных, так и алгебраических рекуррентных соотношений.

Каждый из бесконечного количества элементов зависит от трех индексов, которые и определяют его местоположение в призме. При фиксировании одного или двух индексов получают сечения призмы: числовые треугольники или числовые последовательности. Среди сечений имеются широко известные, например, числовой треугольник Стирлинга, числовой треугольник коэффициентов в полиномах Бесселя, последовательности тангенциальных и секансных чисел и др. Однако подавляющее большинство числовых множеств в сечениях призмы ранее в литературе не встречались.

Ввиду структуры и алгоритма построения, сечения числовой призмы оказываются связанными между собой не только общей формулой построения, но и определенными соотношениями. Как результат, в статье представлены формулы связи между различными группами элементов.

В частности, найдены разложение секансных чисел на сумму произведений, сгруппированных по количеству сомножителей тангенциальных чисел с указанием соответствующих коэффициентов в разложении, представление (автовыражение) элементов последовательности чередующихся секансных и тангенциальных чисел через свои предыдущие, а также ряд других соотношений для последовательностей и отдельных элементов.

Ключевые слова: распределение типа гиперболического косинуса; кумулянты; моменты; числовая призма; сечения; секансные числа; тангенциальные числа.

Литература

1. Токмачев, М.С. Вычисление кумулянтов и моментов распределения Майкснера / М.С. Токмачев // Вестник НовГУ. – 2013. – № 75-2. – С. 47–51.
2. Токмачев, М.С. Характеризация распределения типа гиперболического косинуса свойством постоянства регрессии / М.С. Токмачев // Деп. в ВИНТИ 21.06.94. – № 1542. – В94.
3. Токмачев, М.С. Постоянство регрессии квадратичной статистики на линейную статистику / М.С. Токмачев // Вестник НовГУ. – 1995. – № 1. – С. 139–141.
4. Токмачев, М.С. Распределение типа гиперболического косинуса / М.С. Токмачев, А.М. Токмачев // Вестник НовГУ. – 2001. – № 17. – С. 85–88.
5. Lai, C.D. Meixner Classes and Meixner Hyper-Geometric Distributions/ C.D. Lai // Australian & New Zealand Journal of Statistics. – 1982. – Vol. 24. – Issue 2. – P. 221–233.
6. Hoffman, M.E. Derivative polynomials for tangent and secant / M.E. Hoffman // The American Mathematical Monthly. – 1995. – Vol. 102, no. 1. – P. 23–30. DOI: 10.2307/2974853
7. Hoffman, M.E. Derivative polynomials, Euler polynomials, and associated integer sequences / M.E. Hoffman // Electronic Journal of Combinatorics. – 1999. – Vol. 6. – #R21.
8. Токмачев, М.С. О числовых множествах и последовательностях в связи с распределением типа гиперболического косинуса / М.С. Токмачев // Вестник НовГУ. Сер.: Физико-математические науки. – 2015. – № 3 (86), Часть 2. – С. 35–39.
9. Токмачев, М.С. Множество подмножеств в структуре некоторой числовой призмы / М.С. Токмачев // Деп. В ВИНТИ 09.06.2016. – № 91. – В2016. – 90 с.
10. The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences™ (OEIS™). <http://oeis.org> (дата последнего обращения: 5.05.2018).
11. Franssens, G.R. On a Number Pyramid Related to the Binomial, Deleham, Eulerian, MacMahon and Stirling number triangles / G.R. Franssens // Journal of Integer Sequences. – 2006. – Vol. 9, Issue 1. – Article 06.4.1.
12. Knuth, D.E. Computation of tangent, Euler and Bernoulli numbers / D.E. Knuth, T.J. Buckholtz // Math. Comp. – 1967. – Vol. 21. – P. 663–688.
13. Brent, R.P. Fast computation of Bernoulli, Tangent and Secant numbers / R.P. Brent, D. Harvey // arXiv preprint. – 2011. – arXiv:1108.0286 [math.CO].
14. Токмачев, М.С. Прикладной аспект обобщенного распределения гиперболического косинуса / М.С. Токмачев // Вестник НовГУ. – 2005. – № 34. – С. 96–99.
15. Токмачев, М.С. Некоторые интегралы, связанные с распределением типа гиперболического косинуса / М.С. Токмачев // Математика в вузе и в школе: Труды XXIV Международной научно-методической конференции. – СПб.: Петербургский гос. ун-т путей сообщения. – 2012. – С. 185–186.
16. Токмачев, М.С. Вычисление интегралов от функций некоторого класса с вероятностной интерпретацией / М.С. Токмачев // Вестник НовГУ. Сер.: Физ-мат. Науки. – 2014. – № 80. – С. 42–46.
17. Токмачев, М.С. Вероятностные распределения: от характеристики к числовым множествам / М.С. Токмачев. – Саарбрюккен: LAP LAMBERT Academic Publ., 2018. – 224 с.

Поступила в редакцию 7 декабря 2018 г.

БЫСТРОЕ РЕШЕНИЕ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ БИГАРМОНИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

А.Л. Ушаков

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

E-mail: ushakoval@susu.ru

Рассматривается бигармоническое уравнение в области прямоугольной формы, когда краевые условия являются смешанными. Численное решение этой краевой задачи использует итерационную факторизацию на фиктивном продолжении после конечно-разностной аппроксимации решаемой задачи. В конечном итоге все сводится к решению линейных систем алгебраических уравнений, матрицы, которых треугольные с количеством ненулевых элементов в строках три и менее. Если погрешность аппроксимации исходной задачи достаточно мала, то требуемая относительная погрешность используемого итерационного процесса получается в несколько итераций. Разработанный итерационный метод оказывается в этом случае методом, имеющим оптимальную асимптотику по количеству действий в арифметических операциях. Предложенный итерационный метод существенно использует особенности найденной модельной задачи. Такая задача может возникать в методах типа фиктивных компонент, областей, пространств, когда решаются краевые задачи с эллиптическими уравнениями в областях достаточно произвольной формы. Приводится алгоритм при реализации итерационного процесса, когда выбор итерационных параметров производится автоматически при использовании метода минимальных поправок. Указывается критерий останова процесса при достижении указываемой заранее относительной погрешности. Приведен графический результат вычислительного эксперимента, подтверждающего асимптотическую оптимальность итерационного метода в вычислительных затратах. Разработка метода существенно использует комплексный анализ.

Ключевые слова: фиктивное продолжение; итерационные факторизации.

Введение

Рассматривается бигармоническое уравнение, оно же уравнение Софи Жермен – Лагранжа в прямоугольной области, при однородных условиях шарнирного закрепления на паре смежных сторон прямоугольника и условиях симметрии на паре других смежных сторон этого прямоугольника. Для конечно-разностного аналога этой модельной задачи – системы алгебраических линейных уравнений – указывается факторизованный переобуславливатель, имеющий дважды попеременно треугольный вид. При реализации разрабатываемого итерационного метода выбор итерационных параметров проводится на основе метода минимальных поправок [1]. Исходная краевая задача, например, может получаться при моделировании перемещений у пластин. Предлагаемый метод аналогичен методам типа фиктивных компонент, пространств, но основывается на комплексном анализе.

Непрерывная задача

Исходная задача:

$$\tilde{u}_1 \in \tilde{Z}_1 : \Lambda(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1) = g_1(\tilde{v}_1) \quad \forall \tilde{v}_1 \in \tilde{Z}_1, \quad g_1 \in \tilde{Z}'_1 \quad (1)$$

где

$$\tilde{Z}_1 = \tilde{Z}_1(\Omega) = \left\{ \tilde{v}_1 \in W_2^2(\Omega) : \tilde{v}_1|_{\Gamma_1} = 0, \frac{\partial \tilde{v}_1}{\partial \tilde{n}}|_{\Gamma_2} = 0 \right\};$$

пространство Соболева из функций на области прямоугольного вида:

$$\Omega = (0; b_1) \times (0; b_2), \quad \text{с } \Gamma_1 = \{b_1\} \times (0; b_2) \cup (0; b_1) \times \{b_2\}, \quad \Gamma_2 = \{0\} \times (0; b_2) \cup (0; b_1) \times \{0\},$$

а

$$\Lambda(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1) = \int_{\Omega} \Delta \tilde{u}_1 \Delta \tilde{v}_1 d\Omega$$

– билинейная форма, где заданные константы $b_1, b_2 > 0$. Решение задачи (1) существует и единственно [2, 3].

При

$$g_1(\tilde{v}_1) = \int_{\Omega} \tilde{f}_1 \tilde{v}_1 d\Omega,$$

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

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

где \bar{n} – внешняя нормаль на границе области $\partial\Omega$.

Дискретная задача и ее продолжение

Рассматривается линейная система алгебраических уравнений, получаемая при дискретизации (1), (2) на основе метода сумматорных тождеств:

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

здесь векторы:

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

полагается, что

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

а $v_{1,i,j}$ – значения функций при дискретных аргументах в узлах сетки соответственно:

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

когда шаги сетки выбираются следующие:

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

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

$$\begin{aligned} \langle \Lambda \bar{u}_1, \bar{v}_1 \rangle = & \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n ((2u_{1,i,j} - u_{1,i-1,j} - u_{1,i+1,j})h_1^{-2} + (2u_{1,i,j} - u_{1,i,j-1} - \\ & - u_{1,i,j+1})h_2^{-2})((2v_{1,i,j} - v_{1,i-1,j} - v_{1,i+1,j})h_1^{-2} + (2v_{1,i,j} - v_{1,i,j-1} - v_{1,i,j+1})h_2^{-2})h_1h_2, \\ & u_{1,i,n+1} = v_{1,i,n+1} = 0, \quad u_{1,i,0} = u_{1,i,1}, \quad v_{1,i,0} = v_{1,i,1}, \quad i = 1, \dots, m, \\ & u_{1,m+1,j} = v_{1,m+1,j} = 0, \quad u_{1,0,j} = u_{1,1,j}, \quad v_{1,0,j} = v_{1,1,j}, \quad j = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Здесь $\langle \dots \rangle$ – скалярное произведение следующего вида:

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

Когда функция f_1 непрерывна в области Ω , то можно полагать

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

Решение задачи (3) существует и единственно, потому что $A > 0$.

Строим продолжение задачи (3):

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

когда векторы

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

здесь блочная, верхняя треугольная матрица D размерности $2N \times 2N$ такова, что:

$$D_{11} = \Lambda, \quad D_{12} = 0, \quad D_{21} = \theta_A, \quad D_{22} = M_\theta,$$

и

$$D = \begin{bmatrix} \Lambda & 0 \\ \theta_A & M_\theta \end{bmatrix},$$

где матрицы

$$\theta_A = A\theta + \theta A, M_\theta = A^2 - \theta^2, \theta = \nabla_x' \nabla_y - \nabla_y' \nabla_x, A = \nabla_x' \nabla_x + \nabla_y' \nabla_y,$$

матрицы ∇_x, ∇_y с размерностями $N \times N$ определяются так:

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

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

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

$$\bar{Z}_1 = \{ \bar{v} = (\bar{v}_1', \bar{v}_2')' : \theta_A \bar{v}_1 + M_\theta \bar{v}_2 = \bar{0} \}, \bar{Z}_2 = \{ \bar{v} = (\bar{v}_1', \bar{v}_2')' : \bar{v}_1 = \bar{0} \}.$$

Лемма 1. Решение задачи (4) $\bar{u} \in \bar{Z}_1$ существует, единственно.

Метод итерационных факторизаций при фиктивном продолжении

Дополнительно определяется блочная матрица C размерности $2N \times 2N$, когда

$$C_{11} = C_{22} = M_\theta, C_{12} = -\theta_A, C_{21} = \theta_A,$$

тогда

$$C = \begin{bmatrix} M_\theta & -\theta_A \\ \theta_A & M_\theta \end{bmatrix}.$$

Чтобы решать задачу (4), предлагается итерационный процесс:

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

В итерационном процессе (5) на каждом шаге получается задача с факторизованным оператором такого вида:

$$\bar{U} \in \mathbb{C}^N : (LL^*)^2 \bar{U} = \bar{F}, \bar{F} \in \mathbb{C}^N,$$

которая расщепляется на простые задачи

- а) $\bar{T} \in \mathbb{C}^N, L\bar{T} = \bar{F}, \bar{F} \in \mathbb{C}^N,$
- б) $\bar{P} \in \mathbb{C}^N, L^*\bar{P} = \bar{T}, \bar{T} \in \mathbb{C}^N,$
- в) $\bar{Q} \in \mathbb{C}^N, L\bar{Q} = \bar{P}, \bar{P} \in \mathbb{C}^N,$
- г) $\bar{U} \in \mathbb{C}^N, L^*\bar{U} = \bar{Q}, \bar{Q} \in \mathbb{C}^N,$

здесь матрицы:

$$L = \nabla_x' - i\nabla_y', L^* = \bar{L}' = \nabla_x + i\nabla_y, LL^* = (\nabla_x' - i\nabla_y')(\nabla_x + i\nabla_y) = A + i\theta, \\ (LL^*)^2 = (A + i\theta)^2 = M_\theta + i\theta_A,$$

поэтому

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

или

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

тогда на каждом шаге процесса (5) возникает следующая задача:

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

Вводится норма:

$$\|\bar{v}_1\|_\Lambda = \sqrt{\langle \Lambda \bar{v}_1, \bar{v}_1 \rangle}.$$

Теорема 1. Для итерационного процесса (5) в оценке относительной ошибки:

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

если $\tau_k, k \in \mathbb{N}$ выбирать на основе метода минимальных поправок, то получается, что:

$$\varepsilon_1 \leq c\rho^k, \quad c \in (0; +\infty), \quad \rho \in (0; 1).$$

Вывод. По виду матриц L, L^* замечается, что задача (3) с N неизвестными по теореме 1 с помощью итерационного процесса (5) решается при относительной погрешности ε_1 за $O(N \ln \varepsilon_1^{-1})$ арифметических действий. А при довольно малых значениях параметров дискретизации решение требует $O(N)$ операций, а итерационный процесс будет сходиться в несколько итераций и превратится в почти прямой метод.

Алгоритм численного решения модельной задачи для бигармонического уравнения

Решается задача:

$$\Lambda \bar{u}_1 = \bar{f}_1,$$

итерационным процессом (5). При выборе итерационных параметров применяется метод минимальных поправок. Тогда для решаемой задачи в итерационном процессе применяется следующий алгоритм вычислений, где $\bar{\psi}^k = \bar{u}^k - \bar{u}$ – ошибка:

1) выбирается начальное приближение:

$$\bar{u}^0 = \bar{0} \in \bar{Z}_1;$$

2) вычисляется невязка:

$$\bar{r}^{k-1} : \bar{r}_1^{k-1} = \Lambda \bar{u}_1^{k-1} - \bar{f}_1, \quad \bar{r}_2^{k-1} = \bar{0}, \quad k \in \mathbb{N};$$

3) ищется поправка:

$$\bar{w}^{k-1} \in \mathbb{R}^{2N} : C \bar{w}^{k-1} = \bar{r}^{k-1}, \quad k \in \mathbb{N};$$

4) определяется квадрат нормы ошибки:

$$E_{k-1} = \|\bar{\psi}^{k-1}\|_{D^*C^{-1}D}^2 = \langle \bar{r}^{k-1}, \bar{w}^{k-1} \rangle = \langle \bar{r}_1^{k-1}, \bar{w}_1^{k-1} \rangle, \quad k \in \mathbb{N};$$

5) ставится условие остановки итераций:

$$E_{k-1}/E_1 < E^2, \quad E \in (0; 1), \quad k \in \mathbb{N};$$

6) вычисляется дополнительно вектор:

$$\bar{\eta}^{k-1} : \bar{\eta}_1^{k-1} = \Lambda \bar{w}_1^{k-1}, \quad \bar{\eta}_2^{k-1} = \bar{0}, \quad k \in \mathbb{N};$$

7) находится дополнительно вектор:

$$\bar{\xi}^{k-1} \in \mathbb{R}^{2N} : C \bar{\xi}^{k-1} = \bar{\eta}^{k-1}, \quad k \in \mathbb{N};$$

8) определяется итерационный параметр:

$$\tau_k = \frac{\langle D \bar{w}^{k-1}, \bar{w}^{k-1} \rangle}{\langle C^{-1} D \bar{w}^{k-1}, D \bar{w}^{k-1} \rangle} = \frac{\langle \bar{\eta}^{k-1}, \bar{w}^{k-1} \rangle}{\langle \bar{\xi}^{k-1}, \bar{\eta}^{k-1} \rangle} = \frac{\langle \bar{\eta}_1^{k-1}, \bar{w}_1^{k-1} \rangle}{\langle \bar{\xi}_1^{k-1}, \bar{\eta}_1^{k-1} \rangle}, \quad k \in \mathbb{N};$$

9) вычисляется новое приближение:

$$\bar{u}^k = \bar{u}^{k-1} - \tau_k \bar{w}^{k-1}, \quad k \in \mathbb{N};$$

$E \in (0; 1)$ – задаваемая относительная погрешность.

Программируемый алгоритм численного решения модельной задачи для бигармонического уравнения

Решается задача:

$$\Lambda \bar{u}_1 = \bar{f}_1,$$

которая может записываться в виде:

$$h^4 \Lambda \bar{u}_1 = h^4 \bar{f}_1$$

или

$$\text{а) } h^2 A \bar{u}_1 = \bar{q}_1, \quad \text{б) } h^2 A \bar{q}_1 = h^4 \bar{f}_1,$$

если

$$h_1 = b_1/(m+0,5), \quad h_2 = b_2/(n+0,5), \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n, \quad m = n, \quad b_1 = b_2, \quad h = h_1 = h_2,$$

итерационным процессом (5). При выборе итерационных параметров применяется метод минимальных поправок. Тогда для решаемой задачи в итерационном процессе программируется приведенный ранее алгоритм вычислений. Решаемая задача получается из разностной схемы, которая записывается в следующем виде:

$$4u_{1,i,j} - u_{1,i-1,j} - u_{1,i+1,j} - u_{1,i,j-1} - u_{1,i,j+1} = q_{1,i,j}, \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n,$$

где

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

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

и

$$4q_{1,i,j} - q_{1,i-1,j} - q_{1,i+1,j} - q_{1,i,j-1} - q_{1,i,j+1} + h^4 au_{1,i,j} = h^4 f_{1,i,j}, \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n,$$

где

$$q_{1,m+1,j} = 0, \quad q_{1,0,j} = q_{1,1,j}, \quad j = 1, \dots, n,$$

$$q_{1,i,n+1} = 0, \quad q_{1,i,0} = q_{1,i,1}, \quad i = 1, \dots, m.$$

1. Выбирается начальное приближение:

$$\bar{u}^0 = \bar{0} \in \bar{Z}_1.$$

При программировании элементы массива $u_{1,i,j}^0, i, j = 0, \dots, n+1$. Полагается, что $u_{1,i,j}^0 = 0, i, j = 1, \dots, n$.

2. Вычисляется невязка:

$$\bar{r}^{k-1} : \bar{r}_1^{k-1} = h^4 \Lambda \bar{u}_1^{k-1} - h^4 \bar{f}_1, \quad \bar{r}_2^{k-1} = \bar{0}, \quad k \in \mathbb{N},$$

подробнее так:

$$\text{а) } \bar{q}_1^{k-1} = h^2 A \bar{u}_1^{k-1}, \quad \text{б) } \bar{r}_1^{k-1} = h^2 A \bar{q}_1^{k-1} - h^4 \bar{f}_1.$$

При программировании полагается, что

$$u_{1,i,n+1}^{k-1} = 0, \quad u_{1,i,0}^{k-1} = u_{1,i,1}^{k-1}, \quad i = 1, \dots, n, \quad u_{1,n+1,j}^{k-1} = 0, \quad u_{1,0,j}^{k-1} = u_{1,1,j}^{k-1}, \quad j = 1, \dots, n.$$

При программировании $q_{1,i,j}^{k-1}, i, j = 0, \dots, n+1$ – элементы массива. Элементы этого массива вычисляются по формуле:

$$\text{а) } q_{1,i,j}^{k-1} = 4u_{1,i,j}^{k-1} - u_{1,i-1,j}^{k-1} - u_{1,i+1,j}^{k-1} - u_{1,i,j-1}^{k-1} - u_{1,i,j+1}^{k-1}, \quad i, j = 1, \dots, n,$$

а затем полагается, что

$$q_{1,i,n+1}^{k-1} = 0, \quad q_{1,i,0}^{k-1} = q_{1,i,1}^{k-1}, \quad i = 1, \dots, n, \quad q_{1,n+1,j}^{k-1} = 0, \quad q_{1,0,j}^{k-1} = q_{1,1,j}^{k-1}, \quad j = 1, \dots, n.$$

При программировании $r_{1,i,j}^{k-1}, i, j = 0, \dots, n+1$ – элементы массива. Элементы этого массива вычисляются по формуле:

$$\text{б) } r_{1,i,j}^{k-1} = 4q_{1,i,j}^{k-1} - q_{1,i-1,j}^{k-1} - q_{1,i+1,j}^{k-1} - q_{1,i,j-1}^{k-1} - q_{1,i,j+1}^{k-1} - h^4 f_{1,i,j}^{k-1}, \quad i, j = 1, \dots, n,$$

3. Ищется поправка:

$$\bar{w}^{k-1} \in \mathbb{R}^{2N} : h^4 C \bar{w}^{k-1} = \bar{r}^{k-1}, \quad k \in \mathbb{N},$$

что равносильно последовательному решению четырех систем линейных алгебраических уравнений с треугольными матрицами:

$$\text{а) } \bar{T}^{k-1} \in \mathbb{C}^N : hL\bar{T}^{k-1} = \bar{R}^{k-1}, \quad \text{б) } \bar{P}^{k-1} \in \mathbb{C}^N : hL^* \bar{P}^{k-1} = \bar{T}^{k-1}.$$

$$\text{в) } \bar{Q}^{k-1} \in \mathbb{C}^N : hL\bar{Q}^{k-1} = \bar{P}^{k-1}, \quad \text{г) } \bar{W}^{k-1} \in \mathbb{C}^N : hL^* \bar{W}^{k-1} = \bar{Q}^{k-1}.$$

При программировании решения системы из а) будут в массиве с элементами $T_{i,j}^{k-1}, i, j = 0, \dots, n+1$. При вычислении элементов этого массива сначала полагается $T_{i,0}^{k-1} = T_{0,j}^{k-1} = 0, i, j = 1, \dots, n$, а затем вычисляются элементы массива по формуле:

$$T_{i,j}^{k-1} = \left[(1+i)r_{1,i,j}^{k-1} + (1+i)T_{i-1,j}^{k-1} + (1-i)T_{i,j-1}^{k-1} \right] / 2,$$

когда индексы принимают последовательно значения $i, j = 1, \dots, n$.

При программировании решения системы из б) будут в массиве с элементами $P_{i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$. При вычислении элементов этого массива сначала полагается $P_{i,n+1}^{k-1} = P_{n+1,j}^{k-1} = 0$, $i, j = 1, \dots, n$, а затем вычисляются элементы массива по формуле:

$$P_{i,j}^{k-1} = \left[(1-i)T_{i,j}^{k-1} + (1-i)P_{i+1,j}^{k-1} + (1+i)P_{i,j+1}^{k-1} \right] / 2,$$

когда индексы принимают последовательно значения $i, j = n, \dots, 1$.

При программировании решения системы из в) будут в массиве с элементами $Q_{i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$. При вычислении элементов этого массива сначала полагается $Q_{i,0}^{k-1} = Q_{0,j}^{k-1} = 0$, $i, j = 1, \dots, n$, а затем вычисляются элементы массива по формуле:

$$Q_{i,j}^{k-1} = \left[(1+i)P_{i,j}^{k-1} + (1+i)Q_{i-1,j}^{k-1} + (1-i)Q_{i,j-1}^{k-1} \right] / 2,$$

когда индексы принимают последовательно значения $i, j = 1, \dots, n$.

При программировании решения системы из г) будут в массиве с элементами $W_{i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$. При вычислении элементов этого массива сначала полагается $W_{i,n+1}^{k-1} = W_{n+1,j}^{k-1} = 0$, $i, j = 1, \dots, n$, а затем вычисляются элементы массива по формуле:

$$W_{i,j}^{k-1} = \left[(1-i)Q_{i,j}^{k-1} + (1-i)W_{i+1,j}^{k-1} + (1+i)W_{i,j+1}^{k-1} \right] / 2,$$

когда индексы принимают последовательно значения $i, j = n, \dots, 1$.

4. Определяется квадрат нормы ошибки:

$$E_{k-1} = \left\| \bar{\psi}^{k-1} \right\|_{D^*C^{-1}D}^2 = \langle \bar{r}^{k-1}, \bar{w}^{k-1} \rangle h^{-2} = \langle \bar{r}_1^{k-1}, \bar{w}_1^{k-1} \rangle h^{-2}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

При программировании $w_{1,i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$ – элементы массива. При вычислениях элементов этого массива полагается:

$$w_{1,i,j}^{k-1} = \operatorname{Re} W_{i,j}^{k-1}, \quad i, j = 1, \dots, n+1.$$

И

$$E_{k-1} = \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n r_{1,i,j}^{k-1} w_{1,i,j}^{k-1} \right) h^{-2}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

5. Ставится условие остановки итераций:

$$E_{k-1}/E_0 < E^2, \quad E \in (0; 1), \quad k \in \mathbb{N},$$

где E – задаваемая величина.

6. Дополнительно вычисляется вектор:

$$\bar{\eta}^{k-1} : \bar{\eta}_1^{k-1} = h^4 \Lambda \bar{w}_1^{k-1}, \quad \bar{\eta}_2^{k-1} = \bar{0}, \quad k \in \mathbb{N},$$

подробнее так:

$$\text{а) } \bar{q}_1^{k-1} = h^2 A \bar{w}_1^{k-1}, \quad \text{б) } \bar{\eta}_1^{k-1} = h^2 A \bar{q}_1^{k-1}.$$

При программировании полагается, что:

$$w_{1,i,0}^{k-1} = w_{1,i,1}^{k-1}, \quad i = 1, \dots, n, \quad w_{1,0,j}^{k-1} = w_{1,1,j}^{k-1}, \quad j = 1, \dots, n.$$

При программировании $q_{1,i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$ – элементы массива. Элементы этого массива вычисляются по формуле:

$$\text{а) } q_{1,i,j}^{k-1} = 4w_{1,i,j}^{k-1} - w_{1,i-1,j}^{k-1} - w_{1,i+1,j}^{k-1} - w_{1,i,j-1}^{k-1} - w_{1,i,j+1}^{k-1}, \quad i, j = 1, \dots, n,$$

а затем полагается, что:

$$q_{1,i,n+1}^{k-1} = 0, \quad q_{1,i,0}^{k-1} = q_{1,i,1}^{k-1}, \quad i = 1, \dots, n, \quad q_{1,n+1,j}^{k-1} = 0, \quad q_{1,0,j}^{k-1} = q_{1,1,j}^{k-1}, \quad j = 1, \dots, n.$$

При программировании $\eta_{1,i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$ – элементы массива. Элементы этого массива вычисляются по формуле:

$$\text{б) } \eta_{1,i,j}^{k-1} = 4q_{1,i,j}^{k-1} - q_{1,i-1,j}^{k-1} - q_{1,i+1,j}^{k-1} - q_{1,i,j-1}^{k-1} - q_{1,i,j+1}^{k-1}, \quad i, j = 1, \dots, n.$$

7. Дополнительно находится вектор:

$$\xi^{k-1} \in \mathbb{R}^{2N} : h^4 C \xi^{k-1} = \bar{\eta}^{k-1}, \quad k \in \mathbb{N},$$

что равносильно последовательному решению четырех систем линейных алгебраических уравнений с треугольными матрицами:

$$\text{а) } \bar{T}^{k-1} \in \mathbb{C}^N : hL\bar{T}^{k-1} = \bar{H}^{k-1}, \quad \text{б) } \bar{P}^{k-1} \in \mathbb{C}^N : hL^*\bar{P}^{k-1} = \bar{T}^{k-1}.$$

$$\text{в) } \bar{Q}^{k-1} \in \mathbb{C}^N : hL\bar{Q}^{k-1} = \bar{P}^{k-1}, \quad \text{г) } \bar{\Xi}^{k-1} \in \mathbb{C}^N : hL^*\bar{\Xi}^{k-1} = \bar{Q}^{k-1}.$$

При программировании решения системы из а) будут в массиве с элементами $T_{i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$. При вычислении элементов этого массива сначала полагается $T_{i,0}^{k-1} = T_{0,j}^{k-1} = 0$, $i, j = 1, \dots, n$, а затем вычисляются элементы массива по формуле:

$$T_{i,j}^{k-1} = \left[(1+i)\eta_{1,i,j}^{k-1} + (1+i)T_{i-1,j}^{k-1} + (1-i)T_{i,j-1}^{k-1} \right] / 2,$$

когда индексы принимают последовательно значения $i, j = 1, \dots, n$.

При программировании решения системы из б) будут в массиве с элементами $P_{i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$. При вычислении элементов этого массива сначала полагается $P_{i,n+1}^{k-1} = P_{n+1,j}^{k-1} = 0$, $i, j = 1, \dots, n$, а затем вычисляются элементы массива по формуле:

$$P_{i,j}^{k-1} = \left[(1-i)T_{i,j}^{k-1} + (1-i)P_{i+1,j}^{k-1} + (1+i)P_{i,j+1}^{k-1} \right] / 2,$$

когда индексы принимают последовательно значения $i, j = n, \dots, 1$.

При программировании решения системы из в) будут в массиве с элементами $Q_{i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$. При вычислении элементов этого массива сначала полагается $Q_{i,0}^{k-1} = Q_{0,j}^{k-1} = 0$, $i, j = 1, \dots, n$, а затем вычисляются элементы массива по формуле:

$$Q_{i,j}^{k-1} = \left[(1+i)P_{i,j}^{k-1} + (1+i)Q_{i-1,j}^{k-1} + (1-i)Q_{i,j-1}^{k-1} \right] / 2,$$

когда индексы принимают последовательно значения $i, j = 1, \dots, n$.

При программировании решения системы из г) будут в массиве с элементами $\Xi_{i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$. При вычислении элементов этого массива сначала полагается $\Xi_{i,n+1}^{k-1} = \Xi_{n+1,j}^{k-1} = 0$, $i, j = 1, \dots, n$, а затем вычисляются элементы массива по формуле:

$$\Xi_{i,j}^{k-1} = \left[(1-i)Q_{i,j}^{k-1} + (1-i)\Xi_{i+1,j}^{k-1} + (1+i)\Xi_{i,j+1}^{k-1} \right] / 2,$$

когда индексы принимают последовательно значения $i, j = n, \dots, 1$.

8. Определяется итерационный параметр:

$$\tau_k = \frac{\langle D\bar{w}^{k-1}, \bar{w}^{k-1} \rangle}{\langle C^{-1}D\bar{w}^{k-1}, D\bar{w}^{k-1} \rangle} = \frac{\langle \bar{\eta}^{k-1}, \bar{w}^{k-1} \rangle}{\langle \xi^{k-1}, \bar{\eta}^{k-1} \rangle} = \frac{\langle \bar{\eta}_1^{k-1}, \bar{w}_1^{k-1} \rangle}{\langle \xi_1^{k-1}, \bar{\eta}_1^{k-1} \rangle}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

При программировании $\xi_{1,i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$ – элементы массива. При вычислениях элементов этого массива полагается:

$$\xi_{1,i,j}^{k-1} = \text{Re} \Xi_{i,j}^{k-1}, \quad i, j = 1, \dots, n.$$

При программировании:

$$\tau_k = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \eta_{1,i,j}^{k-1} w_{1,i,j}^{k-1} / \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \xi_{1,i,j}^{k-1} \eta_{1,i,j}^{k-1}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

9. Вычисляется новое приближение:

$$\bar{u}^k = \bar{u}^{k-1} - \tau_k \bar{w}^{k-1}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Это приближение и определяется по соответствующей формуле:

$$\bar{U}^k = \bar{U}^{k-1} - \tau_k \bar{W}^{k-1}.$$

При программировании $u_{1,i,j}^k$, $i, j = 0, \dots, n+1$ – элементы массива.

Следующие элементы этого массива вычисляются по формуле:

$$u_{1,i,j}^k = u_{1,i,j}^{k-1} - \tau_k w_{1,i,j}^{k-1}, \quad i, j = 1, \dots, n.$$

Они принимаются за приближенное решение, если до этого выполнялось условие остановки итераций.

Эксперименты при численном решении модельной задачи для бигармонического уравнения

В рассматриваемой задаче:

$$\Delta^2 \bar{u}_1 = \bar{f}_1, \quad \text{в } \Omega, \quad \Delta \bar{u}_1|_{\Gamma_1} = \bar{u}_1|_{\Gamma_1} = 0, \quad \frac{\partial \Delta \bar{u}_1}{\partial \bar{n}}|_{\Gamma_2} = \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial \bar{n}}|_{\Gamma_2} = 0,$$

где

$$\Omega = (0; b_1) \times (0; b_2), \quad \Gamma_1 = \{b_1\} \times (0; b_2) \cup (0; b_1) \times \{b_2\}, \quad \Gamma_2 = \{0\} \times (0; b_2) \cup (0; b_1) \times \{0\},$$

полагается, что $b_1 = b_2 = 2,5$,

$$\bar{f}_1(x; y) = 3((25 - 4x^2)(125 - 4x^2) + 12(25 - 4x^2)(25 - 4y^2) + (25 - 4y^2)(125 - 4y^2)) / 8000,$$

т.е.

$$\bar{u}_1(x; y) = (25 - 4x^2)(125 - 4x^2)(25 - 4y^2)(125 - 4y^2) / 1024000.$$

При аппроксимации этой задачи выбираются значения $m = n = 70, 72, 74, \dots, 90$. Для численного решения получаемых систем линейных алгебраических уравнений $\Lambda \bar{u}_1 = \bar{f}_1$ применим приведенный ранее алгоритм, полагая $\bar{u}_1^0 = \bar{0}$, $E = 0,001$. Для функции $k = k(n)$ числа итераций в зависимости от n приводится график. При условии остановки в итерационном процессе с выбранной относительной погрешностью $E \in (0; 1)$, можно заметить, что вычисления на ЭВМ экспериментально подтверждают асимптотическое поведение, независимость k – количества итераций от $m(n)$ – количества узлов сетки по координатным направлениям осей $Ox(Oy)$ для получения E – задаваемой относительной погрешности решения линейных систем алгебраических уравнений (см. рис.).

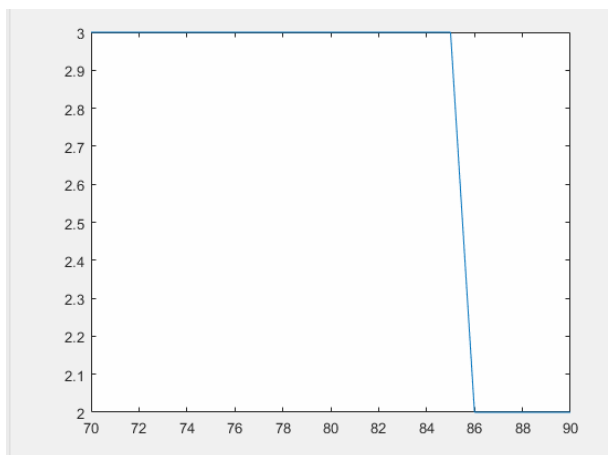


График зависимости k – количества итераций от $m(n)$ – количества узлов сетки
по направлениям координат $Ox(Oy)$ при заданной относительной погрешности счета $E = 0,001$

Литература

1. Самарский, А.А. Методы решения сеточных уравнений / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1978. – 591 с.
2. Оганесян, Л.А. Вариационно-разностные методы решения эллиптических уравнений / Л.А. Оганесян, Л.А. Руховец. – Ереван: Изд-во АН АрмССР, 1979. – 235 с.

3. Обэн, Ж.П. Приближённое решение эллиптических краевых задач / Ж.П. Обэн. – М.: Мир, 1977. – 383 с.

Поступила в редакцию 27 ноября 2018 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2019, vol. 11, no. 1, pp. 34–42*

DOI: 10.14529/mmph190105

FAST SOLUTION OF A MODEL PROBLEM FOR THE BIHARMONIC EQUATION

A.L. Ushakov

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

The biharmonic equation in a domain of rectangular shape when boundary conditions are mixed is being considered. Numerical solution of this boundary value problem uses iterative factorization on fictitious continuation after finite-difference approximation of the problem to be solved. Eventually, everything is reduced to solving the linear systems of algebraic equations, the matrices of which are triangular with three or less nonzero elements in lines. If approximation error of the initial problem is sufficiently small, the demanded relative error of the used iterative process gets obtained in several iterations. In this case, the developed iterative method turns out to be the method that has optimal asymptotics by the number of actions in arithmetic operations. The proposed iterative method essentially uses specificities of the obtained model problem. Such a problem can arise in methods of the type of fictitious components, regions and spaces, when boundary value problems with elliptic equations in the regions of sufficiently arbitrary shape are being solved. The algorithm at implementation of the iterative process, when the choice of iterative parameters is made automatically using the method of minimal corrections, is given. The criterion for process termination after achieving the preliminarily determined ratio error is specified. Graphic result of a computational experiment that proves the asymptotic optimality of the iterative method in computational outlay is given. Complex analysis gets essentially used when developing the method.

Keywords: fictitious continuation; iterative factorizations.

References

1. Samarskiy A.A. *Metody resheniya setochnykh uravneniy* (Methods for solving finite-difference equations). Moscow, Nauka Publ., 1978, 591 p. (in Russ.).
2. Oganesyanyan L.A., Rukhovets L.A. *Variatsionno-raznostnye metody resheniya ellipticheskikh uravneniy* (Variation-difference methods for solving elliptic equations). Erevan, Izd-vo AN ArmSSR Publ., 1979, 235 p. (in Russ.).
3. Oben Zh.P. *Priblizhennoe reshenie ellipticheskikh kraevykh zadach* (Approximate solution of elliptic boundary value problems). Moscow, Mir Publ., 1977, 383 p. (in Russ.). [Aubin J.-P. Approximation of elliptic boundary-value problems. New York, Wiley-Interscience, 1972, 360 p.]

Received November 27, 2018

CONTROL OF COMPOSITE NONLINEAR DEFORMATION BY LOCAL CURVATURE OF YARNS

S.B. Sapozhnikov, A.V. Kheruvimov, A.S. Khoruzhiy

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: sapozhnikovsb@susu.ru

Using the refined theory of dry bundles, we analyzed the curvature (length diversity) of yarns in the fabric composite for obtaining the maximum effect of pseudo-ductility (constant yield stresses during the deformation). Because of length diversity, yarns destruction happens consequently, starting with the straight yarns and ending with the most curved ones. The polymer matrix ensures a monolithic structure and high damping of the oscillations due to the intensification of matrix shears during tension/compression of the composite. To simulate an ideal elastoplastic stress-strain diagram of the composite, we formulated the law of changes in fiber lengths, the mechanical properties of which were considered to be the same. To study the technological possibilities of the local curvatures of yarns in fabric preforms, we performed experiments using the indenting method and arrays of conical and flat needles. We showed that conical needles allow us to obtain simultaneous curvature of warp and weft yarns to the same extent. The needle spacing controls the ratio of straight and curved yarns; so, by changing the spacing we can bring this ratio closer to the value required for getting the needed length of the yield plateau. In the case of flat needles with various orientation to the warp yarns, we can obtain anisotropic yarns curvature (of only one yarns family, for example). For experimental deformation of the fabrics with locally curved yarns we used aramid fabrics of plain weave and carbon fabrics of twill weave.

Keywords: fabric composite; pseudo-ductility; curvature of yarns; dry bundles theory; indentation.

Introduction. Modern fiber polymer composites gain increasing popularity in the construction of critical structures for the aerospace industry due to their high strength and stiffness [1, 2]. However, their mechanical characteristics also include brittleness (small possible deformations) and simultaneous failure [3, 4], which decrease the operational reliability of constructions with stress concentration zones (for example, open holes and roundings) and small safety factors. Therefore, substantial nonlinear deformation, pseudo-ductility, together with the retained high strength and stiffness, is highly desirable in composites. Due to the growth of possible technical applications pseudo-ductility of composites has been drawing rising attention of researchers last 5–7 years, which can be seen from the number surge of relevant SCOPUS papers (Fig. 1).

Nowadays researches on pseudo-ductility are connected with hybrid composites, which contain both stiff and compliant fibers [5, 6]. Because of stiff fibers (carbon) composites have a high elastic modulus, and compliant fibers (glass, aramid) support stiff ones during the deformation process [7, 8], creating conditions for their kinematic loading and gradual failure. The certain ratio of stiff and compliant fibers results in a yield plateau on the stress-strain diagram [9, 10]. The length of this plateau depends on the distribution of the stiff fibers strength: longer plateau corresponds to wider distribution [7].

Therefore, the yield plateau length adjustment is limited and depends on the fibers production technology. Moreover, as fabric yarns consist of hundreds and thousands of elementary fibers, the distribution of the yarn's strength is insignificant. To avoid these restrictions, we proposed a modification method for UD strips and materials of flat weave (e.g., fabric, twill). This method is based on the regular local bending of yarns, which creates the preset length diversity of yarns. Hence, there is no need to combine stiff and compliant yarns: curved and straight yarns in the same layer will be compliant and stiff, respectively. Polymer treatment creates the composite layer with pseudo-plastic properties, which depend only on the length diversity of yarns. Furthermore, shear strains in affected areas of this layer intensify the damping of oscillations.

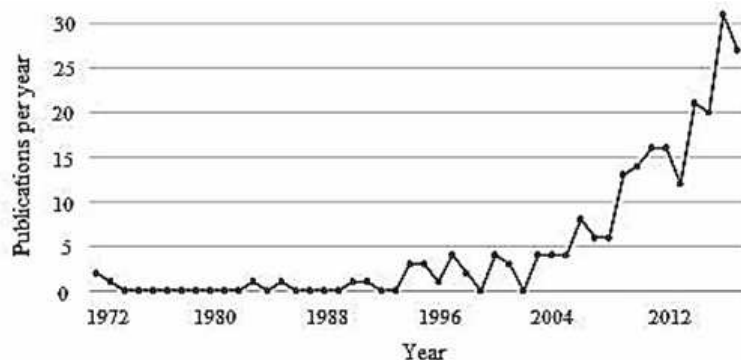


Fig. 1. Number of SCOPUS publications on topic *pseudo ductility composites* per year (1972–2017)

Model. Consider the tension of a flat UD layer with locally curved yarns of different lengths (Fig. 2, a). Yarns have the same mechanical properties: elastic modulus E , ultimate stress X , linear postcritical behavior up to ultimate failure, which is characterized by softening modulus E' . This model of UD composite behavior at the kinematic loading (Fig. 2, b, solid line) was proposed in [11]. For curved yarns the stress-strain curve has the same shape but is shifted by the value of specific elongation δ (Fig. 2, b, dashed line). To model the functioning of the ideal elastic-plastic material (Fig. 2, c) with the defined yield strength σ_T and the yield plateau of the maximal length ε_b at tension it is necessary to obtain the length function (the dependence of yarn's specific elongation on the yarn's number).

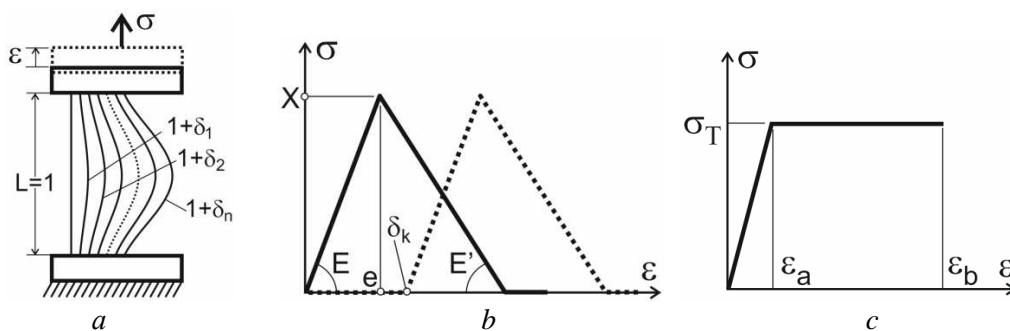


Fig. 2. Properties of curved yarns

For simplicity, we assume that the composite has N yarns or groups of yarns of different lengths. Piecewise linear dependence of the stress s on the deformation ε of i -th yarn with the arbitrary curvature δ_i can be formulated as follows:

$$s(\varepsilon, \delta_i) = \begin{cases} 0, & 0 < \varepsilon < \delta_i; \\ E(\varepsilon - \delta_i), & \delta_i < \varepsilon < \delta_i + \frac{X}{E}; \\ X - E' \left(\varepsilon - \delta_i - \frac{X}{E} \right), & \delta_i + \frac{X}{E} < \varepsilon < \delta_i + \frac{X}{E} + \frac{X}{E'}; \\ 0, & \varepsilon > \delta_i + \frac{X}{E} + \frac{X}{E'}. \end{cases} \quad (1)$$

Superposition of stresses (1) for the case of the parallel connection of yarns with different δ_i is written as follows:

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s(\varepsilon, \delta_i). \quad (2)$$

We calculated stress-strain diagrams of yarns with the defined curvatures by using the superposition method, implemented in MathCAD package.

Calculation example. In linear approximation length function $\delta_i = i \cdot d$, where d is the elongation step, and i is yarn's number. For modeling of yarns made of carbon fibers (with the volume ratio ~60 %) in the epoxy matrix [12] we used the following mechanical parameters: $E = 150$ GPa, $X = 1500$ MPa и $E' = 300$ GPa. Fig. 3 presents the diagram of kinematic loading of one yarn and yarns bundle with the

fixed elongation step $d = 0,2\%$. This value of the elongation step corresponds to the yield strength oscillations less than 5% , which can be neglected in engineering applications.

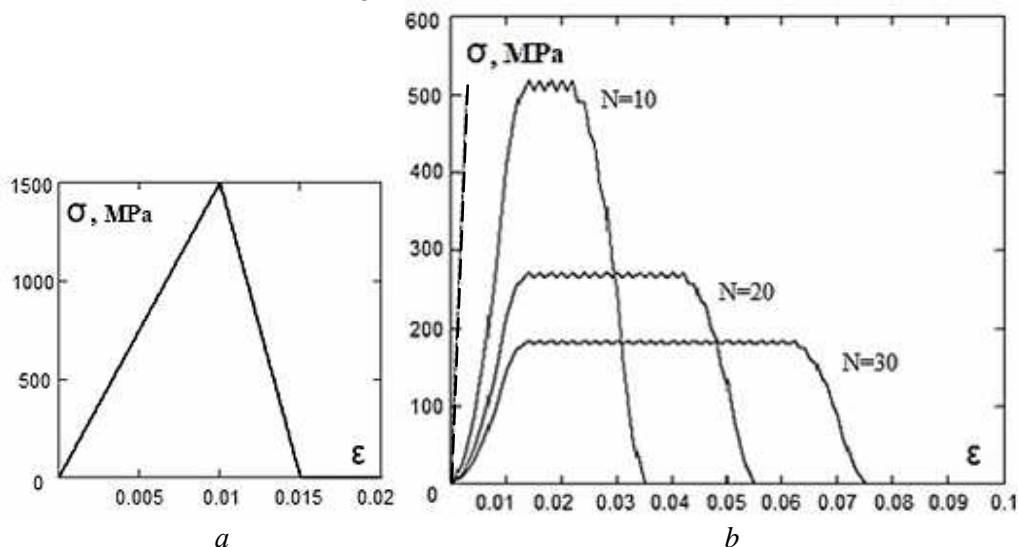


Fig. 3. Diagrams of kinematic loading of (a) one yarn and (b) 10, 20, and 30 yarns of different length

Fig. 3, *b* shows that the composite's yield plateau is longer for yarns with a wider length range. However, at the same time yield strength decreases, and specific energy of deformation (area under the stress-strain curve) remains the same and equal to $\sim 11,3$ MPa, which coincides with the fracture energy of one yarn at the kinematic loading.

We calculated the elastic range of the stress-strain curve, using dry bundles approximation. Therefore, we neglected the bending stiffness and yarn's shift in the epoxy matrix. In real cases, slightly curved yarns will have a higher elastic modulus, while straightening [13]. Moreover, in the initial section of the stress-strain curve, the composite will have bigger stiffness than the simulated predictions (see dashed line in Fig. 3, *b*).

Experimental tests. To validate our models, we experimentally investigated aramid fabrics of plain weave (P110) [14], modified by indenting.

Firstly, we used cylindrical needles of diameter 2 mm with a sharp conical end. Fig. 4, *b* shows that the fabric area, affected by a needle, is limited to the square 5×5 mm². Outside this area the fabric is not deformed. So, if the indenting step is larger than 5 mm, there will be straight yarns in the fabric. The width of P110 fabric yarns equals to 0,5 mm. Therefore, if the indenting step equals to 5 mm, in repeated affected areas of the fabric we will have almost symmetrical arrays of curved yarns of different lengths (5 to the left and 5 to the right from the needle hit). These lengths for Fig. 4, *b* are: 5,00, 5,10, 5,22, 5,37, and 5,60 mm (left array); 5,45, 5,35, 5,20, 5,15, and 5,00 mm (right array). Of course, in practice, an indenter will hit arbitrary places, so the curvatures and lengths of yarns will vary.

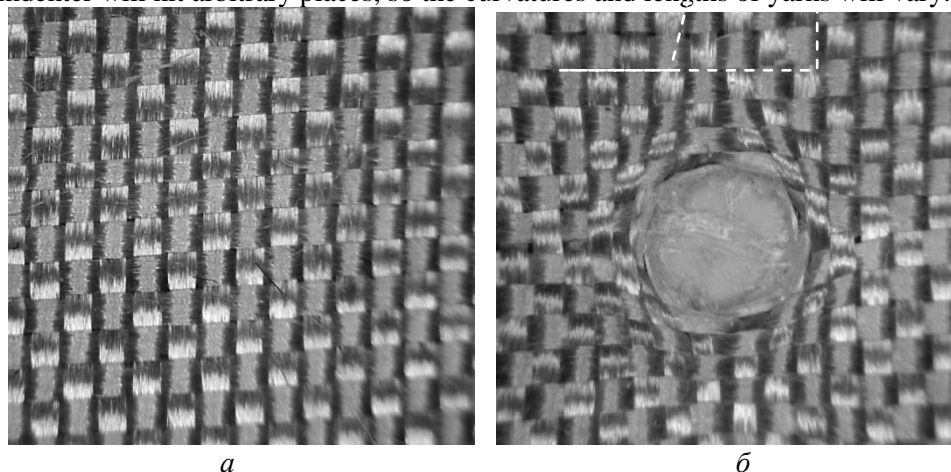


Fig. 4. Aramid fabric of plain weave P110: a) before indenting; b) after indenting by conical needle

For the sample, depicted in Fig. 4, *b* (single hit), we calculated the stress-strain curve (see Fig. 5), using mechanical properties of aramid yarn RUSAR [14]: linear density ~ 28 tex, $E = 70$ GPa, $X = 2000$ MPa, $E' = 100$ GPa. The dashed line in Fig. 5 stands for the yield strength ~ 400 MPa of the sample with the periodic indenting through the whole fabric area (indenting step 5 mm). As both warp and weft yarns are curved, mechanical properties during tension along these yarns will be the same (isotropic modification of fabric).

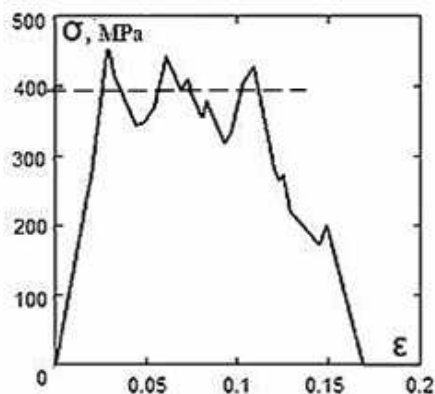


Fig. 5. Stress-strain diagram of the sample, depicted in Fig. 5, *b*

Secondly, we used flat needles of width, equal to 3 mm, and thickness, equal to 1 mm (Fig. 6, *a*). In this case, periodic indenting (direction of hits is 45° to horizontal/vertical lines, shown by white arrows on Fig. 6) led to the anisotropic curvature: only warp (vertical) yarns were curved, weft yarn remained straight (Fig. 6, *b*). Fig. 6, *c* presents the fabric of twill weave modified by indenting by conical needle oriented at 45° to horizontal/vertical lines. Because of high lateral yarn's stiffness the area, affected by the flat needle or the conical indenter of a diameter of 3 mm, has quite big linear dimension: 100 mm. White ellipses are the needle orientation schemes.

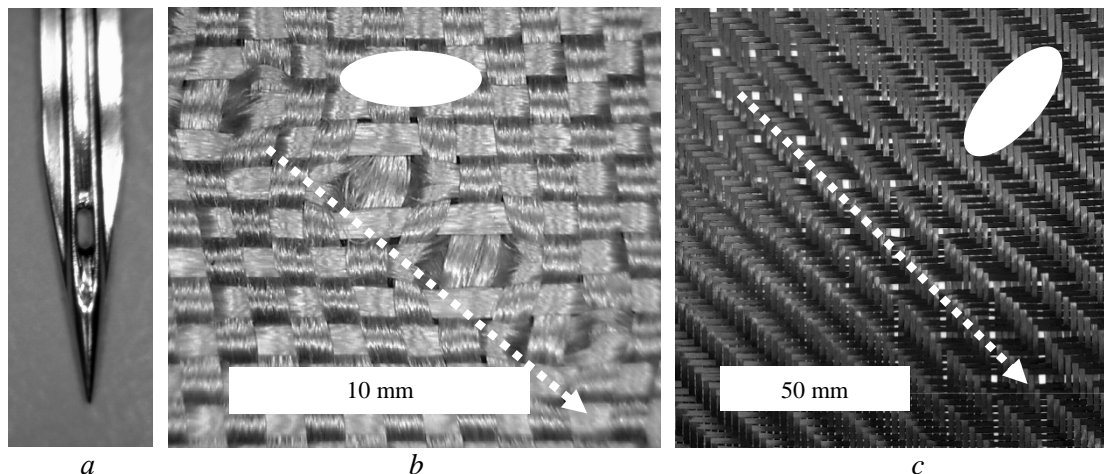


Fig. 6. Flat needle (*a*) and fabrics of *b*) plain and *c*) twill weave after indenting by flat and conical needle, respectively

Conclusions. Modeling showed the great potential of the method of local curvature of yarns, consisted of brittle fibers, for achieving a long yield plateau of a composite. Failure of high-quality carbon fibers happens at relative deformations of around 1%. By introducing length diversity of yarns (with the elongation step of 0,2%) we achieved ultimate stress of approximately 300 MPa and more than 500 MPa, and failure deformation more than 4% and 2% for the case of 20 and 10 different yarn's lengths, respectively.

Indenting by conical needles of a diameter of 2 mm with the indenting step of 5 mm along warp and weft yarns of aramid fabric of flap weave P110 resulted in the material with the yield strength of 400 MPa and yield plateau of 10%, which is unattainable for traditional fabric composites. These characteristics will allow us to use the indenting technology for the aerospace constructions with stress concentration zones (e.g. holes or roundings). Because of pseudo-ductility our technology will decrease

stress concentrations and increase failure loading, the same effect as in hybrid composites [10, 15], where layers of fiberglass and carbon fibers alternate, or carbon and glass fibers are mingled in one yarn of a composite.

This work was financially supported by the Russian Science Foundation (project No. 18-19-00377).

References

1. Daniel I.M., Ishai O. *Engineering mechanics of composite materials*. Oxford university press, 2006, 432 p.
2. Gibson R.F. *Principles of composite materials mechanics*. CRC Press, 2007, 579 p.
3. Kaddour A.S., Hinton M.J., Li S., Smith P.A. Damage prediction in polymeric composites: Update of Part (A) of the Third World-Wide Failure Exercise (WWFE-III). *Transactions of 18th International Conference on Composite Materials*, South Korea, QinetiQ Ltd, 2011, 5 p. Available at: [http://www.iccm-central.org/Proceedings/ICCM18proceedings/data/2.%20Oral%20Presentation/Aug23\(Tuesday\)/T45%20Mechanical%20and%20Physical%20Properties/T45-5-IF1621.pdf](http://www.iccm-central.org/Proceedings/ICCM18proceedings/data/2.%20Oral%20Presentation/Aug23(Tuesday)/T45%20Mechanical%20and%20Physical%20Properties/T45-5-IF1621.pdf), accessed 12.12.2018
4. Yan S., Zeng X., Long A. Experimental assessment of the mechanical behaviour of 3D woven composite T-joints. *Composites part B: Engineering*, 2018, Vol. 154, pp. 108–113. DOI: 10.1016/j.compositesb.2018.08.007
5. Kretsis G. A review of the tensile, compressive, flexural and shear properties of hybrid fibre reinforced plastics. *Composites*, 1987, Vol. 18, Issue 1, pp. 13–23. DOI: 10.1016/0010-4361(87)90003-6
6. Manders P.W., Bader M.G. The strength of hybrid glass/carbon fibre composites. Part 1. Failure strain enhancement and failure mode. *Journal of Material Science*, 1981, Vol. 16, Issue 8, pp. 2233–2245. DOI: 10.1007/BF00542386
7. Swolfs Y., Gorbatikh L., Verpoest I. Fibre hybridisation in polymer composites: a review. *Composites part A: Applied Science and Manufacturing*, 2014, Vol. 67, pp. 181–200. DOI: 10.1016/j.compositesa.2014.08.027
8. Sapozhnikov S.B. *Defekty i prochnost' armirovannykh plastikov* (Defects and strength of reinforced plastics), Chelyabinsk, Izdatel'stvo Chelyabinskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta Publ., 1994, 161 p. (in Russ.).
9. Fuller J., Wisnom M.R. Damage suppression in thin ply angle-ply carbon/epoxy laminates. *Transactions of 19th International Conference on Composite Materials (ICCM19)*, Montreal, July, 2013, 8 p.
10. Czél G., Wisnom M.R. Demonstration of pseudo-ductility in high performance glass/epoxy composites by hybridisation with thin-ply carbon prepreg. *Composites part A: Applied Science and Manufacturing*, 2013, Vol. 52, pp. 23–30. DOI: 10.1016/j.compositesa.2013.04.006
11. Sandhu R.S. Nonlinear response of unidirectional and angle-ply laminates. *15th Structural Dynamics and Materials Conference*, Las Vegas, NV, U.S.A., 1974. DOI: 10.2514/6.1974-380
12. Barbero E.J. *Introduction to Composite Materials Design*. Boca Raton: CRC Press, 2018, 525 p. <http://barbero.cadec-online.com/icmd>, accessed 24.01.2019
13. Skudra A.M., Bulavs F.Ya. *Prochnost' armirovannykh plastikov* (Strength of reinforced plastics). Moscow, Khimiya Publ., 1982, 213 p. (in Russ.).
14. <http://www.aramid.ru/ru>, accessed 12.12.2018
15. Yu H.N., Longana M.L., Jalalvand M., Wisnom M.R., Potter K.D. Pseudoductility in intermingled carbon/glass hybrid composites with highly aligned discontinuous fibres. *Composites part A: Applied Science and Manufacturing*, 2015, Vol. 73, pp. 35–44. DOI: 10.1016/j.compositesa.2015.02.14

Received October 1, 2018

**УПРАВЛЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ ДЕФОРМИРОВАНИЯ КОМПОЗИТА
С ПОМОЩЬЮ ЛОКАЛЬНОГО ИСКРИВЛЕНИЯ НИТЕЙ****С.Б. Сапожников, А.В. Херувимов, А.С. Хоружий***Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация**E-mail: sapozhnikovsb@susu.ru*

На основе уточнённой теории сухих пучков выполнен анализ необходимой искривлённости («разнодлинности») нитей в тканевом композите для получения максимального эффекта псевдопластичности – постоянства напряжений «текучести» при деформировании. Разнодлинность обеспечивает последовательное разрушение нитей: сначала разрушаются прямолинейные нити, а в конце – максимально искривлённые. Наличие полимерной матрицы обеспечивает монолитность и высокое демпфирование колебаний за счёт интенсификации сдвигов в матрице при растяжении/сжатии композита. Для имитации идеальной упругопластической диаграммы растяжения композита был найден закон изменения длин волокон, механические свойства которых считались одинаковыми. Экспериментальные исследования технологических возможностей локального искривления нитей в тканевых преформах выполнены методом индентирования массивом конических или плоских игл. Показано, что при использовании конических игл реализуется синхронное искривление нитей основы и утка в равной степени. Изменяя шаг игл, можно программировать соотношение прямолинейных и искривлённых нитей так, чтобы оно максимально соответствовало расчётной величине, необходимой для получения заданной длины площадки «текучести». Применение плоских игл с различной ориентацией к направлению основных нитей позволяет получать «анизотропное» искривление нитей, например, искривление лишь одного семейства. Экспериментальные исследования деформирования тканей с локально искривлёнными нитями выполнены на арамидных тканях полотняного переплетения и тканях из углеродных волокон саржевого плетения.

Ключевые слова: тканевый композит; псевдопластичность; искривлённость нитей; теория сухого пучка; индентирование.

Литература

1. Daniel, I.M. Engineering mechanics of composite materials / I.M. Daniel, O. Ishai. – Oxford university press, 2006. – 432 p.
2. Gibson, R.F. Principles of composite materials mechanics / R.F. Gibson. – CRC Press, 2007. – 579 p.
3. Kaddour, A.S. Damage prediction in polymeric composites: Up-date of Part (A) of the Third World-Wide Failure Exercise (WWFE-III) / A.S. Kaddour, M.J. Hinton, S. Li, P.A. Smith // Transactions of 18th International Conference on Composite Materials. – South Korea, QinetiQ Ltd, 2011. – 5 p. Available at: [http://www.iccm-central.org/Proceedings/ICCM18proceedings/data/2.%20Oral%20Presentation/Aug23\(Tuesday\)/T45%20Mechanical%20and%20Physical%20Properties/T45-5-IF1621.pdf](http://www.iccm-central.org/Proceedings/ICCM18proceedings/data/2.%20Oral%20Presentation/Aug23(Tuesday)/T45%20Mechanical%20and%20Physical%20Properties/T45-5-IF1621.pdf), accessed 12.12.2018
4. Yan, S. Experimental assessment of the mechanical behaviour of 3D woven composite T-joints / S. Yan, X. Zeng, A. Long // Composites part B: Engineering. – 2018. – Vol. 154. – P. 108–113.
5. Kretsis, G. A review of the tensile, compressive, flexural and shear properties of hybrid fibre reinforced plastics / G. Kretsis // Composites. – 1987. – Vol. 18, Issue 1. – P. 13–23.
6. Manders, P.W. The strength of hybrid glass/carbon fibre composites. Part 1. Failure strain enhancement and failure mode / P.W. Manders, M.G. Bader // Journal of Material Science. – 1981. – Vol. 16, Issue 8. – P. 2233–2245.
7. Swolfs, Y. Fibre hybridisation in polymer composites: a review / Y. Swolfs, L. Gorbatikh, I. Verpoest // Composites part A: Applied Science and Manufacturing. – 2014. – Vol. 67. – P. 181–200.

8. Сапожников, С.Б. Дефекты и прочность армированных пластиков / С.Б. Сапожников. – Челябинск: Издательство Челябинского государственного технического университета, 1994. – 161 с.

9. Fuller, J. Damage suppression in thin ply angle-ply carbon/epoxy laminates / J. Fuller, M.R. Wisnom // Transactions of 19th International Conference on Composite Materials (ICCM19). – Montreal, July 2013. – 8 p.

10. Czél, G. Demonstration of pseudo-ductility in high performance glass/epoxy composites by hybridisation with thin-ply carbon prepreg / G. Czél, M.R. Wisnom // Composites part A: Applied Science and Manufacturing. – 2013. – Vol. 52. – P. 23–30.

11. Sandhu, R.S. Nonlinear response of unidirectional and angle-ply laminates / R.S. Sandhu // 15th Structural Dynamics and Materials Conference. – Las Vegas, NV, U.S.A., 1974.

12. Barbero, E.J. Introduction to Composite Materials Design / E.J. Barbero. – Boca Raton: CRC Press, 2018. – 525 p.

13. Скудра, А.М. Прочность армированных пластиков / А.М. Скудра, Ф.Я. Булавс. – М.: Химия, 1982. – 213 с.

14. <http://www.aramid.ru/ru> (дата обращения: 12.12.2018).

15. Pseudoductility in intermingled carbon/glass hybrid composites with highly aligned discontinuous fibres / H.N. Yu, M.L. Longana, M. Jalalvand *et al.* // Composites part A: Applied Science and Manufacturing. – 2015. – Vol. 73. – P. 35–44.

Поступила в редакцию 1 октября 2018 г

КРУТИЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ СТЕРЖНЕВЫХ КОНСТРУКЦИЙ С ОСЕВОЙ НЕОДНОРОДНОСТЬЮ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

С.Н. Царенко

Донецкий национальный технический университет, г. Донецк, Украина

E-mail: tzarenko@gmail.com

Рассматривается динамика крутильных колебаний в стержнях с осевой неоднородностью крутильной жесткости. Стержни различной конфигурации имеют широкое применение для моделирования напряженно-деформированного состояния при статических и динамических нагрузках объектов машиностроения, строительства, биомеханики и пр. Целью работы является создание общего подхода для построения математических моделей крутильных колебаний стержней переменного сечения. В качестве объекта рассматривается упругий стержень, крутильная жесткость которого изменяется по степенному закону от продольной координаты. Динамический процесс описывается волновым уравнением, а его решение ищется методом Фурье. Для удобства решения граничных задач введены специальные функции на основе рекуррентных соотношений для функций Бесселя. С учетом свойства ортогональности собственных функций с весом получено выражение для квадрата нормы. В качестве примера рассмотрен случай колебаний от внезапного приложения нагрузки к одному концу стержня, у которого второй жестко закреплен. На свободном конце стержня предполагается наличие локальной инерционной нагрузки. Получены выражения для углов закручивания и крутящих моментов в сечениях стержня. Выполнено сравнение полученных результатов расчета в относительных величинах с упрощенной одномассовой моделью невесомого стержня.

Ключевые слова: крутильные колебания; вынужденные колебания; стержень переменной жесткости; упругий стержень; волновое уравнение; метод Фурье; функции Бесселя; собственные частоты; напряжения; деформации.

В упругих системах, входящих в состав разного рода механизмов и конструкций, наблюдается явление крутильных колебаний, которое может являться следствием технологического процесса или результатом негативных воздействий. Проблема крутильных колебаний рассматривается, как в рамках самостоятельной спектральной задачи, так и при исследовании параметров напряженно-деформированного состояния (НДС) в результате динамических воздействий нагрузок. Например, в работах [1, 2] рассматривается построение математических моделей для определения спектра собственных частот крутильных колебаний, включая выявление условий возникновения параметрических резонансов. Исследование параметров структуры и дефектов стержневых конструкций на основе анализа значений первых частот собственных крутильных колебаний рассматривается в статьях [3–5]. Расчетам упругих валов на динамическое воздействие нагрузок посвящены работы [6–8].

В некоторых работах колебания исследуются с учетом нелинейных параметров модели. Так влияние деформации поперечных сечений тонкостенных стержней на параметры колебательного процесса изучено в работе [9]. В статье [10] получено уравнение крутильных колебаний нелинейно деформируемых стержней, указан способ усреднения нелинейных свойств композиционных стержней. Однако для практических целей динамических расчетов упругих стержней наиболее широкое распространение получила волновая модель Сен-Венана и ее решение методом Фурье [11]. Применение метода Фурье для исследования колебаний конического вала с использованием функций Бесселя рассмотрено в работе [12], а случай, когда крутильная жесткость изменяется по линейному закону от продольной координаты, исследован в статье [13], однако в своих работах авторы ограничились лишь рассмотрением частотного уравнения.

Таким образом, исходя из того, что в теории расчетов в настоящее время нет единого подхода к построению математической модели крутильных колебаний для стержней, имеющих нели-

нейность геометрических и механических характеристик, поиск и развитие новых решений данной задачи является актуальной научно-практической проблемой.

В качестве математической модели рассматриваемого объекта примем упругий стержень длиной l , распределенный момент инерции масс поперечного сечения I_m и крутильная жесткость GI_x которого изменяется по степенному закону от продольной координаты x :

$$I_m = \gamma I_{x2} z^\alpha; \quad GI_x = GI_{x2} z^\alpha; \quad z = (1-k)\frac{x}{l} + k; \quad k = \sqrt[\alpha]{\frac{GI_{x1}}{GI_{x2}}} \quad (0 < k < 1), \quad (1)$$

где I_{x2} – момент инерции площади большего основания стержня; γ – плотность материала, показатель степени α зависит от конфигурации конструкции, например, для металлоконструкции пирамидальной формы $\alpha = 2$, для труб конической формы $\alpha = 3$, а для конического стержня сплошного сечения $\alpha = 4$ (рис. 1).

Уравнение углов поворота $\varphi(x, t)$ с учетом принятых обозначений, по аналогии с уравнением продольных колебаний [14] будет иметь вид:

$$z^\alpha \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + \alpha z^{\alpha-1} \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{\gamma l^2}{G(1-k)^2} z^\alpha \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} + \frac{l^2}{GI_{x2}(1-k)^2} p(z, t), \quad (2)$$

где G – модуль сдвига, $p(x, t)$ – внешняя нагрузка.

Найдем общее решение уравнения (2) при $p(z, t) \equiv 0$ (случай свободных колебаний).

Разделяя переменные, получаем уравнение для собственных функций, решение которого имеет вид [15]:

$$\Phi_n(z) = z^\nu (C_1 J_\nu(\lambda_n z) + C_2 Y_\nu(\lambda_n z)), \quad (3)$$

где

$$\nu = \frac{1-\mu}{2}; \quad \lambda_n = \frac{\omega_n l}{(1-k)c},$$

ω_n – собственные частоты колебаний, $J_\nu(z)$ и $Y_\nu(z)$ – функции Бесселя, $c = \sqrt{G/\gamma}$ – скорость распространения крутильных волн в стержне [9].

Для удобства решения задач с разными граничными условиями введем следующие обозначения функций:

$$A(\zeta) = \frac{\pi}{2} \zeta_0 (J_\nu(\zeta) Y_{\nu-1}(\zeta_0) - Y_\nu(\zeta) J_{\nu-1}(\zeta_0));$$

$$B(\zeta) = \frac{\pi}{2} \zeta_0 (Y_\nu(\zeta) J_\nu(\zeta_0) - J_\nu(\zeta) Y_\nu(\zeta_0));$$

$$C(\zeta) = \frac{\pi}{2} \zeta_0 (J_{\nu-1}(\zeta) Y_{\nu-1}(\zeta_0) - Y_{\nu-1}(\zeta) J_{\nu-1}(\zeta_0));$$

$$D(\zeta) = \frac{\pi}{2} \zeta_0 (Y_{\nu-1}(\zeta) J_\nu(\zeta_0) - J_{\nu-1}(\zeta) Y_\nu(\zeta_0)),$$

где $\zeta_0 = \lambda_n k$ – значение аргумента в начальной точке отсчета. Исходя из рекуррентных соотношений для функций Бесселя [16], представленные функции будут иметь следующие частные значения:

$$A(\zeta_0) = D(\zeta_0) = 1; \quad B(\zeta_0) = C(\zeta_0) = 0.$$

Используя принятые зависимости, произвольные постоянные в уравнении (3) можно выразить через угол поворота φ_0 и момент M_0 в нулевом сечении, тогда выражения для деформаций и усилий для произвольной формы колебаний можно представить в виде:

$$\Phi_n(z) = z^\nu \left(\varphi_0 k^{-\nu} A(\lambda_n z) + \frac{M_0 l}{GI_{x2}(1-k)} \frac{k^{\nu-1}}{\lambda_n} B(\lambda_n z) \right); \quad (4)$$

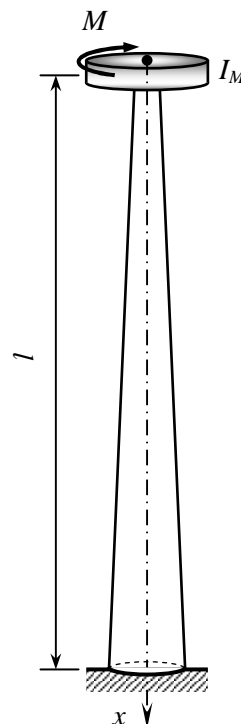


Рис. 1. Расчетная схема стержневидной конструкции с осевой неоднородностью крутильной жесткости

$$M_n(z) = \frac{GI_{x2}(1-k)}{l} z^{1-2\nu} \Phi'_n(z) = z^{1-\nu} \left(\varphi_0 \frac{GI_{x2}(1-k)}{l} k^{-\nu} \lambda_n C(\lambda_n z) + M_0 k^{\nu-1} D(\lambda_n z) \right). \quad (5)$$

На основании теоремы о взаимности работ [17], при отсутствии сосредоточенных масс собственные функции будут ортогональны с весом $\rho(z) = z^{1-2\nu}$. Для нахождения квадрата нормы собственных функций вначале поступим аналогично, как в работе [14] для собственных функций с различными индексами:

$$\left(\lambda_n^2 - \lambda_m^2 \right) \int_k^1 z^{1-2\nu} \Phi_m \Phi_n dz = \Phi_m \left(z^{1-2\nu} \Phi'_n \right) - \Phi_n \left(z^{1-2\nu} \Phi'_m \right) \Big|_k^1.$$

Перейдя к пределу при $m \rightarrow n$, получаем:

$$2\lambda_n \int_k^1 z^{1-2\nu} \Phi_n^2(z) dz = \frac{\partial \Phi_n}{\partial \lambda_n} \left(z^{1-2\nu} \Phi'_n \right) - \Phi_n \frac{\partial \left(z^{1-2\nu} \Phi'_n \right)}{\partial \lambda_n} \Big|_k^1.$$

Определив частные производные по λ_n , квадрат нормы собственных функций находим в виде:

$$\Delta_n^2 = \frac{1}{2} \left(z^{2-2\nu} \Phi_n^2 + \frac{z^{2\nu}}{\lambda_n^2} \left(z^{1-2\nu} \Phi'_n \right)^2 - \frac{2\nu}{\lambda_n^2} \left(z^{1-2\nu} \Phi'_n \right) \Phi_n \right) \Big|_k^1. \quad (6)$$

Теперь рассмотрим случай вынужденных колебаний, для этого требуется найти решение $\varphi_2(z, t)$ неоднородного уравнения:

$$\left(z^{1-2\nu} \varphi' \right)' - \beta^2 z^{1-2\nu} \ddot{\varphi} = \frac{\beta^2}{\gamma I_{x2}} p(z, t), \quad \beta = \frac{l}{c(1-k)}. \quad (7)$$

Решение уравнения (7) представим в виде ряда по собственным функциям:

$$\varphi_2(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} w_n(t) \Phi_n(z). \quad (8)$$

Подставив этот ряд в уравнение (7) и принимая во внимание соотношение $\lambda_n = \beta \omega_n$, получаем:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left(\ddot{w}_n + \omega_n^2 w_n \right) z^{1-2\nu} \Phi_n = - \frac{p(z, t)}{\gamma I_{x2}}. \quad (9)$$

Применив метод Фурье к уравнению (9), при учете свойства ортогональности собственных функций с весом, получим уравнение относительно коэффициентов w_n :

$$\ddot{w}_n + \omega_n^2 w_n = - \frac{1-k}{\gamma I_{x2} l \Delta_n^2} \int_1^k p(z, t) \Phi_n(z) dz. \quad (10)$$

В качестве примера, рассмотрим схему внезапного приложения момента к верхнему торцу стержня, на котором расположена локальная инерционная нагрузка с моментом инерции I_M , а нижний его конец жестко закреплен (рис. 1). Такая схема может моделировать конструкции опор линий электропередач в аварийной ситуации при обрыве провода.

Для исследования параметров НДС конструкции необходимо решить граничную задачу (2):

$$M(0, t) - I_M \dot{\varphi}(0, t) = 0; \quad \varphi(l, t) = 0, \quad (11)$$

с однородными начальными условиями:

$$\varphi(x, 0) = 0; \quad \dot{\varphi}(x, 0) = 0. \quad (12)$$

Решение уравнения (2) ищем в виде ряда (8). Собственные функции определим, используя метод начальных параметров, тогда с учетом первого граничного условия (11) получим выражения углов поворота (4) и крутящих моментов (5) для произвольной гармоник:

$$\varphi_n(z) = \varphi_0 z^\nu \left(k^{-\nu} A(\lambda_n z) - \xi \lambda_n k^{\nu-1} B(\lambda_n z) \right); \quad (13)$$

$$M_n(z) = \varphi_0 G I_{x2} \frac{\lambda_n(1-k)}{l} z^{1-\nu} \left(k^{-\nu} C(\lambda_n z) - \xi \lambda_n k^{\nu-1} D(\lambda_n z) \right),$$

здесь $\xi = \frac{I_M(1-k)}{\gamma I_{x2} l}$ – относительный момент инерции, $\lambda_n = \frac{\omega_n l}{(1-k)c}$ – собственные значения частотного уравнения.

Из второго граничного условия (11) получаем уравнение для нахождения собственных значений:

$$A(\lambda_n) - \xi \lambda_n k^{2\nu-1} B(\lambda_n) = 0. \quad (14)$$

Оценим влияние параметра k на значения первого собственного числа уравнения (14) $\omega_1 = \tilde{\lambda}_1 c / l$, $\tilde{\lambda}_1 = \lambda_1 (1-k)$, аналогичным образом определяются частоты для стержней постоянного сечения [11]. Численные исследования зависимости $\tilde{\lambda}_1$ от величины параметра k для пирамидальной каркасной конструкции ($\nu = -0,5$), конического полого ($\nu = -1,0$) и сплошного ($\nu = -1,5$) стержней без учета сосредоточенной массы ($\xi = 0$) представлены на рис. 2. Из графика видно, что для случая $k \approx 1$ величина $\tilde{\lambda}_1$ совпадает с известным значением $\tilde{\lambda}_1 = \pi/2 \approx 1,571$ [11], обозначено штрихпунктиром.

На графике рис. 3 представлена зависимость $\tilde{\lambda}_1$ от величины локальной инерционной нагрузки ξ для параметров стержня $\nu = -1$; $k = 0,5$, пунктиром показана зависимость для упрощенной модели конструкции с одной степенью свободы [18]:

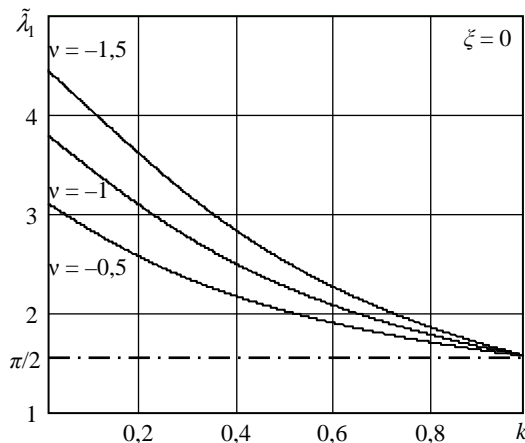


Рис. 2. Зависимость $\tilde{\lambda}_1$ от величины параметра относительного поперечного размера k

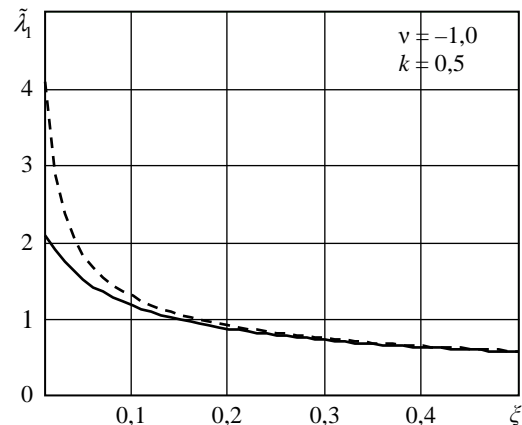


Рис. 3. Зависимость $\tilde{\lambda}_1$ от относительного момента инерции ξ

$$\lambda = \frac{\omega l}{c} = \sqrt{\frac{2\nu(1-k)^2}{\xi(1-k^{2\nu})}}. \quad (15)$$

Анализ результатов расчета собственных чисел для разных параметров (ν , k , ξ) показал, что различие значений величины λ по зависимости (15) и первого корня уравнения (14) – λ_1 наиболее существенно для стержней имеющих относительный поперечный размер $k = 0,4 \div 0,8$, при этом для рассматриваемых объектов различие не превышает 5% при значениях $\xi > 0,5$.

С учетом наличия инерционной нагрузки на верхнем торце стержня (рис. 1), собственные функции будут ортогональны с весом $\rho(z) = z^{1-2\nu} + \xi \delta(z-k)$, где $\delta(z)$ – дельта функция Дирака. Тогда из соотношения (6) квадрат нормы собственных функций будет определяться по формуле:

$$\Delta_n^2 = \frac{1}{2} \left(k^{-\nu} C(\lambda_n) - \xi \lambda_n k^{\nu-1} D(\lambda_n) \right)^2 - \frac{\xi}{2} \left(\xi \lambda_n^2 k^{2\nu} + 2\nu - 2 \right) - \frac{k^{2-2\nu}}{2}.$$

Для случая внезапного приложения момента M в сечении $z = k$ требуется найти общее решение уравнения, которое в соответствии с (10) будет иметь вид:

$$\dot{w}_n + \omega_n^2 w_n = -\frac{M(1-k)}{\gamma I_{x2} l \Delta_n^2} \Phi_n(k). \quad (16)$$

С учетом начальных условий (12) общее решение уравнения (16) будет:

$$w_n(t) = -\frac{Ml}{(1-k)GI_{x2} \Delta_n^2 \lambda_n^2} (1 - \cos \omega_n t).$$

Таким образом, в окончательном виде получим уравнения углов поворота и крутящих моментов:

$$\varphi(z,t) = -\bar{\varphi}_0 \frac{2\nu z^\nu}{1-k^{2\nu}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\Delta_n^2 \lambda_n^2} (k^{-\nu} A(\lambda_n z) - \xi \lambda_n k^{\nu-1} B(\lambda_n z)) (1 - \cos \omega_n t);$$

$$M(z,t) = -Mz^{1-\nu} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\Delta_n^2 \lambda_n} (k^{-\nu} C(\lambda_n z) - \xi \lambda_n k^{\nu-1} D(\lambda_n z)) (1 - \cos \omega_n t),$$

где $\bar{\varphi}_0 = \frac{Ml(1-k^{2\nu})}{2\nu GI_{x2}(1-k)}$ – статический угол закручивания.

Введем обозначения для безразмерного времени $\tau = tc/l$, тогда выражения для динамических коэффициентов угла закручивания верхнего торца стержня K_φ и крутящего момента в заделке K_M получим в виде:

$$K_\varphi(\tau) = -\frac{2\nu k^\nu}{1-k^{2\nu}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\Delta_n^2 \lambda_n^2} (k^{-\nu} A(\lambda_n k) - \xi \lambda_n k^{\nu-1} B(\lambda_n k)) (1 - \cos \tilde{\lambda}_n \tau); \quad (17)$$

$$K_M(\tau) = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\Delta_n^2 \lambda_n} (k^{-\nu} C(\lambda_n) - \xi \lambda_n k^{\nu-1} D(\lambda_n)) (1 - \cos \tilde{\lambda}_n \tau). \quad (18)$$

На рис. 4 представлены графики зависимостей (17) и (18), из которых видим, что характер поведения и максимальные значения динамических коэффициентов при отсутствии инерционного момента ($\xi = 0$) существенно отличаются от известных решений аналогичной задачи для вала однородной структуры [18], для которого максимальные значения коэффициентов равны 2. При значениях параметров конструкции: $\nu = -1$, $k = 0,5$ численно из выражений (17), (18) получим $K_{\varphi \max} = 1,47$, $K_{M \max} = 5,84$.

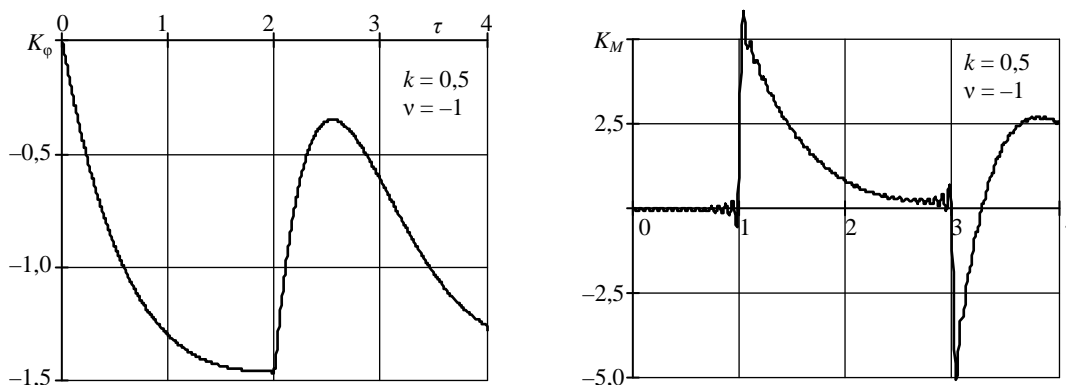


Рис. 4. Зависимость динамических коэффициентов угла закручивания свободного конца стержня и момента в заделке от безразмерного времени при отсутствии инерционного момента ($\xi = 0$)

На рис. 5 представлены графики динамических коэффициентов (17), (18) при наличии локальной инерционной нагрузки для параметров конструкции: $\nu = -1$, $k = 0,5$, $\xi = 0,2$, пунктиром показаны динамические коэффициенты для невесомого упругого стержня с одной степенью свободы, полученные известным способом [17]:

$$\bar{K}_\varphi(\tau) = -(1 - \cos \lambda \tau); \quad \bar{K}_M(\tau) = 1 - \xi \lambda^2 \frac{1 - k^{2\nu}}{2\nu(1-k)^2} \cos \lambda \tau.$$

Из графиков (рис. 5) видим, что упрощенная модель дает достаточную точность расчета при наличии определенной величины локальной инерционной нагрузки. При этом очевидно, что метод приведения масс не отражает реальную картину динамического процесса в случае отсутствия сосредоточенных инерционных нагрузок.

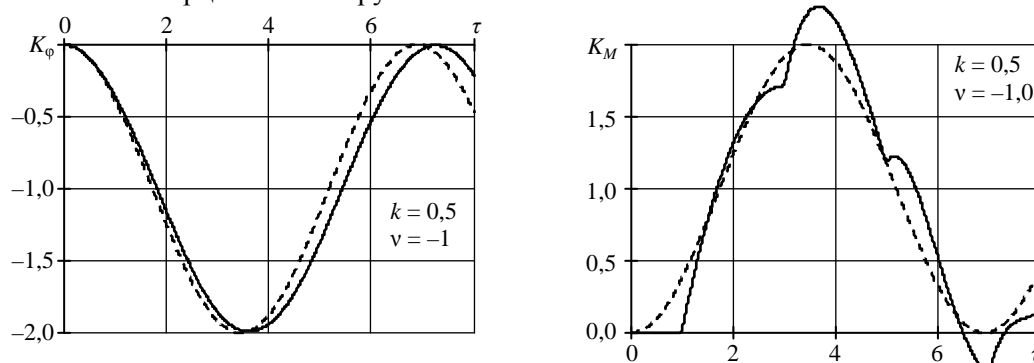


Рис. 5. Зависимость динамических коэффициентов угла закручивания свободного конца стержня и момента в заделке от безразмерного времени при наличии инерционного момента ($\xi = 0,2$)

Выводы

1. Стержневые модели имеют широкое применение в инженерной практике расчета многих объектов машиностроения, металлургии, строительства, горного оборудования, биомеханики и пр. При этом они используются как для непосредственного решения тех или иных прикладных задач, так и в создании теоретических основ для целого ряда методологических разработок. Таким образом, создание методологии расчета на крутильные колебания упругих стержней с осевой неоднородностью геометрических характеристик является актуальной научной проблемой, которая имеет существенное фундаментальное и прикладное значение.

2. Для исследования параметров НДС стержневых систем используются как аналитические, так и численные методы решения задач. Численные методы, наряду с использованием программных комплексов объектного и имитационного моделирования, позволяют рассматривать задачи практически любой сложности, но имеют такие недостатки, как, например, необходимость привязки к конкретным параметрам объекта исследования, что затрудняет их применение на стадии проектных разработок, оценку результатов расчета и т. п. Предложенное аналитическое решение лишено указанных недостатков и помимо этого позволяет получить более полное представление о механизме динамического процесса и степени влияния характеристик модели на его параметры.

3. Теоретическая ценность работы заключается в получении нового аналитического решения задачи крутильных колебаний на основе волнового уравнения, а также в разработке алгоритма применения метода Фурье для динамических расчетов упругих стержней с осевой неоднородностью геометрических свойств.

4. Практическая значимость работы состоит в выводе расчетных зависимостей, которые могут быть непосредственно применены для моделирования НДС при динамических воздействиях нагрузок в таких объектах, как: валы сложной конфигурации, элементы бурильного оборудования, конструкции опор линий электропередач и пр. Полученное аналитическое решение также можно использовать для построения эталонных моделей и верификации расчетных данных при работе с программными комплексами объектного и имитационного моделирования. Предложенный алгоритм расчета может быть положен в основу инженерных методов и практических рекомендаций при разработке технической и регламентирующей документации.

Литература

1. Сухарев, В.А. Крутильные колебания вала со сосредоточенными массами / В.А. Сухарев // Известия сельскохозяйственной науки Тавриды. – 2015. – № 4 (167). – С. 48–53.

2. Параметрически возбуждаемые крутильные колебания в одномодульной конструкции РЛДВПТ с рычажно-кулачковым преобразователем движения / М.А. Донченко, Ю.Н. Журавлёв, А.Н. Иванов, С.Н. Семёнов // Научно-технический вестник Поволжья. – 2012. – № 3. – С. 114–118.

3. Ватульян, А.О. Об одном способе определения упругих характеристик для неоднородных тел / А.О. Ватульян, О.В. Денина // Прикладная механика и техническая физика. – 2012. – Т. 53, № 2(312). – С. 137–147.
4. Хакимов, А.Г. О собственных колебаниях вала с моделью искусственного дефекта / А.Г. Хакимов // Дефектоскопия. – 2010. – № 6. – С. 93–98.
5. Хакимов, А.Г. О собственных крутильных колебаниях бурильной колонны / А.Г. Хакимов, Э.И. Сатыев // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2014. – № 6. – С. 120–153. URL: http://ogbus.ru/issues/6_2014/ogbus_6_2014_p120-153_KhakimovAG_ru_en.pdf
6. Беляев, А.Б. Расчет трансмиссионного вала на крутильные колебания / А.Б. Беляев, В.К. Итбаев // Вестник транспорта Приволжья. – 2009. – № 3. – С. 46–49.
7. Шевченко, Ф.Л. Крутильный удар при свободных колебаниях в буровых установках / Ф.Л. Шевченко, Г.М. Улитин, Ю.В. Петтик // Прогрессивные технологии и системы машиностроения. – 1999. – Вып. 8. – С. 244–247.
8. Шевченко, Ф.Л. О разновидностях крутильных ударов, возникающих при работе буровых установок, и способы их устранения / Ф.Л. Шевченко, Г.М. Улитин // Совершенствование техники и технологии бурения скважин на твердые полезные ископаемые. – Екатеринбург: УГГА, 2001. – Вып. 24. – С. 132–138.
9. Ерофеев, В.И. Математическая модель упругого тонкостенного стержня, совершающего крутильные колебания при наличии нелинейности и депланации / В.И. Ерофеев, Б.Б. Лампси // Приволжский научный журнал. – 2014. – № 2. – С. 14–17.
10. Кравчук, А.С. Крутильные колебания круглых композиционных и реологически активных стержней / А.С. Кравчук, А.И. Кравчук, И.А. Тарасюк // Материалы IV Международной научно-практической конференции «Прикладные проблемы оптики, информатики, радиофизики и физики конденсированного состояния», Минск, 11–12 мая 2017 г. – Минск: Издательство Института прикладных физических проблем имени А.Н. Севченко, 2017. – С. 258–260.
11. Прочность. Устойчивость. Колебания: Справочник: В 3 т. / Под общ. ред. И.А. Биргера и Я.Г. Пановко. – Москва: Машиностроение, 1968. – Т. 3. – 567 с.
12. Беридзе, С.П. Свободные крутильные колебания конического стержня / С.П. Беридзе // Вестник Оренбургского государственного университета. – 1999. – № 3. – С. 104–107.
13. Biswas, S.K. Note on the torsional vibration of a thin beam of varying cross-section / S.K. Biswas // Pure and Applied Geophysics. – 1970. – Vol. 79, Issue. 1. – P. 18–21.
14. Улитин, Г.М. О продольных колебаниях упругих стержней переменного сечения / Г.М. Улитин, С.Н. Царенко // Прикладная механика. – 2015. – Т. 51, № 1. – С. 123–129.
15. Камке, Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям / Э. Камке. – М.: Наука, 1976. – 576 с.
16. Ватсон, Г.И. Теория бесселевых функций: в 2 ч. / Г.И. Ватсон. – М.: Издательство иностранной литературы. – 1949. – Ч. 1. – 798 с.
17. Киселев, В.А. Строительная механика. Специальный курс (динамика и устойчивость сооружений) / В.А. Киселев. – М.: Стройиздат, 1964. – 332 с.
18. Шевченко, Ф.Л. Динамика упругих стержневых систем / Ф.Л. Шевченко. – Донецк: ООО «Лебедь», 1999. – 268 с.

Поступила в редакцию 17 января 2018 г.

**TORSIONAL VIBRATIONS OF A ROD WITH AN AXIAL GEOMETRIC
INHOMOGENEITY****S.N. Tsarenko**State Higher Education Institution Donetsk National Technical University, Donetsk, Ukraine
E-mail: tzarenko@gmail.com

The dynamics torsional vibrations of a rod with an axial torsional rigidity inhomogeneity. Rods of different configurations are widely used for simulating stress-strain state in case of static and dynamic load to the objects of mechanical engineering, construction, biomechanics, etc. This work's objective is creating of a general approach to building mathematical models of torsional vibrations of rods of variable section. As an object we have considered an elastic rod, the torsional rigidity of which changes according to the power law from the longitudinal coordinate. The dynamic process is described by a wave equation, and is solved using the Fourier method. To make the solving of the boundary-value problems more convenient, special functions based on recurrence relations for the Bessel functions are introduced. Taking into account the orthogonal property of weighted eigenfunctions, an expression for the norm square is obtained. As an example a case of vibrations is considered with sudden application of load to one end of the rod, with the other end of the rod being rigidly fixed. The free end is supposed to be under local inertial load. Expressions were obtained for the torsion angles and torques in the cross-sections of the rod. A comparison was performed for the obtained results of calculation in relative values with a simplified single-mass model of the weightless rod.

Keywords: torsional vibrations; forced vibrations; variable rigidity rod; elastic rod; wave equation; Fourier method; Bessel functions; natural frequencies; stress; strain.

References

1. Sukharev V.A. Torsional Vibrations of Shaft with Concentrated Masses. *Transactions of Taurida. Agricultural Science*, 2015, no. 4(167), pp. 48–53. (in Russ.).
2. Donchenko M.A., Zhuravlyov Yu.N., Ivanov A.N., Semyonov S.N. Parametrically-Excited Torsional Vibrations in One-Module Construction of Rbeehs with Lever-And-Cam Motion Converter. *Scientific and Technical Volga region Bulletin*, 2012, no. 3, pp. 114–118. (in Russ.).
3. Vatul'yan A.O., Denina O.V. One method of determining the elastic properties of inhomogeneous solids. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2012, Vol. 53, no. 2, pp. 266–274. DOI:10.1134/S0021894412020150
4. Khakimov A.G. On the natural vibrations of a shaft with an artificial defect. *Russian Journal of Nondestructive Testing*, 2010, Vol. 46, no. 6, pp. 468–473. DOI: 10.1134/S1061830910060100
5. Khakimov A.G., Satyev E.I. On Drill-String Natural Torsional Vibrations. *The electronic scientific journal "Oil and Gas Business"*, 2014, no. 6, pp. 120–153. DOI: 10.17122/ogbus-2014-6-120–153
6. Belyaev A.B., Itbaev V.K. Torsional Vibrations Calculation of the Shaft Line. *Vestnik transporta Povolzhya*, 2009, no. 3, pp. 46–49. (in Russ.).
7. Shevchenko F.L., Ulitin G.M., Pettik Yu.V. Krutil'nyy udar pri svobodnykh kolebaniyakh v burovykh ustanovkakh (Torsional impact with free oscillations in drilling rigs). *Progressivnye tekhnologii i sistemy mashinostroeniya*, 1999, Issue 8, pp. 244–247. (in Russ.).
8. Shevchenko F.L., Ulitin G.M. O raznovidnostyakh krutil'nykh udarov, vznikayushchikh pri rabote burovykh ustanovok, i sposoby ikh ustraneniya (On the types of torsional impacts that occur during the operation of drilling rigs, and how to eliminate them). *Sovershenstvovanie tekhniki i tekhnologii bureniya skvazhin na tverdye poleznye iskopaemye*, Ekaterinburg, UGGA, 2001, Issue 24, pp. 132–138. (in Russ.).

9. Erofeev V.I., Lamps B.B. Mathematical model of elastic thin-walled bar committing torsional oscillations in the presence of nonlinearity and warping. *Privolzhsky Scientific Journal*, 2014, no. 2, pp. 14–17. (in Russ.).

10. Kravchuk A.S., Kravchuk A.I., Tarasyuk I.A. Krutil'nye kolebaniya kruglykh kompozitsionnykh i reologicheski aktivnykh sterzhney (Torsional vibrations of round composite and rheologically active rods). *Materialy IV Mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii "Prikladnye problemy optiki, informatiki, radiofiziki i fiziki kondensirovannogo sostoyaniya"*, Minsk, 11–12 maya 2017 g (Proceedings of the IV International Scientific and Practical Conference "Applied Problems of Optics, Informatics, Radiophysics, and Condensed Matter Physics", Minsk, May 11–12, 2017), Minsk, Izdatel'stvo Instituta prikladnykh fizicheskikh problem imeni A.N. Sevchenko Publ., 2017, pp. 258–260. (in Russ.).

11. Birger I.A. (ed.), Panovko Ya.G. (ed.) *Prochnost', ustoychivost', kolebaniya*. Spravochnik v trekh tomakh (Strength. Sustainability. Oscillations. Reference in 3 volumes). Moscow, Mashinostroenie Publ., 1968, Vol. 3, 567 p. (in Russ.).

12. Beridze S.P. Svobodnye krutil'nye kolebaniya konicheskogo sterzhnya (Free torsional vibrations of the tapered rod). *Vestnik Orenburgskogo gosudarstvennogo universiteta*, 1999, no. 3, pp. 104–107. (in Russ.).

13. Biswas S.K. Note on the torsional vibration of a thin beam of varying cross-section. *Pure and Applied Geophysics*, 1970, Vol. 79, Issue 1, pp. 18–21. DOI: 10.1007/BF00875473

14. Ulitin G.M., Tsarenko S.N. Longitudinal Vibrations of Elastic Rods of Variable Cross-Section. *International Applied Mechanics*, 2015, Vol. 51, Issue 1, pp. 102–107. DOI: 10.1007/s10778-015-0676-8

15. Kamke, E. *Differentialgleichungen: Lösungsmethoden und Lösungen.*, New York, Chelsea Pub. Co., 1959.

16. Watson G.N. *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*. Cambridge, Cambridge University Press, 1944, 804 p.

17. Kiselev V.A. *Stroitel'naya mekhanika. Spetsial'nyy kurs (dinamika i ustoychivost' sooruzheniy)* (Structural mechanics. Special course (dynamics and stability of facilities)), Moscow, Stroyizdat Publ., 1964, 332 p. (in Russ.).

18. Shevchenko F.L. *Dinamika uprugikh sterzhnevnykh sistem* (Dynamics of elastic rod systems). Donetsk, OOO "Lebed'" Publ., 1999, 268 p. (in Russ.).

Received January 17, 2018

FIRST-PRINCIPLES INVESTIGATIONS OF REFERENCE STATES OF Co₂CrIn HEUSLER ALLOYS

M.A. Zagrebin^{1,2,3}, V.V. Sokolovskiy^{1,3}, V.D. Buchelnikov^{1,3}

¹ Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation

² South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

³ National University of Science and Technology "MISiS", Moscow, Russian Federation

E-mail: miczag@mail.ru

In order to identify the reasons for the differences between the available theoretical and experimental values of the total magnetic moment of Co₂CrIn Heusler alloy, in this work we studied the effects of various magnetic reference states on the magnetic and electronic properties of the alloys by means of *ab initio* and Monte Carlo methods. It is shown that the calculated ground state in the L₂₁ phase is ferromagnetic. However, the values for both lattice parameter and magnetic moment calculated for the ferrimagnetic state, where the Cr atoms are ordered antiferromagnetically, are found to be in good agreement with the available experimental data. It is shown that the half-metallic behavior is realized only in the case of the ferromagnetic order. By using the calculated exchange coupling parameters in the Heisenberg Hamiltonian, the temperature dependences of magnetization were simulated.

Keywords: Heusler alloys; reference states; density of states; exchange parameters.

Introduction

Ferromagnetic half-metals (FHM) are potential candidates for applications in spintronic devices because of their high spin polarization of the electron density of states (DOS) at the Fermi level. This means that there is an energy gap in DOS spin configurations. As a result, 100 % of spin-polarized current can be achieved in these materials [1]. Co-based Heusler alloys are promising materials in FHM class, due to their high spin polarization, large energy gaps, high total magnetic moments (μ_{tot}) and Curie temperatures (T_C) [2]. Nowadays, the most studied half-metallic Co-based Heusler alloys are Co₂YZ ($Y = Cr, Fe, Mn$, and $Z = Al, Si, Ga, Ge$) (for example, see Refs. [2–4] and references therein).

At present, Co₂CrIn alloy is not thoroughly investigated. However, it has attracted huge interest from both experimentalists and theoreticians due to its complex FHM, ferrimagnetic (FIM), and antiferromagnetic (AFM) behaviours. Wurmehl *et al.* [5] reported that Co₂CrIn has the cubic L₂₁ structure, which can be represented as four interpenetrated *fcc* sublattices. Besides, the magnetization measurements have shown that Co₂CrIn compound has FIM order with the magnetic moment of 1,18 μ_B at 5 K. In contrast, the calculated value of magnetic moment was found to be 3,16 μ_B [6]. To find the reasons leading to magnetic moment reduction in Co₂CrIn alloys, we investigated the magnetic ground states in the framework of density functional theory (DFT) and supercell approach. In particular, we studied equilibrium structural, magnetic, and electronic properties of Co₂CrIn compound with different magnetic configurations. To extend obtained magnetic properties from 0 K to finite temperature, we employed classical Monte Carlo (MC) simulations of the Heisenberg model with exchange coupling constants, which were taken from *ab initio* calculations.

This article is organized as follows. Section 2 presents the details of *ab initio* and MC calculations. Section 3 contains the main results. Key results and conclusions are provided at the end of the article (Section 4).

1. Calculation details

We performed spin-polarized *ab initio* calculations, using density functional formalism, implemented in the Vienna *ab initio* simulation package (VASP) [7, 8] and the spin-polarized relativistic Korringa–Kohn–Rostoker code (SPR-KKR) [9]. We investigated ground state structural properties, using the pro-

jector augmented wave (PAW) method and supercell approach, realized in VASP. We used the generalized gradient approximation (GGA) in Perdew, Burke and Ernzerhof (PBE) parameterization to describe the exchange-correlation energy [10]. The computational parameters used for modelling in VASP are following. Pseudopotentials were taken for the next electronic configurations: Co($3d^8 4s^1$), Cr($3p^6 3d^5 4s^1$), and In($4d^{10} 5p^1 5s^2$). Kinetic energy cut-off was 400 eV and kinetic energy cut-off for the augmentation charges was 800 eV. The Brillouin zone integration was performed by the Monkhorst-Pack scheme [11] with $8 \times 8 \times 8$ k-point sampling for the structure optimization. All performed calculations were semi-relativistic and spin-polarized. Structures were relaxed, using the conjugate gradient algorithm, and both atomic positions and the supercell volume were optimized. To calculate the tetragonal distortions of the cubic structure, we fixed the volume of the supercell as $V_0 = a_0^3 = a^2 c$.

Cubic L2₁ structure was used for ground state calculations. We considered 16-atoms supercell, which consisted of 8 Co, 4 Cr, and 4 In atoms. To find the optimized magnetic order of the austenite structure, we considered three different magnetic states, referred to as FM state (magnetic moments of Co and Cr atoms are parallel), FIM state (two out of four magnetic moments of Cr atoms are reversed), and the AFM state (all magnetic moments of Cr atoms are reversed). We assumed that the magnetic moments of In atoms are negligible. Fig. 1 schematically shows the discussed spin configurations.

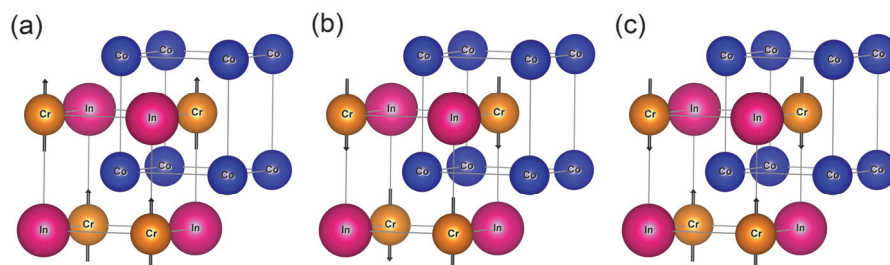


Fig. 1. Co₂CrIn 16-atom supercells with (a) FM, (b) AFM, (c) FIM spin configurations

After we defined the equilibrium lattice parameters, we calculated the exchange coupling constants (J_{ij}), total and partial DOS, and magnetic moments, using SPR-KKR package. For self-consistent cycles (SCF) calculations, 2300 k -points were generated by a k -mesh grid of $45 \times 45 \times 45$. The angular momentum expansion (l_{\max}) was restricted to three. In all calculations total energy converged 0,01 mRy. To achieve the better convergence, we used BROYDEN2 scheme [12, 13] with PBE exchange-correlation potential. We calculated the Heisenberg's projective magnetic exchange coupling constants and DOS curves, using the spin-polarized scalar-relativistic (SP-SREL) Dirac–Hamiltonian with $l_{\max} = 3$ on a k -mesh grid of $57 \times 57 \times 57$ with 4495 k points.

Using obtained long-range exchange coupling constants we simulated the temperature dependencies of magnetization in the framework of classical three-dimensional Heisenberg model and MC routine. For the Hamiltonian we used the following equation:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (1)$$

where \mathbf{S}_i is the spin of unit length ($|\mathbf{S}_i| = 1$), placed on a lattice site, and J_{ij} are the exchange coupling parameters from *ab initio* calculations for austenite phase. We carried out MC simulations for a cell with 3925 atoms and periodic boundary conditions, using the Metropolis algorithm [14]. Thus, for a stoichiometric Co₂CrIn alloy, the model lattice contained 1098 Cr, 1099 In, and 1728 Co atoms. Changes of the independent spin variables $\mathbf{S}_i = \{S_i^x, S_i^y, S_i^z\}$ were accepted or rejected according to the single-site transition probability $W = \min\{1; \exp(-\Delta H / k_B T)\}$. We used one MC step, consisting of N attempts to change the spin variables, as the time unit. For each temperature $5 \cdot 10^5$ MC steps and 10^4 thermalization steps were considered. To calculate the total average magnetization M at a specific temperature point, we used the next equation:

$$M = 2\mu_{\text{Co}} m_{\text{Co}} + \mu_{\text{Cr}} m_{\text{Cr}}, \quad (2)$$

where μ_{Co} , and μ_{Cr} are the magnetic moments of Co and Cr atoms, respectively.

2. Calculation results

Firstly, we determined the magnetic ground state of Co₂CrIn Heusler alloy by calculating the total energies per formula unit as functions of the lattice parameter (see Fig. 2, a). Fig. 2, a shows that austenite structure with FM spin configuration is more energetically stable than FIM and AFM configurations. The energy minimum for FM austenite corresponds to equilibrium lattice parameter $a = 5,976 \text{ \AA}$, the total magnetic moment is equal to $3,04 \mu_B/\text{f.u.}$ For FIM austenite both total magnetic moment $1,29 \mu_B/\text{f.u.}$ and equilibrium lattice parameter $a = 6,003 \text{ \AA}$ are close to the experimental data, $1,18 \mu_B/\text{f.u.}$ and $6,059 \text{ \AA}$ [5].

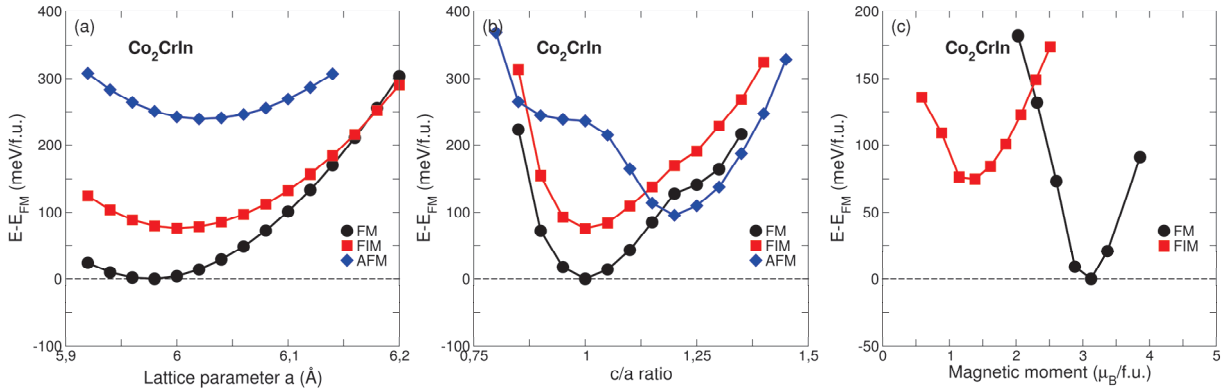


Fig. 2. Dependence of total energy per formula unit on (a) lattice parameter, (b) tetragonality degree c/a and (c) fixed total magnetic moment of Co₂CrIn alloy with FM, AFM, and FIM configurations. The energy difference was calculated with respect to the stable configuration (FM)

To find a probability of martensitic transformation in this alloy, we calculated the dependency of the total energy, relative to the cubic phase, on tetragonality c/a (see Fig. 2, b). Fig. 2, b clearly demonstrates the absence of martensitic transformation in the stoichiometric Co₂CrIn alloy. Therefore, we further present results only for the austenitic cubic state.

We also calculated the total energy of Co₂CrIn as a function of a fixed magnetic moment for FM and FIM configurations (see Fig. 2, c). Fig. 2, c illustrates that FM configuration with the magnetic moment of $\approx 3 \mu_B/\text{f.u.}$ is more stable than FIM configuration ($1,3 \mu_B/\text{f.u.}$), which is close to experimental results [5].

The predicted lattice constants and magnetic moments for different magnetic states of Co₂CrIn alloy, as well as available experimental data, are summarized in Table 1.

Table 1
Optimized lattice constant a_0 (in Å), and total magnetic moment μ (in $\mu_B/\text{f.u.}$), for Co₂CrIn alloy in comparison with experimental (a_0^{exp} , μ^{exp}) and other theoretical (a_0^{calc} , μ^{calc}) data

a_0	a_0^{exp}	a_0^{calc}	μ	μ^{exp}	μ^{calc}
5,976 (FM)	6,0596 [5]	6,00 [6]	3,04 (FM)	1,18 [5]	3,16 [6]
6,024 (AFM)			0,50 (AFM)		
6,003 (FIM)			1,29 (FIM)		

DOS calculations were performed for the cell with the optimized lattice constant, consisting of four atoms, by using SPR-KKR-CPA approach. Fig. 3 depicts total and partial DOS curves, calculated for Co₂CrIn alloy with different magnetic reference states.

The most contributions to the majority and minority bands are caused by Co and Cr $3d$ states. In the case of FM configuration, the spin up band shows the metallic behaviour, while the spin down band demonstrates the semiconducting behaviour due to the appearance of an energy gap around the Fermi level. The resulting spin polarization is 76%. As we mentioned above, the presence of both occupied majority spin-channel and unoccupied minority spin-channel at E_F is the feature of the half-metallic behaviour. On the one hand, from element resolved DOS curves for FM configuration we can observe that the gap is larger for $3d$ states of Cr than of Co. On the other hand, the metallic behaviour (see the spin up band at E_F , Fig 3, a) is attributed to the hybridization between Cr and Co $3d$ states. In the cases of FIM and AFM configurations, the half-metallic behaviour changed to the metallic behaviour (energy gap around the Fermi level for the spin down band disappeared).

Since Co-based Heusler alloys are strongly correlated systems where the electron-electron correla-

tion can play a critical role, we studied the influence of Coulomb interaction on DOS curves, using GGA+*U* approach. We set the values of *U* and *J* for both Co and Cr atoms to 3 and 0,8 eV, respectively. Fig. 4 shows total DOS curves of Co₂CrIn alloy near the Fermi level, calculated in GGA and GGA+*U* approximations.

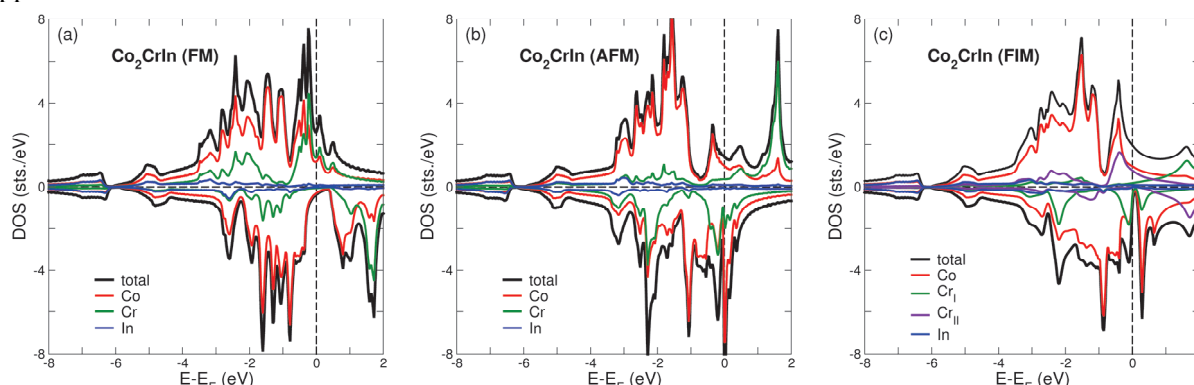


Fig. 3. Total and partial DOS of Co₂CrIn alloy for spin up and spin down bands: (a) FM, (b) AFM, and (c) FIM spin configurations

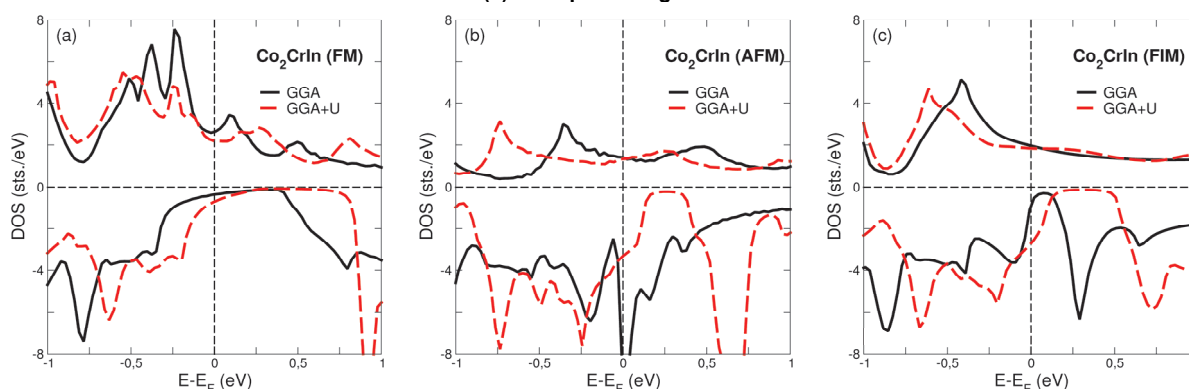


Fig. 4. Total DOS curves for spin up and spin down bands of Co₂CrIn alloy near the Fermi level in (a) FM, (b) AFM, and (c) FIM spin configurations. Solid (dashed) lines denote results for GGA (GGA+*U*) approach

To estimate the spin polarization (*P*) from DOS curves, we used the next equation:

$$P = \frac{N \uparrow (E_F) - N \downarrow (E_F)}{N \uparrow (E_F) + N \downarrow (E_F)} \times 100\%. \quad (3)$$

The calculated spin polarizations *P* for different spin configuration of Co₂CrIn alloy are listed in Table 2.

Table 2
Spin polarization (*P*) of Co₂CrIn alloy with FM, FIM, and AFM spin configurations, calculated in GGA and GGA+*U* approximations

Magnetic state	FM	AFM	FIM
GGA	76,3	–	36,6
GGA+ <i>U</i>	51,4	41,7	18,8

Fig. 4 shows that the addition of *U* term in DFT calculations practically did not change the majority bands around the Fermi level, while in the case of minority channel we can observe that Coulomb interaction results in the gap broadening. At the same time, the spin polarization generally decreased.

Further, we present the results of KKR-CPA calculations of exchange coupling parameters for Co₂CrIn alloy with different magnetic configurations. Fig. 5 presents the dependence of magnetic exchange parameters for cubic Co₂CrIn structure on the distance between atoms.

Fig. 5, *a* shows that in FM case Co-Cr pair demonstrates the largest exchange interaction between nearest neighbour atoms, while the interactions between Co-Co are slightly lower, and Cr-Cr atom pair interacts antiferromagnetically with a weak contribution to the total exchange energy. Overall, large FM Co-Cr and Co-Co interactions are responsible for the FM order and high Curie temperatures of austenite. In the case of FIM and AFM spin configurations, the trends of exchange integrals (see Fig. 5, *b, c*) are quite different, because in both cases nearest Co-Cr pairs have strong AFM interactions. As a result,

FIM and AFM Co_2CrIn alloys demonstrate the competition between FM and AFM interactions, which vanishes with the increase of d/a distance.

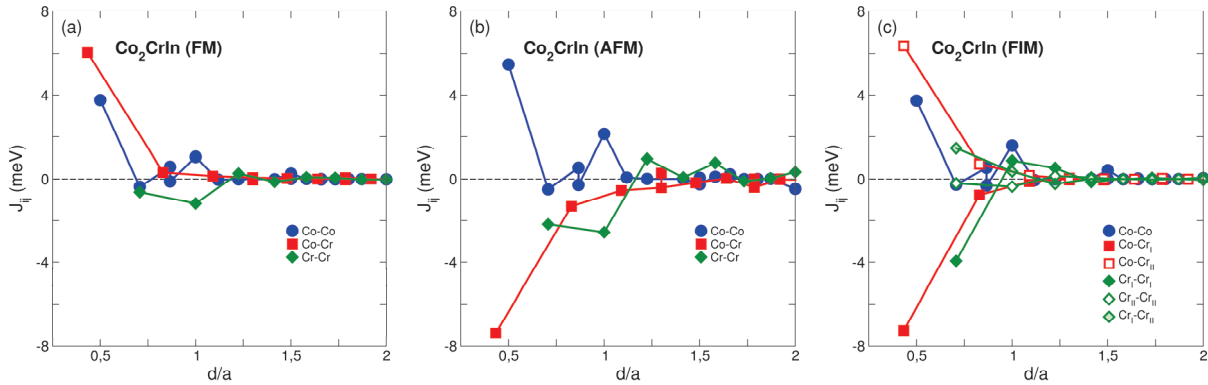


Fig. 5. Dependence of exchange coupling parameters of Co_2CrIn cubic structure with (a) FM, (b) AFM, and (c) FIM spin configuration on the distance (d/a) between atoms i and j . We used the optimized lattice parameter for calculations

To obtain the temperature dependencies of magnetization and specific heat curves for Co_2CrIn alloy, we carried out MC simulations of classical three-dimensional Heisenberg model in the absence of anisotropy and magnetic fields [14]. In view of the fact that in all cases the similar ferromagnetic-paramagnetic phase transition behavior was observed we skip a discussion of this thermomagnetization curves in more detail here. Table 3 presents the results of MC calculations. For AFM spin configuration, the calculated temperature should be interpreted as Neel temperature. For comparison we also put temperatures, which obtained with the help of Mean-field approximation (MFA) for multicomponent system during SPR-KKR calculations according to P.W. Anderson [15]. It should be noted that the Curie temperature obtained within the MFA are higher than the Curie temperature obtained from the MC simulation, as shown in [16].

Table 3

Calculated temperature of magnetic phase transition T_c (in K) for Co_2CrIn alloy with different magnetic configurations

Magnetic state	FM	AFM*	FIM
T_c (MC)	335	600	174
T_c (MFA)	453	934	435

*In the case of AFM reference state, the calculated temperature should be treated as Neel temperature (T_N).

Conclusion

In conclusion, the structural and magnetic properties of Co_2CrIn Heusler compound have been studied by using the first-principles methods and Monte Carlo simulations. The first-principles calculations were carried out with the help of VASP and SPR-KKR simulations packages. Crystal structure optimization and fixed magnetic moment calculations have shown that the optimized ground state of Heusler Co_2CrIn alloy with L_{21} structure is ferromagnetic. However, in the case of the ferrimagnetic state, where Cr atoms are ordered pairwise antiferromagnetically, calculated properties are close to experimental data. Energy calculations of tetragonal-type distortion of the cubic L_{21} structure for Co_2CrIn have been demonstrated that the martensitic phase cannot be realized in the stoichiometric alloy. Co_2CrIn alloy exhibits the pseudo-half-metallic behaviour only in the austenitic phase with the ferromagnetic order. Addition of Coulomb interaction decreases spin polarization. By using the calculated exchange coupling parameters in the Heisenberg Hamiltonian, we simulated the temperature dependences of magnetization. In general, we would like to emphasize that to the complete understanding of whole complex picture of the discussed problem, additional calculations for larger supercells and more different configurations of antisite disorder are needed.

Acknowledgments

This work was supported by Russian Science Foundation grant No. 17-72-20022 (Section 3) and Act 211 Government of the Russian Federation (contract No.02.A03.21.0011); VS acknowledges Ministry of Education and Science of the Russian Federation in the framework of increase Competitiveness Program of NUST "MISIS", implemented by a governmental decree dated 16th of March 2013, No 211.

References

1. Comtesse D., Geisler B., Entel P., Kratzer P., Szunyogh L. First-principles study of spin-dependent thermoelectric properties of half-metallic Heusler thin films between platinum leads. *Phys. Rev. B*, 2014, Vol. 89, Issue 9, p. 094410. DOI: 10.1103/PhysRevB.89.094410
2. Felser C. (ed.), Fecher G.H. (ed.) *Spintronics: from Materials to Devices*. New York, Springer, 2013, 369 p. DOI: 10.1007/978-90-481-3832-6
3. Zagrebin M.A., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. Electronic and magnetic properties of the Co₂-based Heusler compounds under pressure: first-principles and Monte Carlo studies. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2016, Vol. 49, no. 35, p. 355004. DOI: 10.1088/0022-3727/49/35/355004
4. Zagrebin M.A., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D., Pavlukhina O.O. Effect of structural disorder on the ground state properties of Co₂CrAl Heusler alloy. *Physica B*, 2017, Vol. 519, pp. 82–89. DOI: 10.1016/j.physb.2017.05.039
5. Wurmehl S., Fecher G.H., Felser C. Co₂CrIn: A Further Magnetic Heusler Compound. *J. of Chemical Sciences*, 2006, Vol. 61, Issue 6, pp. 749–752. DOI: 10.1515/znb-2006-0615
6. Aly S.H., Shabara R.M. First principles calculation of elastic and magnetic properties of Cr-based full-Heusler alloys. *J. of Magnetism and Magnetic Materials*, 2014, Vol. 360, pp. 143–147. DOI: 10.1016/j.jmmm.2014.02.030
7. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method *Phys. Rev. B*, 1999, Vol. 59, Issue 3, p. 1758. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.1758
8. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 1996, Vol. 54, Issue 16, pp. 11169–11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
9. Ebert H., Koedderitzsch D., Minar J. Calculating condensed matter properties using the KKR-Green's function method – recent developments and applications. *Reports on Progress in Physics*, 2011, Vol. 74, no. 9, p. 096501. DOI: 10.1088/0034-4885/74/9/096501
10. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, Vol. 77, Issue 18, pp. 3865–3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865
11. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, 1976, Vol. 13, Issue 12, pp. 5188–5192. DOI: 10.1103/PhysRevB.13.5188
12. Broyden C.G. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations. *Math. Comp.*, 1965, Vol. 19, pp. 577–593. DOI: 10.1090/S0025-5718-1965-0198670-6
13. Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P. *Numerical Recipes in Fortran*. Cambridge, Cambridge University Press, 1992, 963 p.
14. Landau D.P., Binder K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge, Cambridge University Press, 2009, 488 p. DOI: 10.1017/CBO9780511994944
15. Anderson P.W. Theory of Magnetic Exchange Interactions: Exchange in Insulators and Semiconductors. *Solid State Physics*, 1963, Vol. 14, pp. 99–214. DOI: 10.1016/S0081-1947(08)60260-X
16. Zagrebin M.A., Derevyanko S.A., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. Complex investigations of phase diagram of Ni-Pt-Mn-Ga Heusler alloys. *Letters on Materials*, 2018, Vol. 8, no. 1, pp. 21–26. DOI: 10.22226/2410-3535-2018-1-21-26

Received January 9, 2019

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Co_2CrIn

М.А. Загребин^{1,2,3}, В.В. Соколовский^{1,3}, В.Д. Бучельников^{1,3}

¹Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

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

³Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, Российская Федерация

E-mail: miczag@mail.ru

Для выяснения причины различий между имеющимися теоретическими и экспериментальными значениями полного магнитного момента сплава Гейслера Co_2CrIn в данной работе было изучено влияние различных основных магнитных состояний на магнитные и электронные свойства сплавов с помощью *ab initio* и Монте-Карло методов. Показано, что вычисленное основное состояние в фазе L_{21} является ферромагнитным. Однако равновесные значения как параметра решетки, так и магнитного момента, рассчитанные для ферромагнитного состояния, где атомы Cr упорядочены антиферромагнитно, находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными. Показано, что полуметаллическое поведение реализуется только в случае ферромагнитного упорядочения. Используя рассчитанные параметры обменного взаимодействия в гамильтониане Гейзенберга, были смоделированы температурные зависимости намагниченности.

Ключевые слова: сплавы Гейслера; основные состояния; плотности состояний; обменные параметры.

Литература

1. First-principles study of spin-dependent thermoelectric properties of half-metallic Heusler thin films between platinum leads / D. Comtesse, B. Geisler, P. Entel, P. Kratzer, L. Szunyogh // Phys. Rev. B. – 2014. – Vol. 89, Issue 9. – P. 094410.
2. Spintronics: from Materials to Devices / под ред. C. Felser, G.H. Fecher. – New York, USA: Springer, 2013. – 369 p.
3. Zagrebin, M.A. Electronic and magnetic properties of the Co_2 -based Heusler compounds under pressure: first-principles and Monte Carlo studies / M.A. Zagrebin, V.V. Sokolovskiy, V.D. Buchelnikov // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2016. – Vol. 49, no. 35. – P. 355004.
4. Effect of structural disorder on the ground state properties of Co_2CrAl Heusler alloy / M.A. Zagrebin, V.V. Sokolovskiy, V.D. Buchelnikov, O.O. Pavlukhina // Physica B. – 2017. – Vol. 519. – P. 82–89.
5. Wurmehl, S. Co_2CrIn : A Further Magnetic Heusler Compound / S. Wurmehl, G.H. Fecher, C. Felser // J. of Chemical Sciences. – 2006. – Vol. 61, Issue 6. – P. 749–752.
6. Aly, S.H. First principles calculation of elastic and magnetic properties of Cr-based full-Heusler alloys / S.H. Aly, R.M. Shabara // J. of Magnetism and Magnetic Materials. – 2014. – Vol. 360. – P. 143–147.
7. Kresse, G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method / G. Kresse, D. Joubert // Phys. Rev. B. – 1999. – Vol. 59, Issue 3. – P. 1758.
8. Kresse, G. Efficient iterative schemes for *ab-initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 54, Issue 16. – P. 11169–11186.
9. Ebert, H. Calculating condensed matter properties using the KKR-Green's function method – recent developments and applications / H. Ebert, D. Koedderitzsch, J. Minar // Reports on Progress in Physics. – 2011. – Vol. 74, no. 9. – P. 096501.
10. Perdew, J.P. Generalized gradient approximation made simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Phys. Review Lett. – 1996. – Vol. 77, Issue 18. – P. 3865–3868.

11. Monkhorst, H.J. Special points for Brillouin-zone integrations / H.J. Monkhorst, J.D. Pack // Phys. Rev. B. – 1976. – Vol. 13, Issue 12. – P. 5188–5192.
12. Broyden, C.G. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations / C.G. Broyden // Math. Comp. – 1965. – Vol. 19. – P. 577–593.
13. Numerical Recipes in Fortran / W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery. – Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press, 1992. – 963 p.
14. Landau, D.P. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics / D.P. Landau, K. Binder. – Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press, 2009. – 488 p.
15. Anderson, P.W. Theory of Magnetic Exchange Interactions: Exchange in Insulators and Semiconductors / P.W. Anderson // Solid State Physics. – 1963. – Vol. 14. – P. 99–214.
16. Complex investigations of phase diagram of Ni-Pt-Mn-Ga Heusler alloys / M.A. Zagrebin, S.A. Derevyanko, V.V. Sokolovskiy, V.D. Buchelnikov // Letters on Materials. – 2018. – Vol. 8, no. 1. – P. 21–26.

Поступила в редакцию 9 января 2019 г.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ УГЛЕРОДА ПРИ ОТПУСКЕ МАРТЕНСИТА Fe–C

П.В. Чирков¹, А.А. Мирзоев², Д.А. Мирзаев²

¹ Российский Федеральный Ядерный Центр – «Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск, Российская Федерация

² Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация
E-mail: p.chirkow@gmail.com

Дальнейшее улучшение свойств сталей невозможно без понимания процессов, происходящих на различных стадиях термообработки, на атомистическом уровне. В данной работе методом молекулярной динамики с использованием межчастичных потенциалов на основе модели погруженного атома (ЕАМ) проводилось моделирование мартенсита системы железо-углерод. Наблюдаемая диффузия углерода по октаэдрическим междоузлиям при повышенных температурах (несколько сотен °С) приводит к формированию атомами С ближнего упорядочения в виде периодических плоских скоплений, разделенных между собой областями решетки, практически свободными от углерода. Определено, что области кластеризации имеют ориентацию относительно решетки железа (102), что согласуется с результатами экспериментов, где исследовались структуры, получаемые при отпуске мартенсита на стадии двухфазного распада. Результаты атомистического моделирования показывают, что при кластеризации углерода происходит увеличение отношения параметров решетки c/a как в областях кристаллической решетки, в которых происходит формирование скоплений, так и в зонах, не содержащих атомы С. Толщина кластеров оказалась равной 17 Å, а областей, не занятых углеродом – 30 Å. Уменьшение энергии системы с течением наблюдаемого процесса можно рассматривать как движущую силу реакции с величиной 453,61 Дж/моль, что находится в качественном согласии с другими работами.

Ключевые слова: мартенсит; отпуск стали; двухфазный распад; молекулярная динамика.

Введение

Конструкционные стали, основой которых является твердый раствор углерода в железе, остаются основными материалами современной индустрии [1]. В этой связи постоянной является научно-инженерная задача по созданию новых материалов на основе железа, обладающих улучшенными свойствами. Однако разработка новых технологий и существенное улучшение свойств материалов требует понимания природы физических процессов происходящих на атомном уровне в системе железо–углерод при термической обработке. Особый интерес привлекает к себе мартенситный переход, лежащий в основе закалки стали и возникающий при резком охлаждении аустенита.

Экспериментальные исследования, впервые выполненные Г.В. Курдюмовым и др. [2], показали, что мартенситный переход связан с коллективной сдвиговой перестройкой кристаллической решетки. В результате мартенситного превращения образуется тетрагональная структура, представляющая собой немного растянутую вдоль одной оси [001] и сжатую по осям [100] и [010] ОЦК-решетку железа. Для объяснения природы тетрагонального искажения решетки мартенсита К. Зинером [3] была создана теория коллективного деформационного взаимодействия между атомами углерода, развитая затем А.Г. Хачатуряном [4, 5]. В основе данной теории лежит идея о выборочном заполнении атомами углерода одной из трех подрешеток октаэдрических междоузлий кристалла мартенсита.

К сожалению, классическая теория Зинера–Хачатуряна не позволяет анализировать установление ближнего порядка атомов углерода внутри x -, y -, z -подрешеток. Однако в эксперименталь-

ных исследованиях при выдержке мартенсита высокоуглеродистых сталей при температурах 20–200 °С, т.е. на стадии двухфазного распада при отпуске мартенсита, было обнаружено явление кластеризации атомов углерода в виде пластинчатых скоплений атомов углерода в z -подрешетке. Указанные скопления перемежаются аналогичными по форме участками, где атомы углерода практически отсутствуют. Согласно данным работ [6, 7] плоскости скоплений имеют индексы (103), в то же время в работах [8, 9] указывается, что плоскости имеют направление (102) и толщину около 1 нм [10].

Изучение процесса кластеризации при отпуске мартенсита при помощи экспериментальных методов весьма затруднительно и способно предоставить чрезвычайно ограниченный набор данных. В связи с этим особенно актуальным представляется изучение этого процесса на атомистическом уровне методом молекулярной динамики.

Методика молекулярно-динамического моделирования

В настоящей работе для изучения перераспределения углерода между подрешетками мартенсита был использован метод классической молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS [11]. Для описания взаимодействий между атомами в системе Fe–C воспользовались набором межчастичных потенциалов погруженного атома для Fe–Fe, Fe–C и C–C, предложенным в работе [12], который, как мы показали ранее [13], позволяет достаточно точно описать поведение примесных атомов внедрения C в ОЦК железа.

Расчеты проводились в NPT -ансамбле Нозье–Гувера [14, 15]. При этом осуществлялся независимый контроль прикладываемого напряжения вдоль каждой из осей. Это позволило изучить изменение длины ячейки и диффузию атомов углерода по октаэдрическим междуузлиям различного типа. Форма ячейки была жестко задана в ортогональном виде, запрещая таким образом возникновение сдвиговых деформаций. При моделировании на суперячейку накладывались периодические граничные условия, поскольку углерод относится к числу легких элементов, использовался небольшой временной шаг моделирования в 1 фс.

Было проведено два типа расчетов: первый проводился при постоянной температуре со временем моделирования 150 нс, а второй представлял собой последовательный нагрев от 300 до 1300 К, а затем охлаждение до первоначальной температуры. Рассмотрено две скорости нагрева и охлаждения – 10 и 100 К/нс. На всех временах проводился анализ структуры, а также анализ геометрии моделируемой суперячейки.

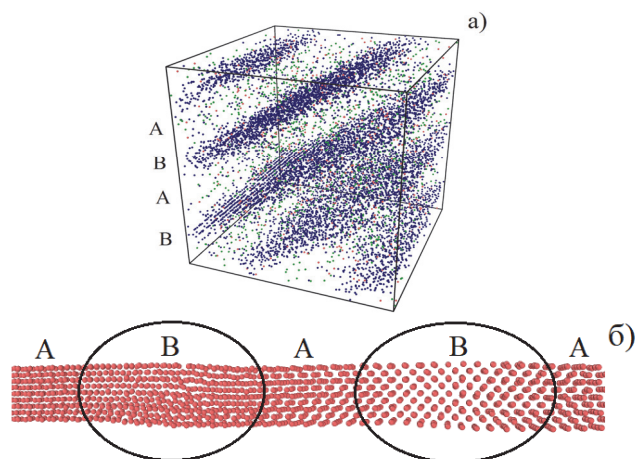


Рис. 1. Результаты атомистического моделирования кластеризации углерода в решетке Fe–C, возникающей при выдержке при повышенных температурах.

а) общий вид. Результаты атомистического моделирования кластеризации углерода в решетке Fe–C, возникающей при выдержке при повышенных температурах. Показаны положения только атомов углерода, решетка Fe для наглядности не показана; б) Конфигурация атомов железа в кристаллической решетке: А – регионы с пониженным содержанием углерода, В – области кластеризации углерода

Анализ и обсуждение результатов

При моделировании суперячейки достаточно большого размера, $> 100 \text{ \AA}$, ≈ 250 тыс. атомов, $45 \times 45 \times 45$ трансляций элементарной ячейки, при постоянной температуре было обнаружено, что после выдержки при значительных температурах (750–1000 К) атомы углерода образуют упорядоченные скопления в виде плоских областей с направлением (102) относительно решетки железа. Наблюдаемая картина представлена на рис. 1, а, где для наглядности показаны только расположение атомов углерода, а решетка железа не показана. Для более низких температур моделирование кластеризации становится затруднительным, поскольку резко уменьшается скорость диффузии. Как следует из рис. 1, а, в процессе кластерообразования возникают области, в которых углерода мало (области А), разделенные между собой пластинообразными участками, где его содержание значительно повышено (В).

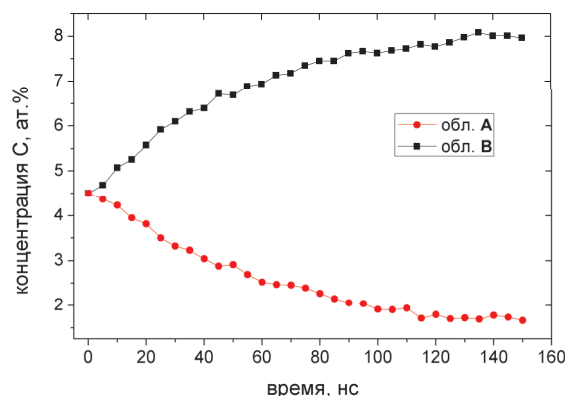


Рис. 2. Изменение концентрации углерода с течением времени в различных областях

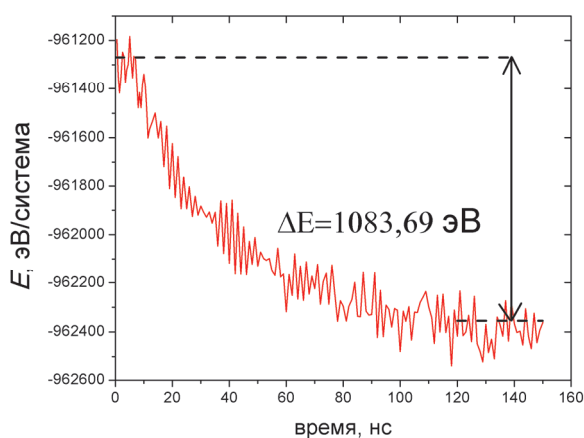


Рис. 3. Изменение потенциальной энергии системы при моделировании при $T = 1000 \text{ К}$

Результаты нашего моделирования близки к данным эксперимента, полученными в работах [6–9], где наблюдалась аналогичная картина расслоения углерода. В работах [8, 9] наблюдали спиnodальный распад системы Fe–C с выделением углерода вдоль плоскостей с ориентацией (102), в то время как данные работ [6, 7] указывают, что плоскости имеют индекс (103). При проведении моделирования температура всегда поддерживалась постоянной, а содержание углерода составляло 4,5 ат. %. Были проведены расчеты при различных размерах суперячейки вплоть до 500 тыс. атомов железа и размером ребра куба до 2 нм. Результаты моделирования показали, что толщина плоских областей, содержащих углерод, примерно одинакова ($\approx 17 \text{ \AA}$) и не зависит от размера ячейки. В то же время толщина зоны с пониженным содержанием углерода составляет около 30 \AA . Отметим, что при среднем содержании 4,5 ат. % в слоях выделения концентрация углерода увеличивалась до ≈ 9 ат. % (рис. 2). Подобная геометрия выделений углерода наблюдалась как в ряде экспериментальных работ [16], так и в работах по компьютерному моделированию [17, 18].

В процессе кластеризации мы наблюдали постепенное уменьшение полной энергии системы со временем (рис. 3). Разницу энергий до и после образования скоплений можно рассматривать как движущую силу процесса, и ее величина оценивается в 453,61 Дж/моль. В работе [19] при калориметрическом изучении отпуска мартенсита на его ранних стадиях наблюдалось выделение теплоты 760 Дж/моль. Результаты нашего моделирования качественно согласуются с этими данными. Отличия в результатах могут быть объяснены возможным влиянием на процессы кластеризации структурных дефектов (дислокаций и межзеренных границ), которые не учитывались в расчетах.

Таблица

Локальное изменение параметров кристаллической решетки сплава Fe–C в различных областях расчётной суперячейки при расслоении углерода

		$a = b, \text{ \AA}$	$c, \text{ \AA}$	c/a
свежезакаленный, неупорядоч.		2,875	2,971	1,033
после отпуска	область A	2,864	2,924	1,021
	область B	2,847	3,153	1,107
	в среднем на суперячейку	2,862	3,018	1,056

При кластеризации углерода происходит существенное увеличение степени тетрагональности, как это видно из таблицы. Чтобы объяснить данный эффект обратимся к рис. 1 б), на котором приведена полученная при моделировании картина распределения атомов железа на плоскости Oxz суперячейки (овалами выделены области, в которых данный срез пересекается с плоскими областями кластеризации углерода **B**). Видно, что в областях, где срез пересекает область кластеризации атомов C, решетка оказывается вытянутой вдоль оси z . Этот эффект, несомненно, связан с тем, что в указанных областях с повышенным содержанием углерода возрастает и величина тетрагональности, в соответствии с данными Курдюмова [2]. Казалось бы, что тогда для областей A, обедненных углеродом, должно наблюдаться отсутствие тетрагональности. Однако оказалось, что это не так. Как видно из рис. 1, б, области, обедненные и обогащенные углеродом, вынуждены кристаллографически сопрягаться друг с другом (когерентное сопряжение) вдоль плоскости Ozy . Поскольку области, где происходит выделение углерода, вытягиваются вдоль оси z вследствие тетрагональной деформации зоны обедненные углеродом, вынуждены подстраиваться к ним. Благодаря этому обстоятельству в них также возникает тетрагональное искажение, хотя и в меньшей степени.

Результаты для параметров решетки во время нагрева от 300 до 1200 К и последующего охлаждения показаны на рис. 4. Видно, что по достижении некоторой температуры происходит разупорядочивание атомов углерода по октапорам различного типа и наблюдается потеря тетрагональности. Причем скорость охлаждения/нагрева оказывает слабое влияние на значение температуры порядок–беспорядок, так уменьшение скорости со 100 К/нс до 10 К/нс приводит к изменению T_{crit} на ≈ 10 К.

Наблюдаемый гистерезис температуры перехода порядок–беспорядок при нагреве и в случае охлаждения, по-видимому, вызван тем, что для разупорядочения углероду необходимо просто переместиться в соседние октапоры типов x и y , в то время как для формирования упорядоченного состояния атомам C необходимо преодолеть больший путь диффузии, и за это время происходит дополнительное переохлаждение системы. Итак, полученные значения T_{crit} оказались равными 1072 и 1035 К для нагрева и охлаждения соответственно. Отметим, что гистерезис температуры T_{crit} был обнаружен авторами в недавней работе [20], однако различные скорости нагрева и охлаждения (100 и 80 К/нс) вызывали сомнения в результатах, кроме того, не обсуждалось влияние самой величины скорости изменения температуры, т. к. значения в сотни К/нс достаточно далеки от наблюдаемых скоростей охлаждения на практике.

При охлаждении со скоростью 10 К/нс на рис. 4, б, г наблюдается формирование плоскостей, аналогичных показанным на рис. 1, что выражается в больших значениях степени тетрагональности (отношении параметров c/a) и объеме, приходящемся на один атом Fe.

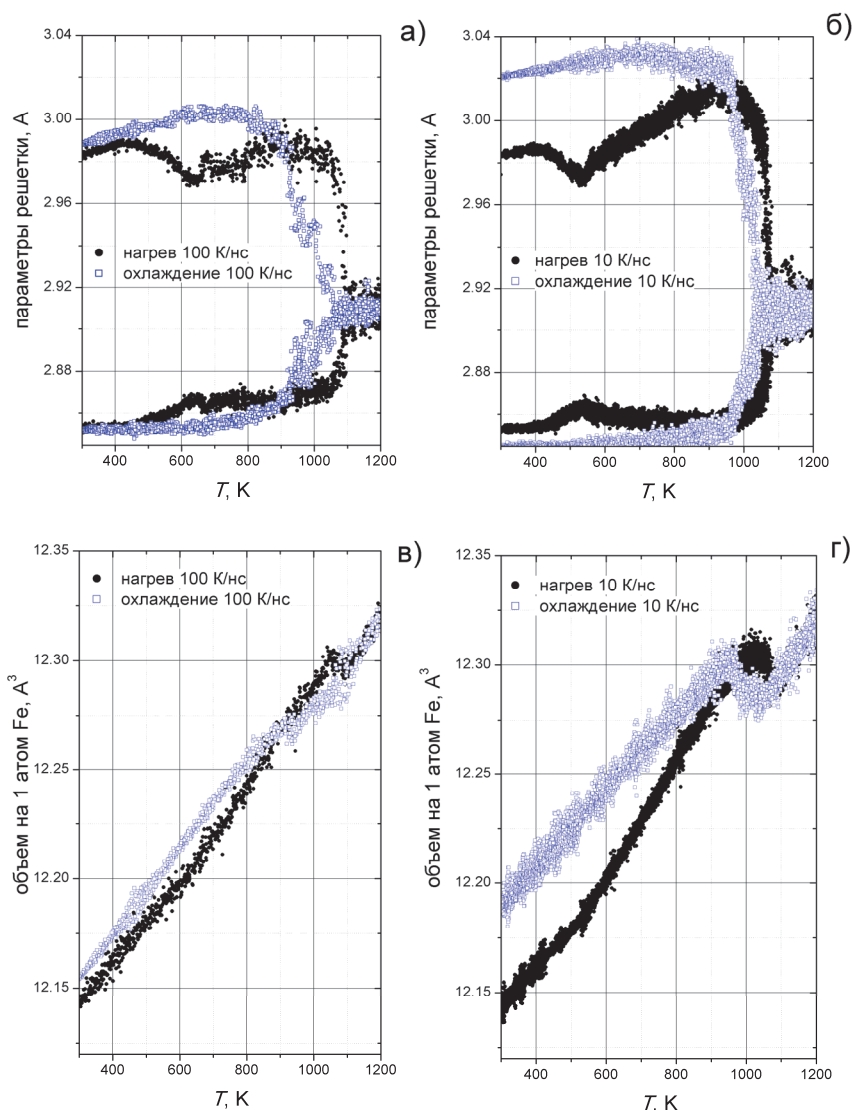


Рис. 4. Изменение решетки при отпуске мартенсита системы Fe-C на стадии двухфазного распада. а), б) температурные зависимости усредненных параметров решетки для скоростей нагрева 100 и 10 К/нс соответственно; в), г) объем приходящийся на один атом железа

Выводы

В работе проведено молекулярно-динамическое моделирование процесса отпуска мартенсита на стадии двухфазного распада до образования карбидов. При повышенных температурах наблюдается кластеризация углерода в виде плоских областей внутри кристаллической решетки, что находится в согласии с доступными экспериментальными данными. Представленный процесс описан на атомистическом уровне, получено, что атомы С в этих кластерах занимают октапоры z -типа, что вызывает значительное тетрагональное искажение решетки в этих областях, а также растяжение, хоть и значительно меньшее, областей, не содержащих углерод. Во время рассматриваемого процесса кластеризации наблюдается уменьшение полной энергии системы на 453,61 Дж/моль, что качественно находится в согласии с величиной в 760 Дж/моль, полученной в эксперименте [19].

Проведенное МД-моделирование нагрева мартенсита от комнатной температуры до 1200 К и охлаждения до первоначального состояния показало, что выше определенной температуры T_{crit} наблюдается разупорядочение углерода и образование кубической решетки. Наблюдаемый гис-

терезис температуры перехода в 37 К при нагревании и охлаждении подтверждает результаты работы [20], однако в данной работе моделирование проводилось со скоростью изменения температуры меньшей на порядок (10 К/нс).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 16-19-10252).

Литература

1. Krauss, G. Steels: processing, structure, and performance / G. Krauss. – Ohio, ASM Int. – 2015. – 651 p.
2. Kurdumoff, G.V. X-ray studies of the structure of quenched carbon steel / G.V. Kurdumoff, E.G. Kaminsky // *Nature*. – 1928. – Vol. 122. – P. 475–476.
3. Zener, C. Theory of strain interaction of solute atoms / C. Zener // *Physical Review*. – 1948. – Vol. 74, Issue 6. – P. 639.
4. Хачатурян, А.Г. К теории упорядочения атомов углерода в кристалле мартенсита / А.Г. Хачатурян, Г.А. Шаталов // *Физика металлов и металловедение*. – 1971. – Т. 32, № 1. – С. 5–13.
5. Хачатурян, А.Г. Углерод в мартенсите стали / А.Г. Хачатурян // *Несовершенства кристаллического строения и мартенситные превращения*. – М.: Наука, 1972. – С. 34–45.
6. Усиков, М.П. Электронно-дифракционное исследование начальных стадий распада углеродистого мартенсита / М.П. Усиков, В.И. Иконников, Л.М. Утевский // *Физика металлов и металловедение*. – 1975. – Т. 40, № 5. – С. 1026–1031.
7. Усиков, М.П. Структурные превращения при низком отпуске углеродистого мартенсита / М.П. Усиков, А.Г. Хачатурян // *Физика металлов и металловедение*. – 1977. – Т. 43, № 3. – С. 554–561.
8. Sandvik, B.P.J. Direct observations of carbon clusters in a high-carbon martensitic steel / B.P.J. Sandvik, C.M. Wayman // *Metallography*. – 1983. – Vol. 16, no. 4. – P. 429–447.
9. Crystallographic study of the tempering of martensitic carbon steel by electron microscopy and diffraction / S. Nagakura, Y. Hirotsu, M. Kusunoki *et al.* // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 1983. – Vol. 14, Issue 6. – P. 1025–1031.
10. Initial stages of Fe-C martensite decomposition / K. Han, M.J. Van Genderen, A. Bottger *et al.* // *Philosophical Magazine A*. – 2001. – Vol. 81, Issue 3. – P. 741–757.
11. Plimton, S. Fast parallel algorithm for short range molecular dynamics / S. Plimton // *Journal of Computational Physics*. – 1995. – Vol. 117, Issue 1. – P. 1–19.
12. Lau, T. Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys / T. Lau, C.J.F. Forst // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 98, Issue 21. – P. 215501.
13. Чирков П.В., Мирзоев А.А., Мирзаев Д.А. Тетрагональность и распределение атомов углерода в мартенсите Fe-C на основе молекулярно-динамического моделирования, *Физика металлов и металловедение*. – 2016. – Т. 117, № 1. – С. 38–45.
14. Hoover, W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions / W.G. Hoover // *Physical Review A*. – 1985. – Vol. 31, Issue 3. – P. 1695–1697.
15. Nose, S. Constant-temperature molecular dynamics. / S. Nose // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 1990. – Vol. 2, Supplement. – P. 115–119.
16. Olson, G.B. Martensite, a tribute to Morris Cohen / G.B. Olson, W.S. Owen. – ASM International: Tech. Rep. – 1992. – 400 p.
17. Molecular dynamics study of the ordering of carbon in highly supersaturated α -Fe / C.W. Sinclair, M. Perez, R.G.A. Veiga, A. Weck // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 81, Issue 22. – P. 224204.
18. The tempering of iron-carbon martensite; dilatometric and calorimetric analysis / L. Cheng, C.M. Brakman, B.M. Korevaar, E.J. Mittemeijer // *Metallurgical Transactions A*. – 1988. – Vol. 19, no. 10. – P. 2415–2426.
19. Temperature hysteresis of the order-disorder transition in carbon-supersaturated α -Fe / P. Maugis, F. Danoix, H. Zapolsky *et al.* // *Physical Review B*. – 2017. – Vol. 96. – Issue 21. – P. 214104.

Поступила в редакцию 26 августа 2018 г.

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF CARBON CLUSTERIZATION UNDER MARTENSITE TEMPERING

P.V. Chirkov¹, A.A. Mirzoev², D.A. Mirzaev²

¹ Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation

² South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: p.chirkow@gmail.com

Further improvement of the properties of steel is impossible without understanding of the atomic-level processes that take place at the different stages of heat treatment. In this work a simulation of iron-carbon martensite was performed using the method of molecular dynamics with interatomic potential based on the embedded atom model (EAM). The observed diffusion of carbon on octahedral interstices at high temperatures (at several hundreds of °C) causes the formation of short-range ordering of C atoms by way of periodical plain clusters divided by lattice regions, which almost do not contain carbon. We found that the cluster regions are orientated relative to iron lattice with (102) indices, what is consistent with the results of the experimental studies of the structures produced during martensite tempering at the stage of two-phase decomposition. The atomistic simulations results show that carbon clusterization causes the increasing of the lattice parameters relation c/a , both in the lattice regions where clusters are formed, and in the zones which do not contain any carbon atoms. The last fact is explained due to necessity of crystallographic coupling of these two zones. The thickness of the clusters turned out to equal 17 Å, and that of the regions not filled with carbon – 30 Å. During the simulation the total energy of modeling system decreases, and that can be considered as the reaction driving force with the value of 453,6 J/mole, which shows a qualitative agreement with other works.

Keywords: martensite; steel tempering; two-phase decomposition; molecular dynamics.

References

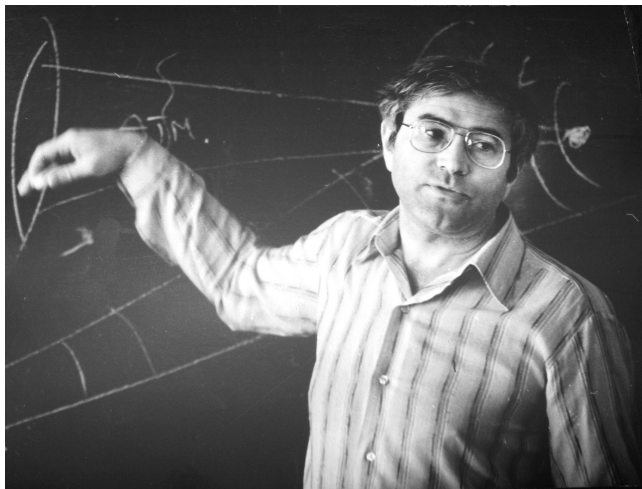
1. Krauss G. *Steels: processing, structure, and performance*. Ohio: ASM Int., 2015, 651 p.
2. Kurdumoff G.V., Kaminsky E.G. X-ray studies of the structure of quenched carbon steel. *Nature*. 1928, Vol. 122, pp. 475–476. DOI: 10.1038/122475a0
3. Zener C. Theory of strain interaction of solute atoms. *Physical Review*, 1948, Vol. 74, Issue 6, p. 639. DOI: 10.1103/PhysRev.74.639
4. Khachaturyan A.G., Shatalov G.A. К теории упорядочения атомов углерода в кристалле мартенсита (On the theory of carbon ordering in the martensite crystal). *Fizika metallov i metallovedenie*, 1971, Vol. 32, no. 1, pp. 5–13. (in Russ.).
5. Khachaturyan A.G. Углерод в мартенсите стали (Carbon in steel matertensite). *Nesovershenstva kristallicheskogo stroeniya i martensitnye prevrashcheniya* (Imperfections of crystal structure and martensitic transitions). Moscow, Nauka Publ., 1971, pp. 34–45. (in Russ.).
6. Usikov M.P., Ikonnikov V.I., Utevskiy L.M. Elektronno-difraktsionnoe issledovanie nachal'nykh stadiy raspada uglerodistogo martensita (Electron diffraction investigations of initial stages of martensite decomposition). *Fizika metallov i metallovedenie*, 1975, Vol. 40, no. 5, pp. 1026–1031. (in Russ.).
7. Usikov M.P., Khachaturyan A.G. Strukturnye prevrashcheniya pri nizkom otpuske uglerodistogo martensita (Structural transformations at the low-temperature tempering of carbon martensite). *Fizika metallov i metallovedenie*, 1977, Vol. 43, no. 3, pp. 554–561. (in Russ.).
8. Sandvik B.P.J., Wayman C.M. Direct observations of carbon clusters in a high-carbon martensitic steel. *Metallography*, 1983, Vol. 16, Issue 4, pp. 429–447. DOI:10.1016/0026-0800(83)90031-9
9. Nagakura S., Hirotsu Y., Kusunoki M., Suzuki T., Nakamura Y. Crystallographic study of the tempering of martensitic carbon steel by electron microscopy and diffraction. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1983, Vol. 14, Issue 6, pp. 1025–1031. DOI:10.1007/BF02670441

10. Han K., van Genderen M.J., Böttger A., Zandbergen H.W., Mittemeijer E.J. Initial stages of Fe-C martensite decomposition. *Philosophical Magazine A*, 2001, Vol. 81, Issue 3, pp. 741–757. DOI:10.1080/01418610108212169
11. Plimton S. Fast parallel algorithm for short range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, Vol. 117, Issue 1, pp. 1–19. DOI:10.1006/jcph.1995.1039
12. Lau T., Forst C.J.F. Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys. *Physical Review Letters*, 2007, Vol. 98, Issue 21, 215501. DOI:10.1103/PhysRevLett.98.215501
13. Chirkov P.V., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. Tetragonality and the distribution of carbon atoms in the Fe-C martensite: molecular-dynamics simulation. *The Physics of Metals and Metallography*, 2016, Vol. 117, Issue 1, pp. 34–41. DOI: 10.1134/S0031918X1601004X
14. Hoover W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Physical Review A*, 1985, Vol. 31, Issue 3, pp. 1695–1697. DOI: 10.1103/PhysRevA.31.1695
15. Nose S. Constant-temperature molecular dynamics. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1990, Vol. 2, Supplement, pp. 115–119. DOI:10.1088/0953-8984/2/S/013
16. Olson G.B., Owen W.S. Martensite, a tribute to Morris Cohen. *ASM International: Tech. Rep.*, 1992, 331 p.
17. Sinclair C.W., Perez M., Veiga R.G.A., Weck A. Molecular dynamics study of the ordering of carbon in highly supersaturated α -Fe. *Physical Review B*, 2010, Vol. 81, Issue 22, 224204. DOI:10.1103/PhysRevB.81.224204
18. Cheng L., Brakman C.M., Korevaar B.M., Mittemeijer E.J. The tempering of iron-carbon martensite; dilatometric and calorimetric analysis. *Metallurgical Transactions A*, 1988, Vol. 19, no. 10, pp. 2415–2426. DOI:10.1007/BF02645469
19. Maugis P., Danoix F., Zapolsky H., Cazottes S., Goune M. Temperature hysteresis of the order-disorder transition in carbon-supersaturated α -Fe. *Physical Review B*, 2017, Vol. 96, Issue 21, 214104. DOI:10.1103/PhysRevB.96.214104

Received August 26, 2018

БОРИС ЯКОВЛЕВИЧ ЗЕЛЬДОВИЧ. ПАМЯТИ КОЛЛЕГИ

16 декабря 2018 года ушел из жизни крупный физик-теоретик, член-корреспондент РАН, лауреат Государственной премии СССР, член международной академии астронавтики, Лондонского королевского общества, германской академии «Леопольдина», американского оптического общества и др. академий и международных научных сообществ, лауреат премии М. Борна Борис Яковлевич Зельдович, прекрасный ученый, замечательный педагог и широкой души человек, много сделавший в науке и заложивший основы физического образования в ЮУрГУ.



Борис Яковлевич родился 23 апреля 1944 года в Москве. Его отец – выдающийся физик Яков Борисович Зельдович (1914–1987), трижды Герой Социалистического Труда, которого называли самым засекреченным академиком Советского Союза. Мать – Варвара Павловна Зельдович (Константинова) (1907–1976), родом из семьи Константиновых, многочисленные представители которой внесли достойный вклад в различные области науки и техники. (Один из её братьев – Борис Павлович Константинов, академик, директор Ленинградского физико-технического института (1957–1967 г.), Герой Социалистического Труда). Помимо Бори, в семье уже были две дочери – Ольга (1938) и Марина (1939–2018), которые принялись опекать маленького брата.

Занятость отца не позволяла ему уделять достаточное количество времени воспитанию детей, но, по воспоминаниям одной из сестер: «...с Бориской у отца уже было больше терпения и педагогического такта. По первоначальным намерениям именно для Бори он написал свою “Высшую математику для начинающих”...». Борис Яковлевич сохранил на всю жизнь доверительные отношения с отцом.



Основная нагрузка по воспитанию детей лежала на матери. Атмосфера «добра, тепла и высокого духа, лишённого мелочности и меркантильности», царившая в семье – целиком и полностью её заслуга. «Она была человеком удивительной тактичности, мягкости и уважения ко всем, с кем соприкасалась, включая нас (и в детстве, и во взрослом возрасте), зятьёв, внуков». (Из воспоминаний сестры, М.Я. Зельдович).



Основная нагрузка по воспитанию детей лежала на матери. Атмосфера «добра, тепла и высокого духа, лишённого мелочности и меркантильности», царившая в семье – целиком и полностью её заслуга. «Она была человеком удивительной тактичности, мягкости и уважения ко всем, с кем соприкасалась, включая нас (и в детстве, и во взрослом возрасте), зятьёв, внуков». (Из воспоминаний сестры, М.Я. Зельдович).

Боря был в детстве очень непоседлив, пытлив и инициативен. Как вспоминает известный физик и друг Бориса Яковлевича, участник описываемых событий И. Лейпунский: «...однажды, когда он с ребятами проник за забор на территорию ИХФ, они нашли там бочку из-под негашеной извести (ее называли карбидом), и Боря пописал в нее, а потом кинул туда спичку. Произошел взрыв...». Он же разъясняет «... если кусок карбида попадет, например, в лужу, то карбид не взорвется – будет выделяться ацетилен, который горит голубым пламенем. Но бочка рванула из-за ограниченного пространства, в котором быстро скопился горючий газ». Брызги попали Боре в лицо и немного в глаза, он получил химические ожоги. Его родителей в тот момент не было дома. На помощь прибежал А.С. Компанеев, сын которого был еще одним участником опыта. Он отвез Борю в больницу, что, наверное, сохранило ему зрение.

В 1961 году Борис Яковлевич поступил на физический факультет Московского университета, который окончил с отличием в 1966 г. По окончании университета он продолжил обучение в аспирантуре Института теоретической и экспериментальной физики АН СССР, где в 1969 г. защитил кандидатскую диссертацию.

Информация

В 1969–1970 гг. Б.Я. Зельдович работал в должности инженера в том же институте, откуда затем перешел в Физический институт АН СССР, где работал в должности младшего, а впоследствии старшего научного сотрудника в течение 1970–1981 гг.

С 1981 по 1987 год Борис Яковлевич – главный научный сотрудник Института проблем механики. Здесь же в 1981 он защитил докторскую диссертацию.

С 1987 года Борис Яковлевич работает на Урале в основанной им вузовско-академической лаборатории нелинейной оптики. Лаборатория является структурным подразделением Института электрофизики АН СССР (Екатеринбург) и Южно-Уральского государственного университета.

К этому моменту он уже вполне сложившийся ученый, широко известный не только в нашей стране, но и за рубежом, автор нескольких монографий, лауреат Государственной премии (1983).

Вместе с Борисом Яковлевичем в том же 1987 году на Урал приехали и его ученики – Александр Николаевич Чудинов и Юрий Евгеньевич Капицкий (в ту пору – аспиранты МФТИ). Чуть позднее, уже с кандидатской степенью – Виктор Анатольевич Кривошеков (МИФИ), и Олег Петрович Нестеркин (МФТИ). И конечно, здесь следует упомянуть жену Бориса Яковлевича, к тому моменту кандидата физико-математических наук, Надежду Борисовну Баранову. В 1988 году этот список пополнили молодые кандидаты физико-математических наук Юрий Викторович Мухин (МФТИ), Людмила Федоровна Рогачева (МГУ) и Наталия Дмитриевна Кундикова (МГУ).

В 1987 году Бориса Яковлевича избирают членом-корреспондентом АН СССР.

Основное направление научных исследований Б.Я. Зельдовича – проблемы нелинейной оптики и волновых процессов. Он автор открытия волнового фронта. Всемирно признаны его работы по нелинейному взаимодействию волн в фоторефрактивных кристаллах, спин-орбитальному взаимодействию света (это понятие введено им впервые), теоретические исследования взаимовлияния поляризации света и процесса его распространения. Им же введено в научный обиход понятие полярной асимметрии светового поля и предсказаны новые оптические эффекты в таких полях.

До сих пор спин-орбитальное взаимодействие света является актуальным направлением исследований оптиков во всем мире. Одна из наиболее цитируемых работ Бориса Яковлевича посвящена именно этой тематике.

Научные задачи, стоявшие перед вновь созданным научным подразделением, требовали притока молодых инициативных сотрудников. Однако в ЮУрГУ (в ту пору ЧПИ–ЧГТУ) ни физиков, ни тем более специалистов-оптиков не готовили. И тогда Борис Яковлевич с коллегами, устроив своеобразный «кастинг», в котором могли принять участие студенты любых факультетов вуза, организовал специальный поток, где обучал желающих по программам МГУ и физтеха.

Впоследствии (1988–1989) вуз стал осуществлять набор студентов на энергетический факультет по специальности «Физика и электрофизика высоких напряжений», где готовили пополнение для лаборатории нелинейной оптики.

В 1994 году Бориса Яковлевича пригласили работать в Университет Центральной Флориды в Орландо. Однако научные контакты с лабораторией нелинейной оптики на Урале и её сотрудниками не прервались. Как-то Борис Яковлевич признался, что его лучшие научные годы прошли в Челябинске. Именно здесь почти все эффекты, которые он предсказывал на бумаге, наблюдались и экспериментально. Он собрал вокруг себя выдающихся людей, которые многое сделали в науке, и даже уйдя из лаборатории и науки, многого добились в жизни. Это тоже особенность Бориса Яковлевича – привлекать к себе ярких людей и делиться с ними всем, чем обладает.

В 2008 году Б.Я. Зельдович опубликовал статью по механическим колебаниям маятников. (Зельдович Б.Я. *Импеданс и параметрическое возбуждение осцилляторов*, УФН, 2008, Т. 178, № 5, С. 489–510). На первый взгляд рядовая статья, которая может вызвать интерес только у специалистов, но это не так. Статья затрагивает фундаментальные основы физики, вокруг которых точили бесконечные дебаты в XX веке, а именно: проблемы «волнового (характеристического) сопротивления (импеданса)» как в электродинамике, так и в классической механике!

Природа щедро одарила Б.Я. Зельдовича высочайшими гуманитарными и общечеловеческими качествами. Его всегда отличали доброжелательность, интеллигентность, мудрость, тонкое чувство юмора, чуткость, заботливое и отзывчивое отношение к окружающим, умение по достоинству ценить человека, невзирая на регалии.

Именно таким навсегда останется Борис Яковлевич в памяти близких ему и глубоко скорбящих друзей и соратников всех тех с кем он работал, взаимодействовал, дружил, кого искренне уважал и любил.

Избранные труды Б.Я. Зельдовича

Всего Борисом Яковлевичем опубликовано более 300 научных работ, в том числе четыре монографии. Ниже приведен далеко не полный список его наиболее цитируемых (по версии базы данных Scopus) работ, опубликованных в разные годы (последнее число в скобках – количество цитирований).

1. Liberman V.S., Zel'dovich B.Ya. Spin-orbit interaction of a photon in an inhomogeneous medium. *Physical Review A*, 1992, Vol. 46, Issue 8, pp. 5199–5207. (243)

2. Baranova N.B., Mamaev A.V., Pilipetsky N.F., Shkunov V.V., Zel'dovich B.Ya. Wave-front dislocation: topological limitations for adaptive systems with phase conjugation. *Journal of the Optical Society of America*, 1983, Vol. 73, Issue 5, pp. 525–528. (195)

3. Dooghin A.V., Kundikova N.D., Liberman V.S., Zeldovich B.Ya. Optical Magnus effect. *Physical Review A*, 1992, Vol. 45, Issue 11, pp. 8204–8208. (120)

4. Vinogradov A.V., Zeldovich B.Y. X-ray and far uv multilayer mirrors: Principles and possibilities. *Applied Optics*, 1977, Vol. 16, Issue 1, pp. 89–93. (109)

5. Baranova N.B., Chudinov A.N., Zel'dovich B.Ya. Polar asymmetry of photoionization by a field with $\langle E^3 \rangle \neq 0$. Theory and experiment. *Optics Communication*, 1990, Vol. 79, Issue 1-2, pp. 116–120. (94)

6. Sarkissian H., Serak S.V., Tabiryan N.V., Glebov L.B., Rotar V., Zeldovich B.Y. Polarization-controlled switching between diffraction orders in transverse-periodically aligned nematic liquid crystals. *Optics Letters*, 2006, Vol. 31, Issue 15, pp. 2248–2250. (68)

7. Baranova N.B., Bogdanov Yu.V., Zel'dovich B.Ya. Electrical analog of the Faraday effect and other new optical effects in liquids. *Optics Communications*, 1997, Vol. 22, Issue 2, pp. 243–247. (56)

8. Zel'dovich B.Ya., Klyshko D.N. *Field statistics in parametric luminescence. JETP Letters (English translation of Pis'ma)*, 1969, Vol. 9, Issue 1, pp. 40–43. (52)

9. Baranova N.B., Zel'dovich B.Y. Physical effects in optical fields with nonzero average cube, $\langle E \rangle \neq 0$. *Journal of the Optical Society of America B: Optical Physics*, 1991, Vol. 8, Issue 1, pp. 27–32. (44)

10. Pilipetski N.F., Sukhov A.V., Tabiryan N.V., Zel'dovich B.Ya. The orientational mechanism of nonlinearity and the self-focusing of He-Ne laser radiation in nematic liquid crystal mesophase (theory and experiment). *Optics Communications*, 1981, Vol. 37, Issue 4, pp. 280–284. (43)

11. Sarkissian H., Park B., Tabirian N., Zeldovich B. Periodically aligned liquid crystal: Potential application for projection displays. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 2006, Vol. 451, Issue 1, pp. 1–19. (43)

12. Zel'dovich B.Ya., Shkunov V.V. Wavefront reproduction in stimulated raman scattering. *Soviet Journal of Quantum Electronics*, 1977, Vol. 7, no. 5, pp. 610–615. (36)

13. Tabiryan N.V., Zel'dovich B.Ya. Orientational optical non-linearity of liquid crystals 1. Nematics. *Molecular crystals and liquid crystals*, 1980, Vol. 62, Issue 3-4, pp. 237–250. (33)

14. Baranova, N.B., Zel'dovich, B.Ya. Separation of mirror isomeric molecules by radio-frequency electric field of rotating polarization. *Chemical Physics Letters*, 1978, Vol. 57, Issue 3, pp. 435–437. (33)

15. Liberman V.S., Zel'dovich B.Ya. Birefringence by a smoothly inhomogeneous locally isotropic medium. *Physical Review E*, 1994, Vol. 49, Issue 3, pp. 2389–2396. (32)

16. Zel'dovich B.Y., Tabiryan N.V. Orientational optical nonlinearity of liquid crystals. *Soviet Physics – Uspekhi*, 1985, Vol. 28, no. 12, pp. 1059–1083. (31)

17. Garibyan O.V., Kompanets I.N., Parfyonov A.V., Pilipetsky N.F., Shkunov V.V., Sudarkin A.N., Sukhov A.V., Tabiryan N.V., Vasiliev A.A., Zel'dovich B.Ya. Optical phase conjugation by microwatt power of reference waves via liquid crystal light valve. *Optics Communications*, 1981, Vol. 38, Issue 1, pp. 67–70. (30)

18. Ilinykh P.N., Nestiorkin O.P., Zeldovich B.Ya. Recording a static hologram with laser beams of different frequencies in photorefractive crystals. *Journal of the Optical Society of America B: Optical Physics*, 1991, Vol. 8, Issue 5, pp. 1042–1046. (29)

Информация

19. Glebov L.B., Lumeau J., Mokhov S., Smirnov V., Zeldovich B.Ya. Reflection of light by composite volume holograms: Fresnel corrections and Fabry–Perot spectral filtering. *Journal of the Optical Society of America A*, 2008, Vol. 25, Issue 3, pp. 751–764. (26)
20. Baranova N.B., Reiss H.R., Zeldovich B.Ya. Multiphoton and tunnel ionization by an optical field with polar asymmetry. *Physical Review A*, 1993, Vol. 48, Issue 2, pp. 1497–1505. (26)
21. Savchenko, A.Yu., Zel'dovich, B.Ya. Wave propagation in a guiding structure: One step beyond the paraxial approximation. *Journal of the Optical Society of America B: Optical Physics*, 1996, Vol. 13, Issue 2, pp. 273–281. (25)
22. Sarkissian H., Zeldovich B.Y., Tabiryian N.V. Polarization-universal bandgap in periodically twisted nematics. *Optics Letters*, 2006, Vol. 31, Issue 11, pp. 1678–1682. (23)
23. Goltser I.V., Darscht M.Ya., Kundikova N.D., Zel'dovich, B.Ya. An adjustable quarter-wave plate. *Optics Communications*, 1993, Vol. 97, Issue 5-6, pp. 291–294. (21)
24. Chudinov A.N., Kapitzky Y.E., Shulginov A.A., Zel'dovich B.Y. Interferometric phase measurements of average field cube $E_{\omega}^2 E_{2\omega}^*$. *Optical and Quantum Electronics*, 1991, Vol. 23, Issue 8, pp. 1055–1060. (21)
25. Tabiryian N.V., Serak S.V., Nersisyan S.R., Roberts D.E., Zeldovich B.Ya., Steeves D.M., Kimball B.R. Broadband waveplate lenses. *Optics Express*, 2016, Vol. 24, Issue 7, pp. 7091–7102. (21)
26. Savchenko A.Yu., Zeldovich B.Ya. Birefringence by a smoothly inhomogeneous locally isotropic medium: Three-dimensional case. *Physical Review E*, 1994, Vol. 50, Issue 3, pp. 2287–2292. (21)
27. Blaschuk V.N., Krasheninnikov V.N., Melnikov N.A., Pilipetsky N.F., Ragulsky V.V., Shkunov V.V., Zel'dovich B.Ya. SBS wave front reversal for the depolarized light – Theory and experiment. *Optics Communications*, 1978, Vol. 27, Issue 1, pp. 137–141. (20)
28. Savchenko A.Y., Tabiryian N.V., Zel'dovich B.Y. Transfer of momentum and torque from a light beam to a liquid. *Physical Review E*, 1997, Vol. 55, Issue 4, pp. 4773–4782. (20)

**Воронцов А.Г., Вяткин Г.П., Голубев Е.В., Бескачко В.П., Заляпин В.И.,
Кривошеков В.А., Кундикова Н.Д., Соболев А.Н., Подгорнов Ф.В.,
Подошведов С.А., Хомутова Т.Н., Шульгинов А.А., Шестаков А.Л.**

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 научным специальностям и соответствующим им отраслям науки: 01.01.01 – Вещественный, комплексный и функциональный анализ (физико-математические науки), 01.01.02 – Дифференциальные уравнения, динамические системы и оптимальное управление (физико-математические науки), 01.01.07 – Вычислительная математика (физико-математические науки), 01.01.09 – Дискретная математика и математическая кибернетика (физико-математические науки), 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы (физико-математические науки), 01.04.05 – Оптика (физико-математические науки), 05.13.19 – Методы и системы защиты информации, информационная безопасность (физико-математические науки)

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международных справочных системах по периодическим и продолжающимся изданиям “Ulrich’s Periodicals Directory”, “Zentralblatt MATH”, “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 11, № 1
2019

16+

Редактор *Е.В. Федорова*
Техн. редактор *А.В. Миних*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 25.01.2019. Дата выхода в свет 31.01.2019.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 9,30.

Тираж 500 экз. Заказ 6/17. Цена свободная.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ.
454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.