

ВЕСТНИК



**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

**2019
Т. 11, № 2**

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.** (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва)
д.ф.-м.н., профессор **Бучельников В.Д.** (Челябинский государственный университет, г. Челябинск)
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)
Ph. D., профессор **Ким Джейван** (Kim Jaewan, Корейский институт передовых исследований KIAS, г. Сеул, Южная Корея)
Ph. D., профессор **Ким Кишик** (Kim Kisik, INHA-Университет, г. Инчон, Южная Корея)
д.ф.-м.н., профессор **Кундикова Н.Д.** (Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург)
д.ф.-м.н., профессор **Меньших В.В.** (Воронежский институт МВД Российской Федерации, г. Воронеж)
д.ф.-м.н., профессор **Пинчук С.И.** (Университет штата Индиана, г. Блумингтон, США)
Ph. D., ассистент-профессор **Пузырев Е.С.** (Университет Вандербильта, г. Нэшвилл, США)
д.т.н., профессор **Равшанов Н.К.** (Ташкентский университет информационных технологий, г. Ташкент, Узбекистан)
д.т.н., профессор **Уткин Л.В.** (Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург)
Prof. dr. ir. **Ферпуст И.** (Католический университет, г. Лёвен, Бельгия)
д.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Штраус В.А.** (Университет Симона Боливара, г. Каракас, Венесуэла)



BULLETIN

OF THE SOUTH URAL
STATE UNIVERSITY

2019

Vol. 11, no. 2

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
V.D. Buchelnikov, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, 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
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

- БОЗИЕВ О.Л. О слабых решениях нагруженного гиперболического уравнения с однородными краевыми условиями 5
- KOVALEVA L.A., SOLDATOVA E.A., ZAGREBINA S.A. The Barenblatt–Zhel'tov–Kochina Equation with Boundary Neumann Condition and Multipoint Initial-Final Value Condition 14
- РОЙТЕНБЕРГ В.Ш. О грубости и бифуркациях полиномиальных дифференциальных уравнений на окружности..... 20
- УШАКОВ А.Л. Асимптотически оптимальное решение модельной задачи для экранированного уравнения Пуассона..... 25

Механика

- ЯГАНОВ В.М. Собственные колебания вращающегося упругого стержня с демпфером..... 36

Физика

- ANIKINA E.V., BALYAKIN I.A., BESKACHKO V.P. Importance of Atomic-Like Basis Set Optimization for DFT Modelling of Nanomaterials 44
- БАИРОВА Г.Д., МИРЗОЕВ А.А. Ближний порядок в сплавах Fe–Cr: моделирование методом решеточного Монте-Карло..... 51
- BAIGUTLIN D.R., ZAGREBIN M.A., SOKOLOVSKIY V.V., BUCHELNIKOV V.D. Ab Initio Calculation of Vacancy Formation Energy in Antiperovskite Mn_3GaC 58
- ЛУПИЦКАЯ Ю.А., КАЛГАНОВ Д.А., КОВАЛЕНКО Л.Ю., ЯРОШЕНКО Ф.А., АНТОНОВА Ю.В. Фазообразование, структура и ионная проводимость антимолибдатов серебра 65

CONTENTS

Mathematics

BOZIEV O.L. On Weak Solutions of Loaded Hyperbolic Equation with Homogeneous Boundary Conditions.....	5
KOVALEVA L.A., SOLDATOVA E.A., ZAGREBINA S.A. The Barenblatt–Zhel'tov–Kochina Equation with Boundary Neumann Condition and Multipoint Initial-Final Value Condition	14
ROITENBERG V.Sh. On Structural Stability and Bifurcations of Polynomial Differential Equations on the Circle.....	20
USHAKOV A.L. Asymptotically Optimal Solution of the Model Task for the Screened Poisson Equation.....	25

Mechanics

YAGANOV V.M. Self-Oscillations of a Rotating Elastic Rod with Damper.....	36
---	----

Physics

ANIKINA E.V., BALLYAKIN I.A., BESKACHKO V.P. Importance of Atomic-Like Basis Set Optimization for DFT Modelling of Nanomaterials.....	44
BAIROVA G.D., MIRZOEV A.A. Short-Range Order in Fe–Cr Alloys: Simulation by the Lattice Monte Carlo Method.....	51
BAIGUTLIN D.R., ZAGREBIN M.A., SOKOLOVSKIY V.V., BUCHELNIKOV V.D. Ab Initio Calculation of Vacancy Formation Energy in Antiperovskite Mn_3GaC	58
LUPITSKAYA Yu.A., KALGANOV D.A., KOVALENKO L.Yu., YAROSHENKO F.A., ANTONOVA Yu.V. Phase Formation, Structure and Ion Conductivity of Silver Antimonate-Molibdates	65

О СЛАБЫХ РЕШЕНИЯХ НАГРУЖЕННОГО ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С ОДНОРОДНЫМИ КРАЕВЫМИ УСЛОВИЯМИ

О.Л. Бозиев^{1,2}

¹ Институт информатики и проблем регионального управления Кабардино-Балкарского научного центра РАН, г. Нальчик, Российская Федерация

² Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, г. Нальчик, Российская Федерация

E-mail: boziev@yandex.ru

Рассматривается смешанная задача с однородными краевыми условиями для нагруженного волнового уравнения, содержащего интеграл по пространственной переменной от натуральной степени модуля решения. Вводится определение слабого решения данной задачи, для которого исследуются вопросы существования и единственности. Для доказательства существования решения используется метод компактности, который формально заключается в том, что при доказательстве сходимости приближенного решения, построенного методом Галеркина, существенно используются вполне непрерывные вложения пространств Соболева. Для использования метода необходимы априорные оценки решения задачи, которые частично установлены в предыдущих работах автора и в предлагаемой статье. Вслед за этим строятся приближенные галеркинские решения. Существование приближенных решений доказывается с помощью теоремы существования для обыкновенных дифференциальных уравнений. После этого производится предельный переход, соответствующий устремлению размерности пространства к бесконечности. Здесь возникает основная трудность применения метода, связанная с нелинейностью уравнения и состоящая в доказательстве компактности семейства приближенных решений. Для этого используются теоремы о компактности вложения пространств Соболева заданного порядка в пространства Соболева меньшего порядка. Единственность слабого решения доказывается стандартной процедурой из теории линейных и нелинейных гиперболических уравнений.

Ключевые слова: нагруженные уравнения в частных производных; априорные оценки; слабое решение; существование и единственность.

Введение

В работе [1] для решения смешанной задачи с однородными краевыми условиями для нагруженного гиперболического уравнения, аппроксимирующего дифференциальное уравнение в частных производных с натуральной степенной нелинейностью, был предложен приближенно-аналитический метод. Его особенностью является использование априорных оценок решения соответственной начально-краевой задачи для линеаризации обыкновенного дифференциального уравнения, ассоциированного с исходным. Решение задачи Коши для последнего используется для записи приближенного решения нагруженной задачи. Полученное описанным способом решение используется для запуска итерационного процесса нахождения «достаточно точного» приближенного решения нелинейной задачи с однородными начальными условиями. В [2] метод перенесен на случай рациональной степени нелинейности младшего члена в параболическом уравнении.

В данной работе исследуются вопросы существования и единственности слабого (обобщенного) решения задачи, рассмотренной в [1] с однородными граничными условиями.

В области $Q = \{(x,t): 0 < x < l, 0 < t < T\}$ рассмотрим нагруженное уравнение с натуральной степенью $p \geq 3$:

$$u_t - a^2 u_{xx} + b u_t \int_{\Omega} |u|^p dx = 0, \quad a > 1, b > 0, \Omega = [0, l]. \quad (1)$$

Оно может служить для аппроксимации нелинейного уравнения

$$u_{tt} - a^2 u_{xx} + b|u|^p u_t = 0,$$

возникающего в задачах управления, а также моделирующего некоторые нелинейные физические процессы. Константы a и b являются параметрами моделируемого процесса. Уравнения различного типа и порядка с интегральной нагрузкой, аналогичной используемой в (1), представляют и самостоятельный интерес, в силу того, что ими моделируются, например, процессы долгосрочного прогнозирования и регулирования уровня грунтовых вод и почвенной влаги, переноса частиц, некоторые задачи оптимального управления.

Требуется найти интегрируемую функцию $u(x, t)$, удовлетворяющую уравнению (1) в области Q , а также при $\varphi_1(x), \varphi_2(x) \in L_p(\Omega)$ условиям:

$$u(x, 0) = \varphi_1(x), u_t(x, 0) = \varphi_2(x), 0 \leq x \leq l; \quad (2)$$

$$u(0, t) = 0, u(l, t) = 0, 0 \leq t \leq T. \quad (3)$$

1. Априорные оценки

Всюду $\|v\|_{p, \Omega}^p = \int_{\Omega} |v|^p dx$ выражает норму функции $v(t)$ в пространстве $L_p(\Omega)$, $u_{mt} = \partial u_m / \partial t$.

Умножая (1) скалярно на u_t и применяя стандартные для подобных случаев несложные преобразования, легко получить неравенства, выполняющиеся для всех значений $t \in [0, T]$

$$\int_{\Omega} (u_t^2 + a^2 u_x^2) dx \leq C_1(t), \|u_t\|_{2, \Omega}^2 \leq C_1(t), \|u_x\|_{2, \Omega}^2 \leq \frac{C_1(t)}{a^2}, 0 \leq t \leq T. \quad (4)$$

Далее, в предположении $u \in L_{p-2}(\Omega)$ умножим уравнение (1) скалярно на функцию u^{p-1} . Элементарные преобразования и умножение его на $\operatorname{sgn}^p u$, приводят к уравнению

$$\frac{1}{p} \frac{d^2}{dt^2} \|u\|_{p, \Omega}^p + \frac{b}{2p} \frac{d}{dt} \|u\|_{p, \Omega}^{2p} = (p-1) \int_{\Omega} |u|^{p-2} (u_t^2 - a^2 u_x^2) dx,$$

после интегрирования которого по t получаем

$$\frac{d}{dt} \|u\|_{p, \Omega}^p + \frac{b}{2} \|u\|_{p, \Omega}^{2p} = p(p-1) \int_{0}^t \int_{\Omega} |u|^{p-2} (u_t^2 - a^2 u_x^2) dx dt + \frac{d}{dt} \|u(x, 0)\|_{p, \Omega}^p + \frac{b}{2} \|u(x, 0)\|_{p, \Omega}^{2p}.$$

Рассмотрим отдельно первое слагаемое в правой части. Применяя к нему неравенство Гёльдера, в котором $s = q/(q-1)$, получаем при $q = 1$ в силу первого из (4)

$$\begin{aligned} \int_{0}^t \int_{\Omega} |u|^{p-2} (u_t^2 - a^2 u_x^2) dx dt &\leq \left(\int_{0}^t \| |u|^{p-2} \|_{p, \Omega}^{p-2} dt \right)^{\frac{1}{s}} \left(\int_{0}^t \int_{\Omega} |u_t^2 - a^2 u_x^2| dx dt \right)^{\frac{1}{q}} \leq \\ &\leq \sup_{x \in \Omega} \operatorname{ess} \left| \int_{\Omega} |u|^{p-2} dx \right| \cdot \int_{0}^t \int_{\Omega} |u_t^2 + a^2 u_x^2| dx dt \leq \sup_{x \in \Omega} \operatorname{ess} \|u\|_{p-2, \Omega}^{p-2} \cdot t C_1. \end{aligned}$$

К первому сомножителю применим последовательно неравенство Фридрихса и третье из (4):

$$\sup_{x \in \Omega} \operatorname{ess} \|u\|_{p-2, \Omega}^{p-2} \leq K_1 \sup_{x \in \Omega} \operatorname{ess} \|u_x\|_{2, \Omega}^{p-2} \leq K_1 \left(\frac{C_1}{a^2} \right)^{p-2}.$$

В итоге оказывается, что

$$\int_{0}^t \int_{\Omega} |u|^{p-2} (u_t^2 - a^2 u_x^2) dx dt \leq t C_1 K_1 \left(\frac{C_1}{a^2} \right)^{p-2} = \frac{C_1^{p-1} K_1}{a^{2(p-2)}} t.$$

Это позволяет перейти к неравенству

$$\frac{d}{dt} \|u\|_{p, \Omega}^p + \frac{b}{2} \|u\|_{p, \Omega}^{2p} \leq p(p-1) \frac{C_1^{p-1} K_1}{a^{2(p-2)}} t + \frac{b}{2} \|\varphi_1\|_{p, \Omega}^{2p},$$

после очередного интегрирования приводящего к соотношению

$$\|u\|_{2,\Omega}^p \leq \frac{b}{2} \int_0^t \|u\|_{p,\Omega}^{2p} dt + K_2.$$

Применяя к нему нелинейный аналог неравенства Гронуолла [3, с. 22], видим, что

$$\|u\|_{p,\Omega}^p \leq C_2, \tag{5}$$

где при всех $t \in [0, T]$ в силу (2)

$$C_2 = \frac{2K_2}{2 + bK_2T}, K_2 \geq p(p-1) \frac{C_1^{p-1}K_1}{2a^{2(p-2)}} t^2 + \frac{b}{2} t \|\varphi_1\|_{p,\Omega}^{2p} + \|\varphi_1\|_{p,\Omega}^p.$$

Для получения еще одной оценки необходимо умножить (1) скалярно на $\|u\|_{p,\Omega}^p u_t$. Полученное уравнение после элементарных преобразований примет вид:

$$\frac{d}{dt} \left(\|u\|_{p,\Omega}^p \left(\int_{\Omega} u_t^2 dx + a^2 \int_{\Omega} u_x^2 dx \right) \right) + 2b \int_{\Omega} \left(\|u\|_{p,\Omega}^p u_t \right)^2 dx = \left(\int_{\Omega} u_t^2 dx + a^2 \int_{\Omega} u_x^2 dx \right) \frac{d}{dt} \|u\|_{p,\Omega}^p.$$

Проинтегрируем его на интервале $[0, t]$:

$$\begin{aligned} & \|u\|_{p,\Omega}^p \left(\int_{\Omega} u_t^2 dx + a^2 \int_{\Omega} u_x^2 dx \right) + 2b \int_0^t \int_{\Omega} \left(\|u\|_{p,\Omega}^p u_t \right)^2 dx dt = \\ & = \int_0^t \frac{d}{dt} \|u\|_{p,\Omega}^p \int_{\Omega} \left(u_t^2 + a^2 u_x^2 \right) dx dt + \|u(x,0)\|_{p,\Omega}^p \int_{\Omega} \left(u_t^2(x,0) + a^2 u_x^2(x,0) \right) dx. \end{aligned}$$

Оба слагаемых правой части ограничены в силу (4) и (5):

$$\begin{aligned} \int_0^t \frac{d}{dt} \|u\|_{p,\Omega}^p \int_{\Omega} \left(u_t^2 + a^2 u_x^2 \right) dx dt & \leq C_1 \int_0^t d \left(\|u\|_{p,\Omega}^p \right) \leq C_1 \left(\|u(x,t)\|_{p,\Omega}^p - \|u(x,0)\|_{p,\Omega}^p \right) \leq \\ & \leq C_1 \left(\|u\|_{p,\Omega}^p + \|\varphi_1(x)\|_{p,\Omega}^p \right) \leq C_1 \left(C_2 + \|\varphi_1\|_{p,\Omega}^p \right); \\ \|u(x,0)\|_{p,\Omega}^p \int_{\Omega} \left(u_t^2(x,0) + a^2 u_x^2(x,0) \right) dx & = \|\varphi_1(x)\|_{p,\Omega}^p \left(\|\varphi_2\|_{2,\Omega}^2 + a^2 \|u_x(x,0)\|_{2,\Omega}^2 \right) \leq \\ & \leq \|\varphi_1\|_{p,\Omega}^p \left(\|\varphi_2\|_{2,\Omega}^2 + C_1(0) \right). \end{aligned}$$

Возвращаясь к последнему равенству и опуская в его левой части первое слагаемое, убеждаемся, что

$$\int_0^t \int_{\Omega} \left| \|u\|_{p,\Omega}^p u_t \right|^2 dx dt \leq C_3(t); \tag{6}$$

$$C_3(t) = C_1(t)C_2 + \|\varphi_1\|_{p,\Omega}^p \left(\|\varphi_2\|_{2,\Omega}^2 + C_1(t) + C_1(0) \right).$$

2. Существование слабого решения

Определение. Слабым решением задачи (1)–(3) назовем удовлетворяющую первому условию (2) функцию $u \in L_{\infty}(0, T; H_0^1(\Omega))$, которая при $u_t \in L_{\infty}(0, T; L_2(\Omega))$ и всякого $w \in H_0^1(\Omega)$ удовлетворяет также тождеству

$$(u_t, w) + \int_0^t \left(a^2 (u_x, w_x) + b \left(\|u\|_{p,\Omega}^p u_t, w \right) \right) dt = (\varphi_2, w).$$

Для доказательства существования слабого решения задачи воспользуемся методом Бубнова–Галеркина. Пусть функции $w_j(x)$, $j = 1, 2, \dots$, образуют базис пространства $H_0^1(\Omega)$. Определим приближенное решение поставленной задачи как

$$u_m = \sum_{j=1}^m g_j(t) w_j(x),$$

с дважды непрерывно дифференцируемыми функциями $g_j(t)$, являющимися решением задачи:

$$(u_{mt}, w_j) + a^2 (u_{mx}, w_{jx}) + b \left(\|u_m\|_{p,\Omega}^p u_{mt}, w_j \right) = 0, \quad 1 \leq j \leq m; \quad (7)$$

$$u_m(x, 0) = \varphi_{1m}(x) = \sum_{j=1}^m \varphi_{1j} w_j(x) \rightarrow \varphi_1(x) \text{ в } H_0^1(\Omega) \text{ при } m \rightarrow \infty; \quad (8)$$

$$u_{mt}(x, 0) = \varphi_{2m}(x) = \sum_{j=1}^m \varphi_{2m} w_j(x) \rightarrow \varphi_2(x) \text{ в } L_2(\Omega) \text{ при } m \rightarrow \infty. \quad (9)$$

Задача Коши (8), (9) для системы дифференциальных уравнений (7) может быть записана в виде:

$$W_m g_m'' + b A_m g_m' + a^2 W_m' g_m = 0, \quad g_j(0) = \varphi_{1j}, \quad g_j'(0) = \varphi_{2j}, \quad 1 \leq j \leq m,$$

где входящие в последнее уравнение матрицы определяются как

$$W_m = \|(w_i, w_j)\|, \quad W_m' = \|(w_i', w_j')\|, \quad A_m = \left\| \left(\|u_m\|_{p,\Omega}^p w_i, w_j \right) \right\|, \quad g_m = \|g_j\|.$$

Так как $\det W_m \neq 0$, то задача (7)–(9) имеет единственное абсолютно непрерывное решение. Норма функции u_m , входящая в (7), определяется следующим образом:

$$\|u_m\|_{p,\Omega}^p = \int_{\Omega} |u_m(x, t)|^p dx = \int_{\Omega} \left| \sum_{j=1}^m g_j(t) w_j(x) \right|^p dx = \sum_{j=1}^m |g_j(t)|^p \int_{\Omega} |w_j(x)|^p dx.$$

Убедимся в справедливости некоторых вспомогательных утверждений.

Лемма 1. Пусть функции u и u_t удовлетворяют определению слабого решения. Тогда:

$$u_m \rightarrow u \text{ сильно в } L_{\infty}(0, T; H_0^1(\Omega)); \quad (10)$$

$$u_{mt} \rightarrow u_t \text{ сильно в } L_{\infty}(0, T; L_2(\Omega)). \quad (11)$$

Доказательство. Допустим, что каждая из функций u_m и u_n является приближенным решением задачи (7)–(9). Разность уравнений (7), записанных для каждой из них, дает следующее уравнение с функцией $v = u_m - u_n$:

$$(v_{tt}, w_j) + a^2 (v_x, w_{jx}) + b \left(\|u_m\|_{p,\Omega}^p u_{mt} - \|u_n\|_{p,\Omega}^p u_{nt}, w_j \right) = 0.$$

Найдем разность уравнений, полученных умножением последнего на g_j' для каждого j и суммированием соответственно от 1 до m и n :

$$(v_{tt}, v_t) + a^2 (v_x, v_{xt}) + b \left(\|u_m\|_{p,\Omega}^p u_{mt} - \|u_n\|_{p,\Omega}^p u_{nt}, v_t \right) = 0.$$

С помощью элементарных преобразований отсюда легко получить уравнение

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} (v_t^2 + a^2 v_x^2) dx + b \|u_n\|_{p,\Omega}^p \int_{\Omega} v_t^2 dx + b \left(\|u_m\|_{p,\Omega}^p - \|u_n\|_{p,\Omega}^p \right) \int_{\Omega} v_t u_{mt} dx = 0,$$

интегрирование которого по t приводит к следующему:

$$\int_{\Omega} (v_t^2 + a^2 v_x^2) dx + 2b \int_0^t \int_{\Omega} v_t^2 dx dt + 2b \int_0^t \left(\|u_m\|_{p,\Omega}^p - \|u_n\|_{p,\Omega}^p \right) \int_{\Omega} v_t u_{mt} dx dt = F_{mn};$$

$$F_{mn} = \int_{\Omega} (v_t^2(x, 0) + a^2 v_x^2(x, 0)) dx = \int_{\Omega} \left((\varphi_{2m} - \varphi_{2n})^2 + a^2 (\varphi'_{1m} - \varphi'_{1n})^2 \right) dx.$$

Заметим, что в силу (8) и (9):

$$F_{mn} \rightarrow 0 \text{ при } m, n \rightarrow \infty. \quad (12)$$

Далее, перейдем от последнего равенства к неравенству:

$$\int_{\Omega} (v_t^2 + a^2 v_x^2) dx \leq 2b \int_0^t \left| \|u_m\|_{p,\Omega}^p - \|u_n\|_{p,\Omega}^p \right| \int_{\Omega} v_t u_{mt} dx dt + F_{mn}. \quad (13)$$

К модулю разности под знаком интеграла в правой части применим установленную в [4] оценку, которая в данном случае имеет вид:

$$\|u_m\|_{p,\Omega}^p - \|u_n\|_{p,\Omega}^p \leq pC_4(t)\sqrt{l} \sqrt{\int_{\Omega} |u_m - u_n|^2 dx}. \tag{14}$$

Для продолжения (14) воспользуемся неравенством Фридрихса [5]:

$$\|u_m\|_{p,\Omega}^p - \|u_n\|_{p,\Omega}^p \leq pC_4(t)\sqrt{l} \sqrt{\int_{\Omega} |v|^2 dx} \leq \frac{pC_4(t)\sqrt{l^3}}{2\sqrt{2}} \sqrt{\int_{\Omega} |v_x|^2 dx}.$$

Оценим второй сомножитель под знаком интеграла в правой части (13):

$$\left| \int_{\Omega} v_t u_{mt} dx \right| \leq \int_{\Omega} |v_t u_{mt}| dx \leq \sqrt{\int_{\Omega} v_t^2 dx} \sqrt{\int_{\Omega} u_{mt}^2 dx} \leq \sqrt{C_1} \sqrt{\int_{\Omega} v_t^2 dx}.$$

Тогда для первого слагаемого в правой части (13) можно записать:

$$2b \int_0^t \left| \|u_m\|_{p,\Omega}^p - \|u_n\|_{p,\Omega}^p \right| \left| \int_{\Omega} v_t u_{mt} dx \right| dt \leq C_5 \int_0^t \sqrt{\int_{\Omega} |v_x|^2 dx} \sqrt{\int_{\Omega} v_t^2 dx} dt \leq C_5 \int_0^t \int_{\Omega} (v_x^2 + a^2 v_t^2) dx dt,$$

$$C_5 = \frac{bp\sqrt{l^3}}{\sqrt{2}} \max_{t \in [0,T]} C_4(t) \max_{t \in [0,T]} \sqrt{C_1(t)}.$$

Вернемся к (13) и убедимся в выполнении неравенства

$$\int_{\Omega} (v_t^2 + a^2 v_x^2) dx \leq C_5 \int_0^t \int_{\Omega} (v_t^2 + a^2 v_x^2) dx dt + F_{mn}.$$

Лемма Гронуолла [3, с. 9], примененная к последнему, приводит к оценке:

$$\int_{\Omega} (v_t^2 + a^2 v_x^2) dx \leq F_{mn} e^{C_5 t},$$

которая с использованием (8), (9) и (12) при $m, n \rightarrow \infty$ дает

$$\int_{\Omega} ((u_{mt} - u_{nt})^2 + a^2 (u_{mx} - u_{nx})^2) dx \rightarrow 0.$$

Отсюда следует выполнение (10) и (11). Таким образом, лемма доказана.

Лемма 2. Пусть последовательность u_m сходится сильно к функции u в $L_2(Q)$. Тогда

$$\|u_m\|_{p,\Omega}^p \rightarrow \|u\|_{p,\Omega}^p \text{ сильно в } L_2(Q). \tag{15}$$

Доказательство. Сходимость следует из оценки (14).

Перейдем к доказательству существования слабого решения задачи.

Теорема 1. Слабое решение задачи (1)–(3) существует при $\varphi_1 \in H_0^1(\Omega)$, $\varphi_2 \in L_2(\Omega)$.

Доказательство. Скалярное произведение (8) с $g'_{jm}(t)$ и суммирование по j дает уравнение

$$(u_{mt}, u_{mt}) + a^2 (u_{mx}, u_{mx}) + b \left(\|u_m\|_{p,\Omega}^p u_{mt}, u_{mt} \right) = 0.$$

Так как последовательность u_m является точным решением задачи (1)–(3) при $\varphi_1(x) = \varphi_{1m}(x)$, $\varphi_2(x) = \varphi_{2m}(x)$, то для нее априорные оценки (4) принимают вид:

$$\|u_{mx}\|_{2,\Omega}^2 \leq \frac{C_1(t)}{a^2}, \quad \|u_{mt}\|_{2,\Omega}^2 \leq C_1(t). \tag{16}$$

В силу первого из (16) существует подпоследовательность u_{μ} такая, что

$$u_{\mu} \rightarrow u \text{ слабо в } L_{\infty}(0, T; H_0^1(\Omega)). \tag{17}$$

Заметим также, что

$$L_{\infty}(0, T; H_0^1(\Omega)) \subset H_0^1(0, T; H_0^1(\Omega)) = H_0^1(Q),$$

т.е. u_m принадлежит и множеству, ограниченному в $H_0^1(Q)$. Используя компактность вложения $H_0^1(Q)$ в $L_2(Q)$, отсюда можно заключить, что

$$u_{\mu} \rightarrow u \text{ сильно в } L_2(Q) \text{ и почти всюду.} \tag{18}$$

В свою очередь, в силу второго из (16) следует, что при $m \rightarrow \infty$ функция u_{mt} принадлежит множеству, ограниченному в $L_\infty(0, T; L_2(\Omega))$. При этом выполняется включение

$$L_\infty(0, T; L_2(\Omega)) \subset L_2(0, T; L_2(\Omega)) = L_2(Q),$$

позволяющее заключить, что u_{mt} принадлежит также ограниченному в $L_2(Q)$ множеству. Следовательно, из последовательности u_{mt} можно выделить подпоследовательность $u_{\mu t}$, такую, что

$$u_{\mu t} \rightarrow u_t \text{ слабо в } L_\infty(0, T; L_2(\Omega)). \quad (19)$$

Умножая теперь (7) на $\|u_m\|_{p, \Omega}^p g'_j(t)$ и рассуждая аналогично предыдущим случаям, приходим к оценке (6), записанной в виде

$$\int_0^t \int_\Omega \|u_m\|_{p, \Omega}^p |u_{mt}|^2 dx dt \leq C_3.$$

Она означает, что существует подпоследовательность $\|u_\mu\|_{p, \Omega}^p u_{\mu t}$ такая, что

$$\|u_\mu\|_{p, \Omega}^p u_{\mu t} \rightarrow \chi \text{ слабо в } L_2(Q). \quad (20)$$

Вернемся к (7) и перейдем в нем к пределу при $m = \mu$. Из (17), (19), (20) следует слабая сходимость в $L_\infty(0, T)$ слагаемых левой части уравнения (7):

$$(u_{\mu x}, w_{jx}) \rightarrow (u_x, w_{jx}), (u_{\mu t}, w_j) \rightarrow (u_t, w_j), (\|u_\mu\|_{p, \Omega}^p u_{\mu t}, w_j) \rightarrow (\chi, w_j).$$

Для того, чтобы функция u являлась слабым решением задачи (1)–(3), необходимо выполнение равенства $\chi = \|u\|_{p, \Omega}^p u_t$, справедливость которого следует из следующего утверждения.

Лемма 3 [6, с. 25]. Пусть Q – ограниченная область, v_μ и v – ограниченные функции из $L_p(Q)$, $1 < p < \infty$, такие, что $\|v_\mu\|_{p, Q} \leq C$, $v_\mu \rightarrow v$ почти всюду в Q . Тогда $v_\mu \rightarrow v$ слабо в $L_p(Q)$.

Для применения леммы необходимо показать, что

$$\chi_\mu = \|u_\mu\|_{p, \Omega}^p u_{\mu t} \rightarrow \|u\|_{p, \Omega}^p u_t = \chi.$$

Покажем сначала с помощью лемм 1 и 2 сильную сходимость $\chi_\mu \rightarrow \chi$. В самом деле:

$$\begin{aligned} \int_0^t \int_\Omega (\|u_\mu\|_{p, \Omega}^p u_{\mu t} - \|u\|_{p, \Omega}^p u_t)^2 dx dt &= \int_0^t \int_\Omega (\|u_\mu\|_{p, \Omega}^p u_{\mu t} - \|u\|_{p, \Omega}^p u_t + \|u\|_{p, \Omega}^p u_t - \|u_\mu\|_{p, \Omega}^p u_t)^2 dx dt \leq \\ &\leq \int_0^t \int_\Omega (\|u_\mu\|_{p, \Omega}^p (u_{\mu t} - u_t))^2 dx dt + \int_0^t \int_\Omega (u_t (\|u_\mu\|_{p, \Omega}^p - \|u\|_{p, \Omega}^p))^2 dx dt. \end{aligned}$$

В силу (5) первое слагаемое в правой части не превышает величины

$$C_2 \int_0^t \int_\Omega (u_{\mu t} - u_t)^2 dx dt \rightarrow 0, \mu \rightarrow \infty.$$

Во втором слагаемом в силу леммы 2:

$$\left(\|u_\mu\|_{p, \Omega}^p - \|u\|_{p, \Omega}^p \right)^2 \leq p^2 C_3^2 \int_\Omega |u_\mu - u|^2 dx \rightarrow 0, \mu \rightarrow \infty.$$

Применяя теперь (14) и (15) убеждаемся, что

$$\|u_\mu\|_{p, \Omega}^p u_{\mu t} \rightarrow \|u\|_{p, \Omega}^p u_t \text{ сильно в } L_2(Q) \text{ и почти всюду.}$$

Следовательно

$$\|u_\mu\|_{p, \Omega}^p u_{\mu t} \rightarrow \|u\|_{p, \Omega}^p u_t \text{ слабо в } L_2(Q),$$

откуда следует, что при всех j функции u удовлетворяет уравнению

$$(u_t, w) + \int_0^t \left(a^2 (u_x, w_x) + b \left(\|u\|_{p,\Omega}^p u_t, w \right) \right) dt = (\varphi_2, w),$$

а значит, является слабым решением задачи (1) – (3). Убедимся в выполнении первого из условий (2). Слабая сходимость $u_\mu(x, 0) \rightarrow u(x, 0)$ в $H_0^1(\Omega)$ следует из (17), а из (18) следует $u_\mu(x, 0) \rightarrow \varphi_1(x)$ в $H_0^1(\Omega)$, в силу чего $u(x, 0) = \varphi_1(x)$.

3. Единственность слабого решения

Теорема 2. Слабое решение задачи (1)–(3) единственно.

Доказательство. Воспользуемся процедурой, применяемой в теории линейных и нелинейных гиперболических уравнений [6, с.28]. Предположим, что задача (1)–(3) имеет два решения – u_1 и u_2 . Записывая для каждого из них уравнение (1), для их разности, где $v = u_1 - u_2$, получим задачу:

$$v_{tt} - a^2 v_{xx} + b \left(\|u_1\|_{p,\Omega}^p u_{1t} - \|u_2\|_{p,\Omega}^p u_{2t} \right) = 0; \tag{21}$$

$$v(x, 0) = 0, v_t(x, 0) = 0. \tag{22}$$

Будем искать решение задачи (21), (22) – функцию

$$v \in L_\infty(0, T; H_0^1(\Omega)), v_t \in L_\infty(0, T; L_2(\Omega)).$$

Для этого от (21) перейдем к уравнению

$$v_{tt} - a^2 v_{xx} + b \|u_1\|_{p,\Omega}^p (u_{1t} - u_{2t}) + b u_{2t} \left(\|u_1\|_{p,\Omega}^p - \|u_2\|_{p,\Omega}^p \right) = 0,$$

умножая которое скалярно на v_t получим

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_\Omega \left(v_t^2 + a^2 v_x^2 \right) dx + b \|u_1\|_{p,\Omega}^p \int_\Omega v_t^2 dx + b \left(\|u_1\|_{p,\Omega}^p - \|u_2\|_{p,\Omega}^p \right) \int_\Omega v_t u_{2t} dx = 0.$$

После интегрирования его в границах от 0 до t найдём:

$$\int_\Omega \left(v_t^2 + a^2 v_x^2 \right) dx + 2b \int_0^t \|u_1\|_{p,\Omega}^p \int_\Omega v_t^2 dx dt + 2b \int_0^t \left(\|u_1\|_{p,\Omega}^p - \|u_2\|_{p,\Omega}^p \right) \int_\Omega v_t u_{2t} dx dt = 0.$$

Далее повторяем все рассуждения, использованные при доказательстве леммы 1. После применения леммы Гронуолла в итоге получаем, что

$$\int_\Omega \left(v_t^2 + a^2 v_x^2 \right) dx \leq 0,$$

то есть

$$\int_\Omega \left((u_{1t} - u_{2t})^2 + a^2 (u_{1x} - u_{2x})^2 \right) dx = 0.$$

Для того, чтобы показать, что $u_1 = u_2$, при $s \in (0, T)$ положим

$$w(x, t) = \begin{cases} -\int_0^s v(x, \sigma) d\sigma, & t \leq s, \\ 0, & t > s. \end{cases}$$

Пусть, кроме того,

$$v_1(x, t) = \int_0^t v(x, \sigma) d\sigma,$$

откуда следует, что $w(x, t) = v_1(x, t) - v_1(x, s)$ при $t \leq s$.

Рассмотрим скалярное произведение обеих частей (21) с $w(x, t)$:

$$(v_{tt}, w) - a^2 (v_{xx}, w) = b \left(\|u_2\|_{p,\Omega}^p u_{2t} - \|u_1\|_{p,\Omega}^p u_{1t}, w \right),$$

от которого перейдем к равенству

$$\frac{d}{dt}(v_t, w) - (v_t, w_t) + a^2(v_x, w_x) = b \left(\|u_2\|_{1,\Omega} \frac{\partial u_2}{\partial t} - \|u_1\|_{1,\Omega} \frac{\partial u_1}{\partial t}, w \right).$$

Его интегрирование по t с учетом того, что $w(x, t) = 0$ при $t > s$, дает

$$-\int_0^s (v_t, w_t) dt - a^2 \int_0^s (v_x, w_x) dt = b \int_0^s \left(\|u_2\|_{p,\Omega}^p u_{2t} - \|u_1\|_{p,\Omega}^p u_{1t}, w \right) dt,$$

а так как $w_t = v$, $w(x, 0) = -v_1(x, s)$, то

$$-\frac{1}{2} \left(\|v(x, s)\|_{2,\Omega}^2 + a^2 \|v_1(x, s)\|_{2,\Omega}^2 \right) = b \int_0^s \left(\|u_2\|_{p,\Omega}^p u_{2t} - \|u_1\|_{p,\Omega}^p u_{1t}, w \right) dt.$$

Правую часть полученного равенства оценим по модулю, что приводит к неравенству

$$\|v(x, s)\|_{2,\Omega}^2 + a^2 \|v_1(x, s)\|_{2,\Omega}^2 \leq 2b \int_0^s \left(\|u_2\|_{p,\Omega}^p u_{2t} - \|u_1\|_{p,\Omega}^p u_{1t}, w \right) dt.$$

Обратимся к подынтегральному выражению в правой части, для которого имеем

$$\begin{aligned} \left| \left(\|u_2\|_{p,\Omega}^p u_{2t} - \|u_1\|_{p,\Omega}^p u_{1t}, w \right) \right| &\leq \sup \left(\|u_1\|_{p,\Omega}^p, \|u_2\|_{p,\Omega}^p \right) \int_0^l |v| |w| dx \leq \\ &\leq \left(\|u_1\|_{p,\Omega}^p + \|u_2\|_{p,\Omega}^p \right) \int_0^l |v| |v_1(x, t) - v_1(x, s)| dx \leq \left(\|u_1\|_{p,\Omega}^p + \|u_2\|_{p,\Omega}^p \right) \int_0^l |v| |v_1(x, t) + v_1(x, s)| dx. \end{aligned}$$

Усилим последнее неравенство, оценивая слагаемые в первом сомножителе с помощью (5), а ко второму сомножителю применяя неравенства Гельдера и Фридрихса:

$$\left| \left(\|u_2\|_{p,\Omega}^p u_{2t} - \|u_1\|_{p,\Omega}^p u_{1t}, w \right) \right| \leq 2C_2 \|v\|_{2,\Omega} \|v_1(x, t) + v_1(x, s)\|_{2,\Omega} \leq \frac{lC_1(t)}{8a^2} \left(\|v\|_{2,\Omega}^2 + a^2 \|v_{1x}\|_{2,\Omega}^2 \right).$$

Отсюда следует, что

$$\|v(x, s)\|_{2,\Omega}^2 + a^2 \|v_1(x, s)\|_{2,\Omega}^2 \leq \frac{lbC_1(t)}{4a^2} \int_0^s \left(\|v(x, s)\|_{2,\Omega}^2 + a^2 \|v_1(x, s)\|_{2,\Omega}^2 \right) dt.$$

Неравенство Гронуолла, примененное к последнему, приводит к равенству

$$\|v(x, s)\|_{2,\Omega}^2 + a^2 \|v_1(x, s)\|_{2,\Omega}^2 = 0,$$

откуда следует нужный нам результат:

$$v(x, s) = u_1(x, s) - u_2(x, s) = 0,$$

а именно – единственность слабого решения исследуемой задачи.

Литература

1. Бозиев, О.Л. Решение нелинейного гиперболического уравнения приближенно-аналитическим методом / О.Л. Бозиев // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2018. – № 51. – С. 5–14.
2. Бозиев, О.Л. Аппроксимация решений нелинейных параболических уравнений решениями ассоциированных нагруженных уравнений / О.Л. Бозиев // Нелинейный мир. – 2018. – Т. 16, № 4. – С. 3–10.
3. Филатов, А.Н. Интегральные неравенства и теория нелинейных колебаний / А.Н. Филатов, Л.В. Шарова. – М.: Наука, 1976. – 152 с.
4. Бозиев, О.Л. Обобщение одной априорной оценки решения квазилинейного гиперболического уравнения / О.Л. Бозиев // Известия Кабардино-Балкарского научного центра РАН. – 2010. – № 2(34). – С. 106–110.
5. Андреев, В.К. О неравенстве типа Фридрихса для составных областей / В.К. Андреев // Журнал Сибирского федерального университета. Серия «Математика и физика». – 2009. – Т. 2, Вып. 2. – С. 146–157.
6. Лионс, Ж.-Л. Некоторые методы решения нелинейных краевых задач / Ж.-Л. Лионс. – М.: Мир, 1972. – 587 с.

Поступила в редакцию 24 января 2019 г.

**ON WEAK SOLUTIONS OF LOADED HYPERBOLIC EQUATION
WITH HOMOGENEOUS BOUNDARY CONDITIONS****O.L. Boziev^{1,2}**¹ Institute of Computer Science and Problems of Regional Management of KBSC
of the Russian Academy of Sciences, Nal'chik, Russian Federation² Kabardino-Balkar State University, Nal'chik, Russian Federation
E-mail: boziev@yandex.ru

A mixed problem with homogeneous boundary conditions is considered for the loaded wave equation containing an integral over the spatial variable from the natural degree of the solution module. The definition of the weak solution of this problem is introduced, for which the questions of existence and uniqueness are studied. The compactness method is used to prove the existence of the solution. The idea of the method is that when proving the convergence of an approximate solution built by the Galerkin method, completely continuous embeddings of Sobolev spaces are essentially used. A priori estimates of the solution of the problem are necessary for use this method. Those estimates are partially established in the previous works of the author, and partially are established in the proposed article. Following this, the approximate Galerkin solutions are built. The existence of approximate solutions is proved by the existence theorem for ordinary differential equations. After that, a limit transition is made, as corresponding to the aspiration of the space dimension to infinity. Here comes the main difficulty of applying this method. It is related to the nonlinearity of the equation and consists in proving the compactness of the family of approximate solutions. For this purpose, theorems on the compactness of embedding Sobolev spaces of a given order in Sobolev spaces of a smaller order are used. The uniqueness of the weak solution is proved by a standard procedure from the theory of linear and nonlinear hyperbolic equations.

Keywords: loaded partial differential equations; a priori estimates; weak solution; existence and uniqueness.

References

1. Boziev O.L. Solution of nonlinear hyperbolic equations by an approximate analytical method. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*, 2018, Vol. 51, pp. 5–14. (in Russ.). DOI: 10.17223/19988621/51/1
2. Boziev O.L. Approximation of nonlinear parabolic equations solutions by solutions of associated loaded equations. *Journal Nonlinear World*, 2018, Vol. 16, no. 4, pp. 3–10. (in Russ.).
3. Filatov A.N., Sharova L.V. *Integral'nye neravenstva i teoriya nelineynykh kolebaniy* (Integral inequalities and the theory of nonlinear oscillations). Moscow, Nauka Publ., 1976, 152 p. (in Russ.).
4. Boziev O.L. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo nauchnogo tsentra RAN*, 2010, no. 2(34), pp. 106–110. (in Russ.).
5. Andreev V.K. On Inequalities of the Friedrichs type for Combined Domains. *J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys.*, 2009, Vol. 2, Issue 2, pp. 146–157. (in Russ.).
6. Lions J.L. *Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non linéaires*. Dunod, Gauthier-Villars, Paris, 1969, 554 p.

Received January 24, 2019

THE BARENBLATT–ZHELTOV–KOCHINA EQUATION WITH BOUNDARY NEUMANN CONDITION AND MULTIPOINT INITIAL-FINAL VALUE CONDITION

L.A. Kovaleva, E.A. Soldatova, S.A. Zagrebina

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: zargebinasa@susu.ru

The article is devoted to the study of the unique solvability of the Barenblatt–Zhel'tov–Kochina equation, equipped with the Neumann boundary condition and a multipoint initial-final value condition. This equation is degenerate or, in other words, it belongs to the Sobolev type equations. To study this equation, the authors used the methods of the theory of degenerate operator semigroups, created by Prof. G.A. Sviridyuk, and further developed by him and his students. We would also like to note that the equation under study is supplied with a multipoint initial-final value condition, which is not just a generalization of the Cauchy problem for the Sobolev type equations. This condition makes it possible to avoid checking the consistency of the initial data when finding a solution.

Keywords: Barenblatt–Zhel'tov–Kochina equation; Neumann condition; multipoint initial-final value condition; unique solvability.

Introduction

Let \mathfrak{A} and \mathfrak{F} be Banach spaces; operator $L \in \mathcal{L}(\mathfrak{A}; \mathfrak{F})$ (i.e. linear and continuous), and operator $M \in Cl(\mathfrak{A}; \mathfrak{F})$ (i.e. linear, closed and densely defined). Following [1], we introduce into consideration L -resolvent set $\rho^L(M) = \{\mu \in \mathbb{C} : (\mu L - M)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathfrak{F}; \mathfrak{A})\}$ and L -spectrum $\sigma^L(M) = \mathbb{C} \setminus \rho^L(M)$ of operator M . The following statements are true.

Theorem 1. [1] *Let operator M be (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$. Then there exist such projectors $P: \mathfrak{A} \rightarrow \mathfrak{A}$ and $Q: \mathfrak{F} \rightarrow \mathfrak{F}$, that operators $L \in \mathcal{L}(\ker P; \ker Q) \cap \mathcal{L}(\operatorname{im} P; \operatorname{im} Q)$ and $M \in Cl(\ker P; \ker Q) \cap Cl(\operatorname{im} P; \operatorname{im} Q)$.*

Introduce the following condition

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma^L(M) = \bigcup_{j=0}^n \sigma_j^L(M), n \in \mathbb{N}, \text{ what is more } \sigma_j^L(M) \neq \emptyset, \text{ there exists} \\ \text{a closed contour } \gamma_j \subset \mathbb{C}, \text{ bounding a domain } D_j \supset \sigma_j^L(M), \\ \text{such, that } \bar{D}_j \cap \sigma_0^L(M) = \emptyset, \bar{D}_k \cap \bar{D}_l = \emptyset \quad \forall j, k, l = 1, \dots, n, k \neq l. \end{array} \right. \quad (\text{A})$$

Theorem 2. [2] *Let operator M be (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$, and condition (A) is fulfilled. Then there exist projectors $P_j \in \mathcal{L}(\mathfrak{A})$ and $Q_j \in \mathcal{L}(\mathfrak{F})$, $j = 1, \dots, n$, having the form*

$$P_j = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} (\mu L - M)^{-1} L d\mu, \quad Q_j = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} L (\mu L - M)^{-1} d\mu, \quad j = 1, \dots, n.$$

Moreover, one more statement is true.

Corollary 1. *Let conditions of theorems 1 and 2 are satisfied. Then $P P_j = P_j P = P_j$, $j = 1, \dots, n$, $P_k P_l = P_l P_k = \mathbb{O}$, $k, l = 1, \dots, n$, $k \neq l$; $Q Q_j = Q_j Q = Q_j$, $j = 1, \dots, n$, $Q_k Q_l = Q_l Q_k = \mathbb{O}$, $k, l = 1, \dots, n$, $k \neq l$.*

Put

$$P_0 = P - \sum_{k=1}^n P_k, \quad Q_0 = Q - \sum_{k=1}^n Q_k,$$

due to corollary 1 operators $P_0 \in \mathcal{L}(\mathfrak{A})$, $Q_0 \in \mathcal{L}(\mathfrak{F})$ are projectors.

Thus, let condition (A) is fulfilled, fix $\tau_j \in \mathbb{R}$ ($\tau_j < \tau_{j+1}$), vectors $u_j \in \mathfrak{A}$ for $j=0, \dots, n$, and consider multipoint initial-final value condition [2] (see more [3])

$$P_j(u(\tau_j) - u_j) = 0, \quad j=0, \dots, n, \quad (1)$$

for linear Sobolev type equation

$$Lu = Mu + f, \quad (2)$$

where vector-function $f \in C^\infty(\mathbb{R}; \mathfrak{F})$ will be defined below.

A vector-function $u \in C^\infty(\mathbb{R}; \mathfrak{A})$, satisfying equation (2), is called a *solution of equation (2)*. Solution $u = u(t)$, $t \in \mathbb{R}$, of equation (2), satisfying conditions (1) is called *the solution of multipoint initial-final value problem (1), (2)*.

In this paper we present the results of the Sobolev type equations theory with (L, p) -bounded operator M [1] and the unique solvability of problem (1), (2) [2]. Then the abstract results will be applied to the study of the solvability of Barenblatt–Zhel'tov–Kochina equation

$$u_t - \chi \Delta u_t = \nu \Delta u + f, \quad (3)$$

defined in cylinder $\Omega \times \mathbb{R}^m$ with boundary conditions

$$\frac{\partial u}{\partial n} u(x, t) = 0(x), \quad (x, t) \in \partial \Omega \times \mathbb{R}, \quad (4)$$

and with multipoint initial-final value condition of the form (1). Here $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ is a bounded domain with the boundary of the class C^∞ , and $n = n(x)$, $x \in \partial \Omega$, is the unit normal external to domain Ω . Thus, the subject of the paper is divided into two parts. In the first part the information on the solvability of problem (1), (2) is given, and in the second part problem (1), (3), (4) is considered.

Note, that the Neumann conditions are a special case of the “flow balance” condition for Sobolev type equations considered on a connected oriented graph, that is in the one-dimensional case. This theory is currently being actively developed, the first studies were conducted in [4]. Sobolev type equations with Cauchy–Neumann conditions in a bounded domain were studied in [5], but studies for the case of replacing the Cauchy condition by a multipoint initial-final value condition for such a problem are considered here for the first time.

We also note, that equation (3) models the dynamics of the pressure of a fluid, filtered in a fractured-porous medium [6]. Here χ is a real parameter characterizing the medium, ν is the piezoconductivity coefficient of the fractured rock, with $\chi \in \mathbb{R}$, $\nu \in \mathbb{R}_+$; function $f = f(x)$ plays the role of an external load. In addition, equation (3) describes the flow of second-order liquids [7], the heat conduction process with “two temperatures” [8], the moisture transfer process in the soil [9].

1. Abstract problem

Let \mathfrak{A} and \mathfrak{F} be Banach spaces, operators $L \in \mathcal{L}(\mathfrak{A}; \mathfrak{F})$ (i.e. linear and continuous) and $M \in Cl(\mathfrak{A}; \mathfrak{F})$ (i.e. linear, closed and densely defined). Suppose, in addition, operator M is (L, σ) -bounded (for terminology and results see [1]), then there exist degenerate analytical groups of resolving operators

$$U^t = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma R_\mu^L(M) e^{\mu t} d\mu \quad u \quad F^t = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma L_\mu^L(M) e^{\mu t} d\mu,$$

defined on spaces \mathfrak{A} and \mathfrak{F} respectively, moreover $U^0 \equiv P$, $F^0 \equiv Q$ are projectors. Here γ is a contour, bounding a domain D , containing L -spectrum $\sigma^L(M)$ of operator M ; $R_\mu^L(M) = (\mu L - M)^{-1} L$ is a *right*, and $L_\mu^L(M) = L(\mu L - M)^{-1}$ is a *left L-resolvent* of operator M . For degenerate analytical group the concepts of *kernel* $\ker U^\cdot = \ker P = \ker U^t$, for all $t \in \mathbb{R}$ and *image* $\text{im} U^\cdot = \text{im} P = \text{im} U^t$ for all $t \in \mathbb{R}$ are correct. Denote by $\mathfrak{A}^0 = \ker U^\cdot$, $\mathfrak{A}^1 = \text{im} U^\cdot$, and $\mathfrak{A}^0 = \ker F^\cdot$, $\mathfrak{F}^1 = \text{im} F^\cdot$, then $\mathfrak{A}^0 \oplus \mathfrak{A}^1 = \mathfrak{A}$ and $\mathfrak{F}^0 \oplus \mathfrak{F}^1 = \mathfrak{F}$. Also denote by $L_k(M_k)$ the restriction of operator $L(M)$ on \mathfrak{F}^k ($\text{dom} M \cap \mathfrak{A}^k$), $k=0, 1$.

Theorem 3. [1] (Splitting theorem). *Let operator M be (L, p) -bounded. Then*

- (i) operators $L_k \in \mathcal{L}(\mathfrak{A}^k; \mathfrak{F}^k)$, $k = 0, 1$;
- (ii) operators $M_0 \in Cl(\mathfrak{A}^0; \mathfrak{F}^0)$, $M_1 \in \mathcal{L}(\mathfrak{A}^1; \mathfrak{F}^1)$;
- (iii) there exist operators $L_1^{-1} \in \mathcal{L}(\mathfrak{F}^1; \mathfrak{A}^1)$ and $M_0^{-1} \in \mathcal{L}(\mathfrak{F}^0; \mathfrak{A}^0)$.

Put $H = M_0^{-1}L_0 \in \mathcal{L}(\mathfrak{A}^0)$, $S = L_1^{-1}M_1 \in \mathcal{L}(\mathfrak{A}^1)$. It is true

Corollary 2. [1] *Let operator M be (L, σ) -bounded. Then for all $\mu \in \mathbb{C} \setminus \bar{D}$*

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

An operator M is called (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$, if $H^p \neq \mathbb{O}$, and $H^{p+1} = \mathbb{O}$. Let condition (A) is satisfied. Then takes place:

Theorem 4. [2] *Let operator M be (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$, and condition (A) is fulfilled. Then*

- (i) there exist degenerate analytical groups

$$U_j^t = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} R_{\mu}^L(M) e^{\mu t} d\mu, j = \overline{1, n}.$$

- (ii) $U^t U_j^s = U_j^s U^t = U_j^{s+t}$ for all $s, t \in \mathbb{R}$, $j = \overline{1, n}$;
- (iii) $U_k^t U_l^s = U_l^s U_k^t = \mathbb{O}$ for all $s, t \in \mathbb{R}$, $k, l = \overline{1, n}$, $k \neq l$.

Put $U_0^t = U^t - \sum_{k=1}^n U_k^t$, $t \in \mathbb{R}$.

Remark 1. Units $P_j \equiv U_j^0$, $j = \overline{0, n}$, (constructed by virtue of condition (A)) of degenerate analytical groups $\{U_j^t : t \in \mathbb{R}\}$, $j = \overline{0, n}$, are projectors by corollary (1). We call the operators P_j , Q_j , $j = \overline{0, n}$, relatively spectral projectors.

Consider subspaces $\mathfrak{A}^{1j} = \text{im } P_j$, $\mathfrak{F}^{1j} = \text{im } Q_j$, $j = \overline{0, n}$. By construction

$$\mathfrak{A}^1 = \bigoplus_{j=0}^n \mathfrak{A}^{1j} \quad \text{and} \quad \mathfrak{F}^1 = \bigoplus_{j=0}^n \mathfrak{F}^{1j}.$$

Denote by L_{1j} the restriction of operator L on \mathfrak{A}^{1j} , $j = \overline{0, n}$, and by M_{1j} denote the restriction of operator M on $\text{dom } M \cap \mathfrak{A}^{1j}$, $j = \overline{0, n}$. Since, as it easy to show, that $P_j \varphi \in \text{dom } M$, if $\varphi \in \text{dom } M$, then the domain $\text{dom } M_{1j} = \text{dom } M \cap \mathfrak{A}^{1j}$ is dense in \mathfrak{A}^{1j} , $j = \overline{0, n}$.

Theorem 5. [2] (Generalized spectral theorem). *Let operators $L \in \mathcal{L}(\mathfrak{A}; \mathfrak{F})$ and $M \in Cl(\mathfrak{A}; \mathfrak{F})$, operator M is (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$, and condition (A) is fulfilled. Then*

- (i) operators $L_{1j} \in \mathcal{L}(\mathfrak{A}^{1j}; \mathfrak{F}^{1j})$, $M_{1j} \in \mathcal{L}(\mathfrak{A}^{1j}; \mathfrak{F}^{1j})$, $j = \overline{0, n}$;
- (ii) there exist operators $L_{1j}^{-1} \in \mathcal{L}(\mathfrak{F}^{1j}; \mathfrak{A}^{1j})$, $j = \overline{0, n}$.

Theorem 6. [2] *Let operator M is (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$, moreover condition (A) is fulfilled. Then for all $f \in C^{\infty}(\mathbb{R}; \mathfrak{F})$, $u_j \in \mathfrak{A}$, $j = \overline{0, n}$, there exists the unique solution of problem (1), (2), having the form*

$$u(t) = -\sum_{q=0}^p H^q M_0^{-1} (\mathbb{I} - Q) f^{(q)}(t) + \sum_{j=0}^n U_j^{t-\tau_j} u_j + \sum_{j=0}^n \int_{\tau_j}^t U_j^{t-s} L_{1j}^{-1} Q_j f(s) ds. \quad (5)$$

2. Concrete interpretation

Reduce problem (3), (4) to equation (2). For this we set

$$\mathfrak{A} = \left(u \in W_2^{m+2} : \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ on } \partial\Omega \right), \mathfrak{F} = W^m, m \in \mathbb{N}.$$

All functional spaces are defined on the domain Ω . Let us set the operators $L = \mathbb{I} - \chi\Delta$, $M = \nu\Delta$, moreover $L, M \in \mathcal{L}(\mathfrak{A}; \mathfrak{F})$ for all $\chi \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, $\nu \in \mathbb{R}$, and operator L is Fredholm (i.e. $\text{ind } L = 0$).

Denote by $\{\lambda_k\}$ the set of eigenvalues of homogeneous Neumann problem for the Laplace operator Δ in the domain Ω , numbered in the order of non-increasing with allowance for their multiplicity, and by the $\{\varphi_k\}$ denote the set of orthonormalized (in the sense of the space L_2) corresponding eigenvectors. Note, that the first eigenvalue of the homogeneous Neumann problem for the Laplace operator in domain Ω is zero, and the corresponding eigenfunction is constant.

Lemma 1. [5] For all $\chi, \nu \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ operator M is $(L, 0)$ -bounded.

Note, that

$$\ker L = \begin{cases} \{0\}, & \text{if } \chi^{-1} \notin \{\lambda_k\}, \\ \text{span}\{\varphi_l : \chi^{-1} = \lambda_l\}. & \end{cases}$$

By theorem 1 we construct a projector

$$P = \begin{cases} \mathbb{I}, & \text{if } \chi^{-1} \notin \{\lambda_l\}, \\ \mathbb{I} - \sum_{l: \chi^{-1} = \lambda_l} \langle \cdot, \varphi_l \rangle \varphi_l, & \text{if } \chi^{-1} \in \{\lambda_l\}, \end{cases}$$

where $\langle \cdot, \cdot \rangle$ is the scalar product in L^2 . Projector Q has the same form, but it is defined on the space \mathfrak{F} . The relative spectrum $\sigma^L(M)$ of operator M has the form

$$\sigma^L(M) = \left(\mu_k = \frac{\nu\lambda_k}{1 - \chi\lambda_k}, k \in \mathbb{N} \right).$$

Choose such the parts $\sigma_j^L(M)$, $j = \overline{0, n}$, of the relative spectrum of operator M , that condition (A) is satisfied (it is clear that this can done in more then one way). Build the projectors

$$P_j = \sum_{k: \mu_k \in \sigma_j^L(M)} \langle \cdot, \varphi_k \rangle \varphi_k, j = \overline{0, n}.$$

Take $\tau_j \in \mathbb{R}$ ($\tau_j < \tau_{j+1}$), $u_j \in \mathfrak{A}$, $j = \overline{0, n}$, $f \in C^\infty(\mathbb{R}; \mathfrak{F})$ and for problem (3), (4) the multipoint initial-final value condition is given

$$\sum_{k: \mu_k \in \sigma_j^L(M)} \langle u(\tau_j, x) - u^j(x), \varphi_k \rangle \varphi_k = 0, j = \overline{0, n}. \quad (6)$$

By lemma 1 and theorem 6 it follows

Theorem 7. Let condition (A) is fulfilled. For all $\chi \in \mathbb{R}$, $\nu \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, $f \in C^\infty(\mathbb{R}; \mathfrak{F})$, $u_j \in \mathfrak{A}$, $j = \overline{0, n}$, equation (3) with conditions (4), (6) has the unique solution $u \in C^\infty(\mathbb{R}; \mathfrak{A})$, which has the form

$$u(t) = (Q - \mathbb{I})f(t) + \sum_{j=0}^n \sum_{\mu_k \in \sigma_j^L(M)} e^{\mu_k(t-\tau_j)} \langle u_j, \varphi_k \rangle \varphi_k + \sum_{j=0}^n \sum_{\mu_k \in \sigma_j^L(M)} \tau_j \int_0^t e^{\mu_k(t-s)} \langle f(s), \varphi_k \rangle \varphi_k ds.$$

In conclusion, the authors consider it their pleasant duty to express their sincere gratitude to Professor G.A. Sviridyuk for interest in the work and productive discussions.

References

1. Sviridyuk G.A. On the general theory of operator semigroups. *Russian Mathematical Surveys*, 1994, Vol. 49, no. 4, pp. 45–74. DOI: 10.1070/RM1994v049n04ABEH002390

2. Zagrebina S.A. The Multipoint Initial-finish Problem for Hoff Linear Model. *Bulletin of the South Ural State University. Series Mathematical Modelling, Programming & Computer Software*, 2012, Vol. 5 (264), Issue 11, pp. 4–12. (in Russ.).

3. Zagrebina S.A. The initial-finite problems for nonclassical models of mathematical physics. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2013, Vol. 6, no. 2, pp. 5–24. (in Russ.).

4. Sviridyuk G.A., Shemetova V.V. The phase space of a nonclassical model. *Russian Mathematics (Izvestiya VUZ. Matematika)*, 2005, Vol. 49, Issue 11, pp. 44–49.

5. Kazak, V.O. *Issledovanie fazovykh prostranstv odnogo klassa polulineynykh uravneniy sobolevskogo tipa: dis. ... kand. fiz.-mat. nauk* (Investigation of phase spaces of a class of semilinear Sobolev type equations: Cand. phys. and math. sci. diss.). Chelyabinsk, 2005, 99 p. (in Russ.).

6. Barenblatt G.I., Zheltov Iu.P., Kochina I.N. Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks [strata]. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 1960, Vol. 24, Issue 5, pp. 1286–1303. DOI: 10.1016/0021-8928(60)90107-6

7. Ting T.W. Certain non-steady flows of second-order fluids. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 1963, Vol. 14, no. 1, pp. 1–26. DOI: 10.1007/BF00250690

8. Chen P.J., Gurtin M.E. On a theory of heat conduction involving two temperatures. *Journal of Applied Mathematics and Physics (ZAMP)*, 1968, Vol. 19, Issue 4, pp. 614–627. DOI: 10.1007/BF01594969

9. Hallaire M. On a theory of moisture-transfer. *Inst. Rech. Agronom*, 1964, no. 3, pp. 60–72.

Received April 1, 2019

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2019, vol. 11, no. 2, pp. 14–19*

УДК 517.9

DOI: 10.14529/mmph190202

УРАВНЕНИЕ БАРЕНБЛАТТА–ЖЕЛТОВА–КОЧИНОЙ С ГРАНИЧНЫМ УСЛОВИЕМ НЕЙМАНА И МНОГОТОЧЕЧНЫМ НАЧАЛЬНО-КОНЕЧНЫМ УСЛОВИЕМ

Л.А. Ковалева, Е.А. Солдатова, С.А. Загребина

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

Посвящена изучению однозначной разрешимости уравнения Баренблатта–Желтова–Кочиной, снабженного краевым условием Неймана и многоточечным начально-конечным условием. Отметим, что уравнение Баренблатта–Желтова–Кочиной моделирует динамику давления жидкости, фильтрующейся в трещиновато-пористой среде. Кроме того, оно описывает течение жидкостей второго порядка, процесс теплопроводности с «двумя температурами», процесс влагопереноса в почве. Данное уравнение является вырожденным или, другими словами, оно принадлежит к уравнениям соболевского типа. Для исследования изучаемого уравнения авторы воспользовались методами теории вырожденных полугрупп операторов, разработанной проф. Г.А. Свиридюком, и развитой его учениками. Отметим также, что исследуемое уравнение снабжено многоточечным начально-конечным условием, которое является не просто обобщением задачи Коши для уравнений соболевского типа. Указанное условие дает возможность избежать проверки согласования начальных данных при нахождении решения.

Ключевые слова: уравнение Баренблатта–Желтова–Кочиной; условие Неймана; многоточечное начально-конечное условие; однозначная разрешимость.

Литература

1. Свиридюк, Г.А. К общей теории полугрупп операторов / Г.А. Свиридюк // *Успехи математических наук.* – 1994. – Т. 49, № 4. – С. 47–74.

2. Загребина, С.А. Многоточечная начально-конечная задача для линейной модели Хоффа / С.А. Загребина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 5 (264). – Вып. 11. – С. 4–12.

3. Загребина, С.А. Начально-конечные задачи для неклассических моделей математической физики / С.А. Загребина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6, № 2. – С. 5–24.

4. Свиридюк, Г.А. Фазовое пространство одной неклассической модели / Г.А. Свиридюк, В.В. Шеметова // Изв. вузов. Математика. – 2005. – Т. 11. – С. 47–52.

5. Казак, В.О. Исследование фазовых пространств одного класса полулинейных уравнений соболевского типа: дис. ... канд. физ.-мат. наук / В.О. Казак. – Челябинск, 2005. – 99 с.

6. Баренблатт, Г.И. Об основных представлениях теории фильтрации в трещиноватых средах / Г.И. Баренблатт, Ю.П. Желтов, И.Н. Кочина // Прикладная математика и механика. – 1960. – Т. 24, № 5. – С. 852–864.

7. Ting, T.W. Certain non-steady flows of second-order fluids / T.W. Ting // Archive for Rational Mechanics and Analysis. – 1963. – Vol. 14. – Issue 1. – P. 1–26.

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

9. Hallaire, M. On a theory of moisture-transfer / M. Hallaire // Inst. Rech. Agronom. – 1964. – № 3. – P. 60–72.

Поступила в редакцию 1 апреля 2019 г.

О ГРУБОСТИ И БИФУРКАЦИЯХ ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ НА ОКРУЖНОСТИ

В.Ш. Ройтенберг

Ярославский государственный технический университет, г. Ярославль, Российская Федерация
E-mail: vroitenberg@mail.ru

Динамическая система, заданная дифференциальным уравнением на многообразии – фазовом пространстве системы, называется грубой, если топологическая структура фазового портрета не меняется при переходе к близкому уравнению. Понятие грубости возникло из представления, что существенные свойства динамической системы, описывающей реальный процесс, не должны меняться при малых изменениях параметров системы. К настоящему времени получены естественные необходимые и достаточные условия грубости динамических систем на замкнутых многообразиях любой размерности. Однако если грубость рассматривать в более узких классах динамических систем, в частности, в пространстве систем, заданных дифференциальными уравнениями с полиномиальными правыми частями, то условия грубости не исследованы даже для малых размерностей фазового пространства. В настоящей работе рассматриваются динамические системы, заданные дифференциальными уравнениями, правые части которых являются тригонометрическими полиномами степени, не превосходящей натурального числа n . Фазовым пространством таких систем является окружность. Описаны уравнения, грубые относительно пространства $E(n)$ всех таких уравнений. Уравнение является грубым тогда и только тогда, когда его правая часть имеет только простые нули, то есть все особые точки которого – гиперболические. Множество всех грубых уравнений открыто и всюду плотно в пространстве $E(n)$. В множестве всех негрубых уравнений выделено открытое и всюду плотное подмножество, состоящее из уравнений первой степени негрубости. Оно является аналитическим подмногообразием коразмерности один в $E(n)$ и состоит из уравнений, для которых все нули правой части простые, за исключением одного двукратного нуля.

Ключевые слова: дифференциальное уравнение на окружности; тригонометрический полином; грубость; бифуркационное многообразие.

Введение

Понятие грубой динамической системы, задаваемой векторным полем, топологическая структура которой не меняется при малых возмущениях поля, было введено А.А. Андроновым и Л.С. Понтрягиным в 1937 году и в дальнейшем стало предметом многочисленных исследований. Грубые системы важны и как математический объект, и с точки зрения приложений. К настоящему времени получены естественные необходимые и достаточные условия грубости в пространстве векторных полей с C^1 -топологией на любом замкнутом многообразии [1–2], а также показано, что на многообразиях размерности ≥ 3 грубые системы не типичны [3].

В отличие от общей ситуации, описание векторных полей (дифференциальных уравнений) на окружности, грубых относительно пространства всех векторных полей класса C^r ($r \in \mathbf{N} \cup \{\infty, \omega\}$), и их бифуркаций – весьма простая задача [4]. Однако в «меньшем» пространстве дифференциальных уравнений с правыми частями, являющимися тригонометрическими полиномами степени $\leq n$, эта задача уже нетривиальна. Она будет рассмотрена в настоящей работе.

Формулировка результатов

На окружности $S^1 = \mathbf{R}/2\pi\mathbf{Z}$ рассмотрим дифференциальное уравнение

$$\dot{\varphi} = a(\varphi), \quad (1)$$

где

$$a(\varphi) = \sum_{0 \leq i+j \leq n} a_{ij} \cos^i \varphi \sin^j \varphi \quad (2)$$

– тригонометрический полином степени $\leq n$ ($n \in \mathbf{N}$). Уравнение (1) отождествим с его правой частью – функцией a , а также с упорядоченным набором чисел $a_{i,j}$, выписанных в лексикографическом порядке пар номеров (i, j) , $0 \leq i + j \leq n$, а множество $E(n)$ таких уравнений с пространством $\mathbf{R}^{(n+1)(n+2)/2}$.

Уравнение $a \in E(n)$ называется *грубым относительно множества* $\Lambda \subset E(n)$, если $a \in \Lambda$ и существует такая его окрестность $U(a)$ в Λ , что для любого уравнения $\tilde{a} \in U(a)$ существует гомеоморфизм $h_{a,\tilde{a}} : \mathbf{S}^1 \rightarrow \mathbf{S}^1$, переводящий траектории уравнения \tilde{a} в траектории уравнения a . Уравнение $a \in E(n)$, грубое относительно $E(n)$, будем называть просто *грубым уравнением*.

Пусть $\Sigma^0 = \Sigma^0 E(n)$ – множество уравнений $a \in E(n)$, для которых функция $a(\varphi)$ либо не имеет нулей, либо имеет только простые нули. Обозначим Σ_m^0 ($m = 0, 1, \dots, n$) подмножество в $\Sigma^0 E(n)$, состоящее из уравнений, у правых частей которых $2m$ нулей, то есть имеющих $2m$ гиперболических особых точек.

Теорема 1. 1) Множество $\Sigma^0 E(n)$ открыто и всюду плотно в $E(n)$.

2) Уравнение $a \in E(n)$ является грубым тогда и только тогда, когда принадлежит $\Sigma^0 E(n)$; при этом для любого $a \in \Sigma^0 E(n)$ гомеоморфизмы $h_{a,\tilde{a}}$, фигурирующие в определении грубости, можно выбрать так, что

$$\lim_{\tilde{a} \rightarrow a} \max_{\varphi \in [0, 2\pi]} |\bar{h}_{a,\tilde{a}}(\varphi) - \varphi| = 0, \quad (3)$$

где $\bar{h}_{a,\tilde{a}} : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ – гомеоморфизм, накрывающий гомеоморфизм $h_{a,\tilde{a}}$.

3) Множества Σ_m^0 ($m = 0, 1, \dots, n$) непустые; они совпадают с классами топологической эквивалентности уравнений из $\Sigma^0 E(n) = \Sigma_0^0 \cup \Sigma_1^0 \cup \dots \cup \Sigma_n^0$.

Пусть $\Sigma^1 = \Sigma^1 E(n)$ – множество уравнений $a \in E(n)$, для которых все нули функции $a(\varphi)$ – простые, за исключением одного двукратного нуля.

Теорема 2. 1) Множество $\Sigma^1 E(n)$ открыто и всюду плотно в $E(n) \setminus \Sigma^0 E(n)$ и является вложенным аналитическим подмногообразием $E(n)$ коразмерности один.

2) Уравнение $a \in E(n)$ является грубым относительно $E(n) \setminus \Sigma^0 E(n)$ тогда и только тогда, когда принадлежит $\Sigma^1 E(n)$; при этом для любого $a \in \Sigma^1 E(n)$ гомеоморфизмы $h_{a,\tilde{a}}$, фигурирующие в определении грубости, можно выбрать удовлетворяющими условию (3).

Доказательство теоремы 1

Открытость $\Sigma^0 E(n)$, грубость уравнения $a \in \Sigma^0 E(n)$ и тот факт, что гомеоморфизм $h_{a,\tilde{a}}$ можно выбрать удовлетворяющим условию (3), очевидны.

Докажем плотность $\Sigma^0 E(n)$ в $E(n)$. Пусть уравнение $a \in E(n)$. Покажем, что в любой его окрестности $U(a)$ есть уравнение из $\Sigma^0 E(n)$. Без ограничения общности можно считать, что $a(\varphi)$ – ненулевая функция. Так как $a(\varphi)$ – аналитическая функция, то она имеет конечное число нулей конечной кратности. Поэтому при достаточно малом $\mu > 0$ уравнение $\tilde{\varphi} = a(\varphi) + \mu$ принадлежит $U(a) \cap \Sigma^0 E(n)$.

Докажем, что из грубости уравнения $a \in E(n)$ следует, что $a \in \Sigma^0 E(n)$. Предположим противное: $a \in E(n) \setminus \Sigma^0 E(n)$. Пусть $U(a)$ – окрестность, фигурирующая в определении грубости. Поскольку в $U(a)$ есть уравнение из $\Sigma^0 E(n)$, то $a(\varphi)$ имеет конечное число нулей, все они имеют нечетную кратность, причем хотя бы один из них, для определенности φ_0 , имеет кратность $2m + 1 \geq 3$. Тогда $a(\varphi) = l(\varphi - \varphi_0)^{2m+1} + o((\varphi - \varphi_0)^{2m+1})$, где $l \neq 0$. Уравнение $a_\mu :$

$\dot{\varphi} = a(\varphi) - \mu(\operatorname{sgn} l) \sin(\varphi - \varphi_0)$ при достаточно малом $\mu > 0$ принадлежит $U(a)$ и имеет больше особых точек, чем a . Поскольку гомеоморфизм h_{a, a_μ} переводит особые точки уравнения a_μ в особые точки уравнения a , то получаем противоречие. Тем самым $a \in \Sigma^0 E(n)$.

Уравнение $\dot{\varphi} = 1$ принадлежит Σ^0 . Для любого $m = 1, \dots, n$ уравнение $\dot{\varphi} = a_m^0(\varphi)$, где $a_m^0(\varphi) = \prod_{j=0}^{m-1} \sin(\varphi - \varphi_j^0)$, $\varphi_j^0 = \frac{\pi j}{n}$, принадлежит Σ_m^0 .

Пусть уравнение $a \in \Sigma^0 E(n)$ представлено в виде (1)–(2) и $a(\pi) \neq 0$. Запишем $a(\varphi)$ при $\varphi \in (-\pi, \pi)$ в виде $a(\varphi) = \hat{a}(\operatorname{tg}(\varphi/2))$, где

$$\hat{a}(t) = \sum_{0 \leq i+j \leq n} a_{i,j} \frac{(1-t^2)^i (2t)^j}{(1+t^2)^{i+j}} = \frac{1}{(1+t^2)^n} \sum_{k=0}^{2n} c_k t^k.$$

Функция $\hat{a}(t)$ имеет не более $2n$ нулей. Соответственно, и $a(\varphi)$ имеет не более $2n$ нулей, то есть $a \in \Sigma_m^0$ при некотором $m = 0, 1, \dots, n$. Если $a \in \Sigma^0 E(n)$ и $a(\pi) = 0$, то функция $a_*(\varphi) = a(\varphi + \varepsilon)$ имеет столько же нулей, что и $a(\varphi)$, а при достаточно малом $\varepsilon > 0$ $a_*(\pi) \neq 0$. Таким образом, каждое уравнение $a \in \Sigma^0 E(n)$ принадлежит одному из множеств Σ_m^0 , $m = 0, 1, \dots, n$. Очевидно, что Σ_m^0 – классы топологической эквивалентности.

Теорема 1 доказана.

Доказательство теоремы 2

Открытость $\Sigma^1 E(n)$ в $E(n) \setminus \Sigma^0 E(n)$ очевидна.

Докажем плотность. Пусть уравнение $a \in E(n) \setminus \Sigma^0 E(n) \setminus \Sigma^1 E(n)$. Покажем, что в любой его окрестности $U(a)$ есть уравнение из $\Sigma^1 E(n)$. Если функция $a(\varphi)$ ненулевая, то она имеет нуль φ_0 кратности $k \geq 2$. Если $a(\varphi) \equiv 0$, то возьмем $\varphi_0 = 0$. Рассмотрим уравнение $a_\mu: \dot{\varphi} = a_\mu(\varphi)$, где $a_\mu(\varphi) = a(\varphi) - \mu b(\varphi)$, $b(\varphi) = 1 - \cos(\varphi - \varphi_0)$. Тогда найдется такое $\delta > 0$, что при всех $\mu \in (0, \delta)$ $a_\mu \in U(a)$, а φ_0 – двукратный нуль функции $a_\mu(\varphi)$. Фиксируем $\mu_0 \in (0, \delta)$ и выберем такое $0 < \varepsilon < \min\{\delta - \mu_0, \pi\}$, что на дуге $[\varphi_0 - \varepsilon, \varphi_0 + \varepsilon]$ нет других нулей функции $a_\mu(\varphi)$, $\mu \in [\mu_0, \mu_0 + \varepsilon]$. Функция $f(\varphi) = a(\varphi)/b(\varphi)$ определена в точках дуги $I = [\varphi_0 + \varepsilon, \varphi_0 - \varepsilon + 2\pi]$. Если $a(\varphi) \equiv 0$, то $a_{\mu_0} \in \Sigma^1 E(n) \cap U(a)$. Если $a(\varphi)$ – ненулевая функция, то производная $f'(\varphi) = [a'(\varphi)b(\varphi) - a(\varphi)b'(\varphi)]/b^2(\varphi)$ – непостоянная аналитическая функция на I . Поэтому $f(\varphi)$ имеет конечное число критических точек, а потому и конечное число критических значений. Следовательно, существует число $\mu_1 \in (\mu_0, \mu_0 + \varepsilon)$, не являющееся критическим значением. Если $a_{\mu_1}(\varphi) = 0$, то $f(\varphi) = a(\varphi)/b(\varphi) = \mu_1$, а $f'(\varphi) = [a'(\varphi) - \mu_1 b'(\varphi)]/b(\varphi) \neq 0$, и потому $(a_{\mu_1})'(\varphi) \neq 0$. Тем самым все нули функции $a_{\mu_1}(\varphi)$ на I простые, и уравнение $a_{\mu_1} \in \Sigma^1 E(n) \cap U(a)$.

Докажем, что $\Sigma^1 E(n)$ – аналитическое подмногообразие в $E(n)$, следуя методу из [5]. Пусть $a_0 \in \Sigma^1 E(n)$ и φ_0 – двукратный нуль $a_0(\varphi)$. Функция $\hat{a}: S^1 \times E(n) \rightarrow \mathbf{R}$, определенная равенством $\hat{a}(\varphi, a) := a(\varphi)$, является аналитической. Так как $\hat{a}'_\varphi(\varphi_0, a_0) = 0$, $\hat{a}''_{\varphi\varphi}(\varphi_0, a_0) \neq 0$, то по теореме о неявной функции существуют число $\varepsilon > 0$, окрестность $V(a_0)$ уравнения a_0 в $E(n)$ и аналитическая функция $\hat{\varphi}: V(a_0) \rightarrow (\varphi_0 - \varepsilon, \varphi_0 + \varepsilon)$, такие, что для любых $\varphi \in (\varphi_0 - \varepsilon, \varphi_0 + \varepsilon)$, $a \in V(a_0)$:

$$a''(\varphi) \neq 0 \text{ и } a'(\varphi) = \hat{a}'_\varphi(\varphi, a) = 0 \Leftrightarrow \varphi = \hat{\varphi}(a). \quad (4)$$

Определим аналитическую функцию $g: V(a_0) \rightarrow \mathbf{R}$, положив $g(a) := \hat{a}(\hat{\varphi}(a), a) = a(\hat{\varphi}(a))$. Пусть $h: \dot{\varphi} = 1$. Тогда $a_0 + \tau h: \dot{\varphi} = a_0(\varphi) + \tau$,

$$g'(a_0)h = \left. \frac{d}{d\tau} \right|_{\tau=0} g(a_0 + \tau h) = \left. \frac{d}{d\tau} \right|_{\tau=0} [a_0(\hat{\varphi}(a_0 + \tau h)) + \tau] = a'(\varphi_0) \left. \frac{d}{d\tau} \right|_{\tau=0} \hat{\varphi}(a_0 + \tau h) + 1 = 1 \neq 0.$$

Таким образом, $g'(a_0) \neq 0$. Уменьшив при необходимости окрестность $V(a_0)$, мы можем считать, что $\forall a \in V(a_0) \quad g'(a) \neq 0$ и все нули функции $a(\varphi)$, не принадлежащие интервалу $(\varphi_0 - \varepsilon, \varphi_0 + \varepsilon)$, простые. Отсюда и из (4) получаем, что $\Sigma^1 E(n) \cap V(a_0) = g^{-1}(0)$, и потому $\Sigma^1 E(n)$ – вложенное аналитическое подмногообразие коразмерности один.

Ясно, что при переходе векторного поля через бифуркационное многообразие $\Sigma^1 E(n)$ происходит седло-узловая бифуркация – две гиперболические особые точки сливаются в одну и исчезают.

Грубость уравнения $a \in \Sigma^1 E(n)$ относительно $E(n) \setminus \Sigma^0 E(n)$ и тот факт, что гомеоморфизм $h_{a, \bar{a}}$ можно выбрать удовлетворяющим условию (3), очевидны.

Покажем, что из грубости уравнения a относительно $E(n) \setminus \Sigma^0 E(n)$ следует его принадлежность к $\Sigma^1 E(n)$. Пусть $U(a)$ – окрестность, фигурирующая в определении грубости. Поскольку в $U(a)$ есть уравнение из $\Sigma^1 E(n)$, то $a(\varphi)$ имеет конечное число нулей, один из них, для определенности φ_0 , имеет четную кратность: $a(\varphi) = l(\varphi - \varphi_0)^{2m} + o((\varphi - \varphi_0)^{2m})$, где $l \neq 0$, а остальные имеют нечетную кратность. При $n=1$ отсюда следует, что $a \in \Sigma^1 E(n)$. Пусть $n \geq 2$ и $a \in E(n) \setminus \Sigma^0 E(n) \setminus \Sigma^1 E(n)$. Возможны только следующие случаи: а) $m \geq 2$ или б) $m=1$ и $a(\varphi)$ имеет нуль φ_1 нечетной кратности $2k+1 \geq 3$. Рассмотрим уравнение $a_\mu: \dot{\varphi} = a_\mu(\varphi)$, где в случае а):

$$a_\mu(\varphi) = a(\varphi) - \mu(\operatorname{sgn} l)(1 - \cos(\varphi - \varphi_0)),$$

а в случае б):

$$a_\mu(\varphi) = a(\varphi) - \mu(\operatorname{sgn} l_1)(1 - \cos(\varphi - \varphi_0))(1 - \cos(\varphi - \varphi_1)), \quad l_1 = \partial^{2k+1} a(\varphi_1) / \partial \varphi^{2k+1}.$$

При достаточно малом $\mu > 0$ φ_0 – двукратный нуль функции $a_\mu(\varphi)$, $a_\mu \in U(a)$ и $a_\mu(\varphi)$ имеет больше нулей чем $a(\varphi)$. Но это противоречит существованию гомеоморфизма h_{a, a_μ} . Из полученного противоречия следует, что уравнение a , грубое относительно $E(n) \setminus \Sigma^0 E(n)$, принадлежит $\Sigma^1 E(n)$.

Теорема 2 доказана.

Заключение

В работе описано множество $\Sigma^0 E(n)$ дифференциальных уравнений на окружности $S^1 = \mathbf{R}/2\pi\mathbf{Z}$, с правыми частями, являющимися тригонометрическими многочленами степени, не превосходящей заданного числа n , грубые относительно пространства $E(n)$ всех таких систем. Показано, что грубые уравнения типичны в $E(n)$. Установлено, что в бифуркационном множестве $E(n) \setminus \Sigma^0 E(n)$ всюду плотно аналитическое бифуркационное подмногообразие коразмерности один.

Литература

1. Hayashi, S. Connecting Invariant Manifolds and the Solution of C^1 Stability and Ω -Stability Conjectures for Flows / S. Hayashi // Annals of Mathematics. Second Series. – 1997. – Vol. 145, no. 1. – P. 81–137.
2. Robinson, C. Structural stability of vector fields / C. Robinson // Annals of Mathematics. Second Series. – 1974. – Vol. 99, no. 1. – P. 154–175.
3. Abraham, R. Non-genericity of Ω -stability / R. Abraham, S. Smale // Global Analysis, Proc. of Symposia in Pure Mathematics. 14. – Publ. Am. Math. Soc, 1970. – P. 5–8.

4. Палис, Ж. Геометрическая теория динамических систем. Введение / Ж. Палис, В. Мелу. – М.: Мир, 1986. – 301 с.

5. Sotomayor, J. Generic one-parameter families of vector fields on two-dimensional manifolds / J. Sotomayor // Publications Mathématiques de l'Institut des Hautes Études Scientifiques. – 1974. – Vol. 43. – Issue 1. – P. 5–46.

Поступила в редакцию 14 марта 2019 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2019, vol. 11, no. 2, pp. 20–24*

DOI: 10.14529/mmph190203

ON STRUCTURAL STABILITY AND BIFURCATIONS OF POLYNOMIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS ON THE CIRCLE

V.Sh. Roitenberg

Yaroslavl State Technical University, Yaroslavl, Russian Federation

E-mail: vroitenberg@mail.ru

A dynamical system defined by a differential equation on a manifold, the phase space of a system, is called structurally stable if the topological structure of the phase portrait does not change when passing to a close equation. The concept of structural stability emerged from the idea that the essential properties of a dynamical system describing a real process should not change with small changes in the parameters of the system. By now, natural necessary and sufficient conditions for structural stability of dynamical systems on closed manifolds of any dimension have been obtained. However, if we consider structural stability in narrower classes of dynamical systems, in particular, in the space of systems defined by differential equations with polynomial right-hand sides, the conditions of structural stability have not been studied even for small dimensions of the phase space. This paper considers the dynamic systems given by the differential equations, the right-hand parts of which are trigonometric polynomials of the degree not exceeding the number n . The phase space of such systems is a circle. We describe equations that are structurally stable with respect to the space $E(n)$ of all such equations. An equation is structurally stable if and only if its right-hand side has only simple zeros, that is, all singular points of which are hyperbolic. The set of all structurally stable equations is open and is dense everywhere in the space $E(n)$. In the set of all non-structurally-stable equations, an open, everywhere-dense subset consisting of equations that are first order structurally unstable is distinguished. It is an analytic submanifold of codimension one in $E(n)$ and consists of equations for which all the zeros of the right-hand side are simple, except for one double zero.

Keywords: differential equation on the circle; trigonometric polynomial; structural stability; bifurcation manifold.

References

1. Hayashi S. Connecting Invariant Manifolds and the Solution of C^1 Stability and Ω -Stability Conjectures for Flows. *Annals of Mathematics. Second Series*, 1997, Vol. 145, no. 1, pp. 81–137. DOI: 10.2307/2951824

2. Robinson C. Structural stability of vector fields. *Annals of Mathematics. Second Series*, 1974, Vol. 99, no. 1, pp. 154–175. DOI: 10.2307/1971016

3. Abraham R., Smale S. Non-genericity of Ω -stability. *Global Analysis, Proc. of Symposia in Pure Mathematics*, 14, Publ. Am. Math. Soc., 1970, pp. 5–8.

4. Palis Zh., Melu V. *Geometricheskaya teoriya dinamicheskikh sistem. Vvedenie* (Geometric Theory of Dynamical Systems. An Introduction). Moscow: Mir Publ., 1986, 301 p. (in Russ.). [Palis J., Melo W. *Geometric Theory of Dynamical Systems. An Introduction*. Springer, 1982, 198 p. DOI: 10.1007/978-1-4612-5703-5]

5. Sotomayor J. Generic one-parameter families of vector fields on two-dimensional manifolds. *Publications Mathématiques de l'Institut des Hautes Études Scientifiques*, 1974, Vol. 43, Issue 1, pp. 5–46. DOI: 10.1007/BF02684365

Received March 14, 2019

АСИМПТОТИЧЕСКИ ОПТИМАЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ЭКРАНИРОВАННОГО УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА

А.Л. Ушаков

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

E-mail: ushakoval@susu.ru

Экранированное уравнение рассматривается на прямоугольной области со смешанными краевыми условиями. При численном решении этой задачи предлагается использовать итерационную факторизацию после фиктивного продолжения дискретной задачи аппроксимирующей решаемую задачу. В итоге решение основывается на решении систем линейных алгебраических уравнений с матрицами треугольного вида, в которых ненулевых элементов не более трех в каждой строке. При достаточно малой погрешности аппроксимации рассматриваемой задачи требуемая относительная погрешность предлагаемого итерационного процесса достигается за количество итераций, независимое от параметров дискретизации. Итерационный процесс оказывается методом, дающим оптимальную асимптотику по количеству операций в арифметических действиях. Разработанный итерационный процесс основывается на характерных особенностях указанной модельной задачи. Эта задача может быть получена в методах фиктивных компонент, пространств, когда решают краевые задачи для эллиптических уравнений в областях сложной формы. Приводится алгоритм реализации итерационного метода с выбором итерационных параметров в автоматическом режиме, с применением метода минимальных невязок, поправок. Это дает критерий для остановки итерационного процесса при получении указанной предварительно относительной погрешности. Приведен простейший тестовый пример для вычислительных экспериментов, подтверждающих асимптотическую оптимальность для итерационного метода в количестве вычислительных затрат. Реализация метода существенно основывается на использовании комплексного анализа.

Ключевые слова: экранированное уравнение Пуассона; итерационные факторизации; фиктивное продолжение.

Введение

Рассматривается экранированное уравнение Пуассона, в частности, уравнение Пуассона в области прямоугольной формы с однородным условием Дирихле на двух смежных сторонах прямоугольника и однородным условием Неймана на двух других смежных сторонах этого прямоугольника. Для дискретного аналога этой решаемой модельной задачи, системы алгебраических и линейных уравнений указывается переобуславливатель с факторизацией попеременно треугольного типа. При вычислениях на ЭВМ в предлагаемом итерационном процессе выбор итерационных параметров производится с помощью методов минимальных невязок, поправок и скорейшего спуска [1]. Решаемая краевая задача получается, когда на ЭВМ моделируются перемещения мембран на упругих основаниях не обязательно прямоугольной формы. Предлагаемый метод имеет аналогии с методами типа фиктивных компонент, пространств, но использует комплексный анализ.

Непрерывная задача

Рассматривается смешанная краевая задача для экранированного уравнения Пуассона в вариационной постановке на прямоугольной области:

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

где

$$\tilde{W}_1 = \tilde{W}_1(\Omega) = \left\{ \tilde{v}_1 \in W_2^1(\Omega) : \tilde{v}_1|_{\Gamma_1} = 0 \right\}$$

– пространство Соболева из функций на области прямоугольного вида

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

а

$$A(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1) = \int_{\Omega} (\tilde{u}_{1x} \tilde{v}_{1x} + \tilde{u}_{1y} \tilde{v}_{1y} + \kappa \tilde{u}_1 \tilde{v}_1) d\Omega, \kappa \geq 0$$

есть билинейная форма, при заданных константах $b_1, b_2 > 0, \kappa \geq 0$. Решение этой задачи существует и единственно [2, 3].

Если

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

когда \tilde{f}_1 является заданной функцией, суммируемой с квадратом, задача (1) записывается в виде

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

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

Дискретная задача с продолжением

Рассматривается линейная алгебраическая система уравнений, получающаяся при аппроксимации (1), (2), если использовать метод сумматорных тождеств

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

При этом используются векторы следующего вида:

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

а компоненты этих векторов таковы, что

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

здесь $v_{1,i,j}$ – есть значения функций дискретных аргументов в следующих узлах сетки:

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

и шаги сетки берутся следующие

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

сетка состоит из узлов выбранных ранее, тогда матрица A размерности $N \times N$ определяется следующим образом:

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

Здесь $\langle \cdot, \cdot \rangle$ – это скалярное произведение задаваемое формулой

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

Если функция f_1 непрерывна на области Ω , то можно положить, что

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

Решение задачи (3) будет существовать и являться единственным, т.к. $A > 0$.

Строим продолжение задачи (3):

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

когда векторы имеют следующую форму:

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

а матрица D размерности $2N \times 2N$ блочная и верхняя треугольная такая, что:

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

и

$$D = \begin{bmatrix} A & 0 \\ \theta & A \end{bmatrix},$$

при этом матрицы

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

а матрицы ∇_x, ∇_y с размерности $N \times N$ определяются следующим образом:

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

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

Задаются подпространства векторов из пространства \mathbb{R}^{2N} :

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

Лемма 1. Решение задачи (4) $\bar{u} \in \bar{W}_1$ будет существовать и являться единственным, а \bar{u}_1 будет решением задачи (3).

Метод итерационных факторизаций при фиктивном продолжении

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

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

тогда

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

Чтобы решать задачу (4), предлагается итерационный процесс:

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

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

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

которая расщепляется на простые задачи

$$\text{а) } \bar{Q} \in \mathbb{C}^N, \quad L\bar{Q} = \bar{F}, \quad \bar{P} \in \mathbb{C}^N;$$

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

здесь матрицы

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

поэтому

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

или

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

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

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

Лемма 2. В итерационном процессе (5) выполняется

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

где $\bar{\psi}^k = \bar{u}^k - \bar{u}$, $\forall k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ – обозначение ошибки.

Лемма 3. В итерационном процессе (5) выполняется

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

где рассматривается скалярное произведение векторов следующего вида:

$$\begin{aligned} \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle &= (\vec{u}, \vec{v}) h_1 h_2 = \langle \vec{u}_1, \vec{v}_1 \rangle + \langle \vec{u}_2, \vec{v}_2 \rangle = (\vec{u}_1, \vec{v}_1) h_1 h_2 + (\vec{u}_2, \vec{v}_2) h_1 h_2 = \\ &= \sum_{k=1}^N u_{1,k} v_{1,k} h_1 h_2 + \sum_{k=1}^N u_{2,k} v_{2,k} h_1 h_2 = \sum_{k=1}^{2N} u_k v_k h_1 h_2, \quad \forall \vec{u}, \vec{v} \in \mathbb{R}^{2N}. \end{aligned}$$

Доказательство. Учитывая, что

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

получается

$$\langle C \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle = \langle A \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle - \langle \theta \bar{\psi}_2, \bar{\psi}_1 \rangle = \langle A \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle + \langle \bar{\psi}_2, \theta \bar{\psi}_1 \rangle = \langle A \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle + \langle A \bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle.$$

Лемма 4. *Имеют место неравенства:*

1. $\exists \alpha \in (0; 1): \langle A \bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle \leq \langle A \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle, \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{W}_1;$
2. $\exists \gamma \in (1; +\infty): \langle A \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \leq \gamma \langle C \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle, \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{W}_1.$

Доказательство. По лемме 3 второе неравенство равносильно

$$\langle A \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \leq \gamma \langle A \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle - \gamma \langle A \bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle$$

и равносильно первому неравенству при $\alpha = 1 - \gamma^{-1}, \gamma = (1 - \alpha)^{-1}$.

Второе неравенство имеет место, т.к. матрицы $A > 0, C > 0$. Последнее неравенство имеет место, т.к.

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

и

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

Также можно отметить, что для $\forall \bar{\psi} \in \bar{W}_1$

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

при $h_1, h_2 \rightarrow 0$, т.е.

$$\langle A \bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle \rightarrow 0, \quad \bar{\psi}_2 \rightarrow \bar{0},$$

т.к.

$$\theta \bar{\psi}_1 = \left(\nabla_x' \nabla_y - \nabla_y' \nabla_x \right) \bar{\psi}_1 \rightarrow \bar{0},$$

при $h_1, h_2 \rightarrow 0 \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{W}_1$,

по формуле Тейлора для дискретных аналогов достаточно дифференцируемых функций.

Лемма 5. *Имеют место следующие неравенства:*

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

Доказательство. Используется, что

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

тогда получается:

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

Лемма 6. *Имеют место неравенства*

$$\exists \gamma \in (1; +\infty): \langle C \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle \leq \langle D \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle \leq \gamma \delta \langle C \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{W}_1.$$

Доказательство. Замечается, что

$$\frac{1-\alpha}{\delta} \langle D \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle \leq \frac{1-\alpha}{\delta} \langle A \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \leq (1-\alpha) \langle A \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \leq \langle C \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle =$$

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

При этом использовалось, что

$$A \leq A \leq \delta A, \quad \delta = 1 + \kappa\lambda_0^{-1}, \quad \gamma = (1 - \alpha)^{-1}.$$

Лемма 7. Если в итерационном процессе (5) выбирать

$$\tau_k = \tau = 2/(1 + \delta\gamma),$$

то

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

где

$$q = (\delta\gamma - 1)/(\delta\gamma + 1).$$

Доказательство. Из итерационного процесса (5) следует

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

Здесь $E = E_{2N \times 2N}$ – единичная матрица. В данном случае получается, что

$$\begin{aligned} \langle C\bar{\psi}^k, \bar{\psi}^k \rangle &= \langle CT\bar{\psi}^{k-1}, T\bar{\psi}^{k-1} \rangle \leq \sup_{\bar{\psi} \in \bar{W}_1} \frac{\langle CT\bar{\psi}, T\bar{\psi} \rangle}{\langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \\ &= \sup_{\bar{\psi} \in \bar{W}_1} \left(\frac{\langle CT\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle}{\langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \right)^2 \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \sup_{\bar{\psi} \in \bar{W}_1} \left(\frac{\langle (C - \tau DT)\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle}{\langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \right)^2 \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \\ &= \sup_{\bar{\psi} \in \bar{W}_1} \left(1 - \tau \frac{\langle D\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle}{\langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \right)^2 \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \max \left\{ |1 - \tau|^2 |1 - \tau\gamma\delta|^2 \right\} \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = q^2 \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle. \end{aligned}$$

Теорема 1. Если в итерационном процессе (5) выбирать

$$\tau_k = \tau = 2/(1 + \delta\gamma),$$

то

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

где

$$\varepsilon \leq \sqrt{\gamma\delta} q^k, \quad q = (\gamma\delta - 1)/(\delta\gamma + 1),$$

а

$$\|\bar{v}_1\|_A = \sqrt{\langle A\bar{v}_1, \bar{v}_1 \rangle} \quad \forall \bar{v}_1 \in \mathbb{R}^N.$$

Доказательство. Из доказательства леммы 6 видно, что выполняются неравенства, из которых следует доказательство

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

Теорема 2. Для итерационного процесса (5) в оценке относительной ошибки

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

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

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

Вывод. Учитывая вид матриц L, L^* , можно заметить, что задача (3) при N неизвестных с помощью процесса (5) решается с относительной погрешностью ε , за $O(N \ln \varepsilon^{-1})$ арифметических операций, а итерационный процесс при реализации является асимптотически оптимальным алгоритмом [4].

Алгоритм численного решения модельной задачи для экранированного уравнения Пуассона с минимальными поправками

Итерационным процессом (5) решается дискретная задача (3):

$$A\bar{u}_1 = \bar{f}_1.$$

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:

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

2. Вычисляется невязка:

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

3. Ищется поправка:

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

4. Определяется квадрат нормы ошибки:

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

5. Ставится условие остановки итераций:

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

6. Вычисляется дополнительно вектор эквивалентной невязки:

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

7. Находится дополнительно вектор эквивалентной поправки:

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

8. Определяется итерационный параметр:

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

9. Вычисляется новое приближение:

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

В условии из пункта 5, являющимся условием остановки процесса $E \in (0; 1)$ есть заранее выбираемая относительная погрешность.

Алгоритм численного решения модельной задачи для экранированного уравнения Пуассона со скорейшим спуском

При выборе итерационных параметров можно применить метод скорейшего спуска, используя критерий остановки итерационного процесса из метода минимальных поправок, когда решается прежняя задача

$$A\bar{u}_1 = \bar{f}_1$$

итерационным процессом (5). Если при выборе итерационных параметров применяется метод скорейшего спуска, тогда для решаемой задачи в итерационном процессе предлагается алгоритм вычислений, если $\bar{\psi}^k = \bar{u}^k - \bar{u}$ – ошибка:

1. Выбирается начальное приближение:

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

2. Вычисляется невязка:

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

3. Ищется поправка:

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

4. Определяется квадрат нормы ошибки:

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

5. Ставится условие остановки итераций:

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

6. Вычисляется дополнительно вектор эквивалентной невязки:

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

7. Определяется итерационный параметр:

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

8. Вычисляется новое приближение:

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

Также в условии из пункта 5, являющимся условием остановки процесса $E \in (0; 1)$ есть заранее выбираемая относительная погрешность.

Программируемый алгоритм численного решения модельной задачи для экранированного уравнения Пуассона с минимальными поправками

Решается задача:

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

которая может записываться в виде:

$$h^2 A\bar{u}_1 = h^2 \bar{f}_1,$$

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:

$$4u_{1,i,j} - u_{1,i-1,j} - u_{1,i+1,j} - u_{1,i,j-1} - u_{1,i,j+1} + h^2 \kappa u_{1,i,j} = h^2 f_{1,i,j}, \quad i=1, \dots, m, \quad j=1, \dots, n,$$

где

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

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

1. Выбирается начальное приближение:

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

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:

$$\bar{r}^{k-1} : \bar{r}_1^{k-1} = h^2 \bar{u}_1^{k-1} - h^2 \bar{f}_1, \quad \bar{r}_2^{k-1} = \bar{0}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

При программировании полагается, что

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

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

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

$$r_{1,i,j}^{k-1} = 4u_{1,i,j}^{k-1} - u_{1,i-1,j}^{k-1} - u_{1,i+1,j}^{k-1} - u_{1,i,j-1}^{k-1} - u_{1,i,j+1}^{k-1} + h^2 \kappa u_{1,i,j}^{k-1} - h^2 f_{1,i,j}^{k-1}, \quad i, j=1, \dots, n.$$

3. Ищется поправка:

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

Математика

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

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

При программировании решения системы из а) будут в массиве с элементами $Q_{i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$. 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:

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

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

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

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

и

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

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:

$$\bar{\eta}^{k-1} : \bar{\eta}_1^{k-1} = h^2 A \bar{w}_1^{k-1}, \quad \bar{\eta}_2^{k-1} = \bar{0}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

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

$$\eta_{1,i,j}^{k-1} = 4w_{1,i,j}^{k-1} - w_{1,i-1,j}^{k-1} - w_{1,i+1,j}^{k-1} - w_{1,i,j-1}^{k-1} - w_{1,i,j+1}^{k-1} + h^2 \kappa w_{1,i,j}^{k-1}, \quad i, j = 1, \dots, n.$$

7. Дополнительно находится вектор:

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

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

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

При программировании решения системы из а) будут в массиве с элементами $Q_{i,j}^{k-1}$, $i, j = 0, \dots, n+1$. 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:

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

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

При программировании решения системы из б) 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:

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

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

$$\bar{u}_1^k = \bar{u}_1^{k-1} - \tau_k \bar{w}_1^{k-1}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

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

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. Можно заметить, что не сложно выписать и программируемый алгоритм численного решения модельной задачи для экранированного уравнения Пуассона со скорейшим спуском.

Тестовый пример численного решения модельной задачи для уравнения Пуассона

В рассматриваемой задаче:

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

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 $b_1 = b_2 = 2,5$,

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

т.е.

$$\bar{u}_1(x; y) = (25 - 4x^2)(25 - 4y^2) / 64.$$

Можно заметить, что решение дискретной задачи тогда будет совпадать с решением непрерывной задачи в узлах сетки

$$u_{1,i,j} = \bar{u}_1(x_i; y_j), \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n.$$

При дискретизации непрерывной задачи выбираются значения $m = n = 2$. При численном решении получаемых систем алгебраических линейных уравнений (3) применяется приведенный ранее алгоритм с выбором итерационных параметров по методу минимальных поправок, полагая $\bar{u}_1^0 = \bar{0}$, только берется, что $\tau_1 = 1$, тогда вычисляется, что $\tau_2 = 4/9$ и итерационный процесс дает точное решение за две итерации. Действительно, $\bar{u}_1^1 = (16; 7,75; 7,75; 7,5)$, а $\bar{u}_1^2 = (9; 6; 6; 4)$ есть решение системы (3). Если для решения рассматриваемой задачи при такой же дискретизации применять метод итерационных факторизаций при продолжении правой части и решения нулем с

выбором итерационных параметров по методу скорейшего спуска, полагая $\bar{u}_1^0 = \bar{0}$, когда берется, что $\tau_1 = 1$, и вычисляется, что $\tau_2 = 4/9$, тогда итерационный процесс даст точное решение так же за две итерации. Действительно, так же будет: $\bar{u}_1^1 = (16; 7,75; 7,75; 7,5)$, а $\bar{u}_1^2 = (9; 6; 6; 4)$ есть решение той же системы (3). Можно рекомендовать в методах итерационных факторизаций выбирать всегда первый итерационный параметр за единицу.

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.
4. Дьяконов, Е.Г. Минимизация вычислительной работы. Асимптотически оптимальные алгоритмы для эллиптических задач / Е.Г. Дьяконов. – М.: Наука, 1989. – 271 с.

Поступила в редакцию 26 марта 2019 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2019, vol. 11, no. 2, pp. 25–35*

DOI: 10.14529/mmph190204

ASYMPTOTICALLY OPTIMAL SOLUTION OF THE MODEL TASK FOR THE SCREENED POISSON EQUATION

A.L. Ushakov

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

The screened equation is considered on rectangular area, with the mixed boundary conditions. At the numerical solution of this task it is suggested to use iterative factorization after fictitious continuation of the discrete task approximating the solved task. As a result, the solution is based on the solution of systems of the linear algebraic equations with matrixes of the triangular type, which contain no more than three nonzero elements in every line. At rather small error of approximation of the considered task, the demanded relative error of the suggested iterative process is reached in over the number of iterations independent of the discretization parameters. The iterative process turns out to be the method giving an optimal asymptotics as per the number of operations in arithmetic actions. The developed iterative process is based on the characteristic specifics of the stated model task. This task can be obtained in the methods of fictitious components, spaces, when boundary problems for the elliptic equations in areas of a complex shape are being solved. The algorithm is given for the fulfillment of the iterative method with choosing of the iterative parameters in the automatic mode, by applying the minimal residual, corrections method. This gives a criterion to stop the iterative process when the specified preliminarily relative error is obtained. An elementary test example is given on the computing experiments confirming the asymptotic optimality for the iterative method in the number of computing expenses. The fulfillment of the method is substantially based on the use of complex analysis.

Keywords: screened Poisson equation; iterative factorizations; fictitious continuation.

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. *Priblizhyennoe reshenie ellipticheskikh kraevykh zadach* (Approximate solution of elliptic boundary value problems). Moscow, Mir Publ., 1977, 383 p. (in Russ.). [Aubin J.-P. Approximation of elliptic boundary-value problems. New York, Wiley-Interscience, 1972, 360 p.]

4. D'yakonov E.G. *Minimizatsiya vychislitel'noy raboty. Asimptoticheski optimal'nye algoritmy dlya ellipticheskikh zadach* (Minimizing computational work. Asymptotically optimal algorithms for elliptic problems). Moscow, Nauka Publ., 1989, 271 p. (in Russ.).

Received March 26, 2019

СОБСТВЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ УПРУГОГО СТЕРЖНЯ С ДЕМПФЕРОМ

В.М. Яганов

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
г. Москва, Российская Федерация
E-mail: avtofur@yandex.ru

Рассматриваются собственные колебания упругого стержня, находящегося в поле центробежных сил инерции и опирающегося на вязкоупругий демпфер. Эта математическая модель с достаточной для инженеров достоверностью описывает динамические процессы вращающихся лопаток турбин, рабочей части иглофрезы и прочих подобных механизмов. Постановка задачи о собственных значениях базируется на вариационном принципе и ставится в комплексной форме. Такой подход позволяет оценивать демпфирующую способность стержня через мнимую часть собственной частоты (коэффициент демпфирования), а также легко усложнять и варьировать параметры конструкции. Например, рассматривать стержень с переменным поперечным сечением или переменной плотностью по длине. Достоверность результатов методики в статье доказана путем сравнения их с имеющимися в литературе данными. Основным результатом следует считать, что для структурно-неоднородных конструкций (т.е. конструкций, состоящих из упругих и вязкоупругих элементов) можно при неизменной реологии демпфера увеличить интенсивность гашения колебаний за счет рационального выбора их геометрических или упругих параметров. Причем максимум поглощаемой энергии как в первом, так и во втором случае, определяют совместно коэффициенты демпфирования двух низших форм колебаний. Из принципа *min*max следует, что в качестве глобального коэффициента демпфирования выступают поочередно коэффициенты демпфирования 1-й и 2-й форм колебаний. В точке экстремума наблюдается максимальное взаимодействие 2-х низших форм колебаний, в результате чего и наблюдается этот синергетический эффект. Очевидно, что в случае вынужденных колебаний подобранные параметры механической системы обеспечат минимальные резонансные амплитуды.

Ключевые слова: стержень; колебания; коэффициент демпфирования; вязкоупругость; собственные частоты; демпфер.

Введение

Надежность работы рабочей части иглофрезы, лопастей турбин и других подобных механизмов в значительной степени определяется уровнем резонансных амплитуд.

Перечисленные элементы (лопасти, иглы и т.д.) с хорошей для инженерных расчетов точностью могут быть представлены упругими стержневыми моделями, находящимися в поле центробежных сил [1].

Для рассеивания энергии упругих поперечных колебаний (как наиболее опасных) и, в конечном счете, уменьшения резонансных амплитуд рассматривается вариант установки кольцевого бандажа-демпфера из вязкоупругого материала, связывающего упругие элементы.

Схематически часть конструкции представлена на рис. 1.

1. Постановка задачи

Задача о собственных поперечных колебаниях стержня ставится как для определения спектра резонансных частот, так и для количественной оценки диссипируемой энергии в зависимости от геометрических и физических параметров модели.

Предполагается, что один конец упругого стержня жестко заделан в диск-оправку, другой – свободен. Взаимодействие стержня с вязкоупругим бандажом в модели заменяется точечным его опиранием на одномерную вязкоупругую пружину (демпфер). При вращении стержня в нем возникают растягивающие центробежные силы инерции. На рис. 2 эта сила обозначена как $N(x)$ для каждого сечения стержня с координатой x . Кроме того, l – длина стержня, l_0 – координата крепления демпфера к стержню, \bar{C} – жесткость демпфера, Ω – угловая скорость вращения стержня, a – радиус диска.

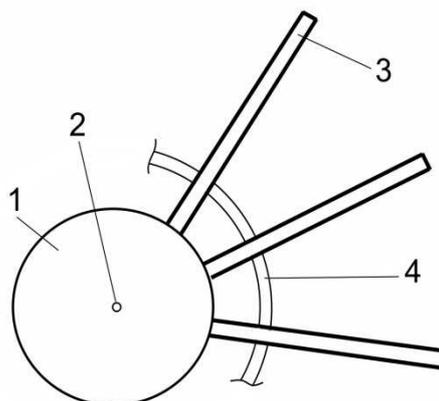


Рис. 1. Схема конструкции. 1 – диск, 2 – ось вращения, 3 – стержни, 4 – кольцевой бандаж

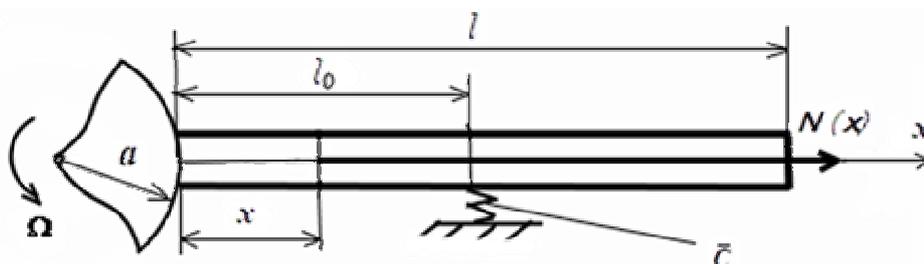


Рис. 2. Физическая модель стержневой системы

Математическая постановка задачи

Рассмотрим поперечные колебания жестко заделанного одним концом упругого стержня, опирающегося в произвольной точке на вязкоупругий демпфер. Физические и геометрические соотношения принимаются в линейной постановке. Закон колебания стержня примем в виде:

$$W(x,t) = W_0(x) e^{-i\bar{\omega}t}, \tag{1}$$

где $W_0(x)$ – собственная форма поперечных колебаний, $\bar{\omega} = \omega_R + i\omega_I$ – комплексная частота колебаний, ω_R – собственная частота, ω_I – коэффициент демпфирования.

Продольные силы инерции $N(x)$, действующие в каждом сечении стержня, находятся как

$$N(x) = \frac{1}{2} \rho F \Omega^2 [l^2 + 2al - x^2 - 2ax], \tag{2}$$

где ρ – плотность материала стержня, F – площадь поперечного сечения стержня, Ω – угловая скорость вращения стержня, a – радиус жесткой оправки-диска.

Формула (2) получена в предположении $\Omega = \text{const}$, $\rho = \text{const}$ и $x \in [0, l]$.

Для стержня с переменными сечением и плотностью по длине, сила $N(x)$ определяется как

$$N(x) = \Omega^2 \int_x^l \rho(x) F(x) (x+a) dx. \tag{3}$$

Учет продольной силы $N(x)$, а также влияния вязкоупругого элемента на поперечные колебания стержня проще всего осуществить при вариационной постановке задачи. Потенциальная энергия стержня Π_c определяется следующим соотношением:

$$\Pi_c = \frac{1}{2} \int_0^l (M^2/EJ) dx, \tag{4}$$

где $M(x, t)$ – изгибающий момент в каждом сечении стержня, E – модуль Юнга, J – момент инерции поперечного сечения.

Изгибающий момент M с учетом продольной силы вычисляется так:

$$M(x, t) = -EJ \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2} - N(x)W(x, t). \quad (5)$$

Предполагается, что вязкоупругие свойства демпфера описываются в рамках линейной теории Больцмана–Вольтерры. С помощью метода замораживания [2] интегральный оператор Вольтерры заменяется на комплексную жесткость $\bar{C} = C_R + iC_I$, где:

$$C_R = C \left(1 - \int_0^{\infty} R(\tau) \cos(\omega_R \tau) d\tau \right); \quad C_I = -C \int_0^{\infty} R(\tau) \sin(\omega_R \tau) d\tau, \quad (6)$$

здесь C – мгновенная жесткость [н/м], $R(\tau)$ – ядро релаксации. Тогда потенциальная энергия демпфера определяется по формуле:

$$\Pi_D = \frac{1}{2} (C_R + iC_I) W^2(l_0, t), \quad (7)$$

где l_0 – координата точки контакта стержня с демпфером, действительная часть Π_D – энергия упругой деформации, мнимая часть – энергия диссипации (рассеивания).

Потенциальная энергия системы в целом равна:

$$\Pi = \Pi_c + \Pi_D. \quad (8)$$

Кинетическая энергия системы (без учета массы демпфера) имеет вид:

$$T = \frac{1}{2} \rho F \int_0^l \left(\frac{\partial W}{\partial t} \right)^2 dx. \quad (9)$$

Из принципа Гамильтона–Остроградского вариация от действия по Гамильтону равна нулю:

$$\delta \left(\int_{t_A}^{t_B} (T - \Pi) dt \right) = 0, \quad (10)$$

тут t_A, t_B – интервал, за который система переходит из положения A в положение B .

Последовательно подставляя в соотношение (10) формулы (9), (8), (7), (4), (5), (2), (1), получим вариационное уравнение относительно $W_0(x)$:

$$\delta \left(\frac{EJ}{2} \int_0^l \left(\frac{d^2 W_0}{dx^2} \right)^2 dx + \int_0^l N(x) W_0 \frac{d^2 W_0}{dx^2} dx + \frac{1}{2EJ} \int_0^l N^2 W_0^2 dx + \frac{1}{2} \bar{C} W_0^2(l_0) - \frac{\rho \bar{\omega}^2 F}{2} \int_0^l W_0^2 dx \right) = 0. \quad (11)$$

Граничные условия для стержня следующие:

$$x=0: \quad W_0=0 \quad \frac{dW_0}{dx}=0; \quad (12)$$

$$x=l: \quad \frac{d^2 W_0}{dx^2}=0 \quad \frac{d^3 W_0}{dx^3}=0. \quad (13)$$

Итак, задача состоит в определении собственных форм $W_0(x)$, удовлетворяющих вариационному уравнению (11) и граничным условиям (12), (13).

2. Метод решения

Поставленная задача решается методом Ритца. Искомое решение $W_0(x)$ приближенно заменяется конечным рядом (длиной K) по базисным функциям $\varphi_k(x)$:

$$W_0(x) = \sum_{k=1}^K \alpha_k \varphi_k(x), \quad (14)$$

где α_k – неизвестные коэффициенты.

Для граничных условий (12), (13) в качестве базисных функций принимаются [3]:

$$\varphi_k(x) = (\text{sh } r_k + \sin r_k)(\text{ch } \frac{xr_k}{l} - \cos \frac{xr_k}{l}) - (\text{ch } r_k + \cos r_k)(\text{sh } \frac{xr_k}{l} - \sin \frac{xr_k}{l}), \quad (15)$$

где r_k – известные корни характеристического частотного уравнения.

Подставляя (15), (14) в уравнение (11) и варьируя по неизвестным α_k , получим систему однородных алгебраических уравнений относительно α_k .

В матричном виде эти уравнения имеют следующий вид:

$$[A + \bar{D} - \bar{\omega}^2 B] \Lambda = 0, \quad (16)$$

где A – матрица жесткости стержня (элементы действительные), \bar{D} – матрица жесткости демпфера (элементы комплексные), B – матрица масс системы, Λ – вектор-столбец неизвестных α_k .

Элементы матриц A , \bar{D} , B вычисляются соответственно по следующим формулам:

$$a_{kl} = \int_0^l \left(\frac{d^2 \varphi_k}{dx^2} \frac{d^2 \varphi_l}{dx^2} + N(x) \left(\varphi_k \frac{d^2 \varphi_l}{dx^2} + \varphi_l \frac{d^2 \varphi_k}{dx^2} \right) + \frac{N^2(x)}{EJ} \varphi_k \varphi_l \right) dx, \quad (17)$$

$$d_{kl} = \bar{C} \varphi_k(l_0) \varphi_l(l_0), \quad (18)$$

$$b_{kl} = \begin{cases} \rho F \int_0^l \varphi_k \varphi_l dx, & k = l \\ 0, & k \neq l \end{cases} \quad (19)$$

Система (16) имеет нетривиальное решение в случае равенства нулю ее определителя. В итоге получаем частотное уравнение относительно $\bar{\omega}$. Задача по определению комплексных корней решается с помощью итерационного метода Мюллера [4], где в качестве начальных приближений принимались собственные частоты упругой задачи.

3. Результаты расчетов

К результатам следует отнести две группы проведенных расчетов:

Первая относится к исследованию вопроса практической сходимости метода и достоверности получаемых результатов;

Вторая – к выбору рациональных геометрических и физических параметров системы, при которых ее диссипативные характеристики достигают наибольших значений.

Рассмотрим эти группы последовательно.

I. Для исследования практической сходимости метода были решены 3 задачи: **A, B, C.**

A. Задача колебаний упругого стержня (без учета демпфера и сил инерции). Результаты показали, что при увеличении числа членов ряда (14) собственные частоты приближаются к истинным значениям сверху. В табл. 1 представлены некоторые результаты для первых 3-х собственных частот упругого стержня:

Таблица 1

Расчет низших частот в зависимости от длины ряда (14)					
K	4	5	6	9	∞
ω_1 , рад/сек	3,66	3,59	3,56	3,53	3,51
ω_2 , рад/сек	23,9	23,1	22,7	22,4	22,0
ω_3 , рад/сек	64,2	63,9	63,5	62,5	61,7

Расчет проводился для стержня со следующими характеристиками:

$$E = l = J = \rho = 1, \quad \bar{C} = 0, \quad \Omega = 0.$$

Значения частот ω_n при $K = \infty$ соответствуют теоретическим величинам [3]. Из табл. 1 следует, что уже при $K = 9$ результаты можно считать вполне удовлетворительными.

Решенных задач на собственные колебания упругого стержня, находящегося в поле центростремительных сил инерции и одновременно опирающегося на демпфер, в литературе найти не удалось. Поэтому сходимость метода апробировалась на задачах **B, C.**

В. Задача колебаний неподвижного консольного стержня, опертого на упругую пружину

Расчетные исходные данные были следующими:

$$\Omega = 0, E = 2 \times 10^{11} \text{ н/м}^2, J = 0,785 \times 10^{-12} \text{ м}^4, l = 0,1 \text{ м}, \rho = 7,8 \times 10^3 \text{ кг/м}^3,$$

$$F = 3,14 \times 10^{-6} \text{ м}^2, C = 10^3 \text{ н/м}.$$

Координата крепления пружины к стержню принята $l_0 = 0,05$ м. В работе [3] для такой системы первая круговая собственная частота равна $\omega_1^T = 1758,2$ рад/с. Расчет по методике при $K = 9$ дал результат $\omega_1^P = 1760,6$ рад/с. Для $l_0 = 0,09$ м имеем, соответственно, $\omega_1^T = 2092$ рад/с и $\omega_1^P = 2099,1$ рад/с.

Следовательно, метод учета упругой опоры дает тоже вполне достоверные результаты.

С. Задача о собственных колебаниях упругого стержня, вращающегося со скоростью Ω

Физические и геометрические характеристики стержня те же, что и в предыдущем примере. Радиус вращающегося диска равен $a = 0,1$ м. Жесткость демпфера $C = 0$.

В табл. 2 для разных угловых скоростей вращения приведены две расчетные частоты ω_1^P , ω_2^P и две теоретические ω_1^T , ω_2^T , взятые из работы [5].

Таблица 2

Зависимость двух низших частот от скорости вращения

Ω , рад/с	ω_1^P , рад/с	ω_1^T , рад/с	ω_2^P , рад/с	ω_2^T , рад/с
3	816,2	814,8	5121,3	5115,6
10	825,7	824,0	5128,2	5123,8

Частоты ω_n^P получены при $K = 9$ ряда (14). Это сравнение также является доказательством достоверности получаемых результатов.

II. Вторая часть расчетов касалась оптимизации вязкоупругой конструкции. Для того чтобы кольцевой бандаж эффективно выполнял свою роль, необходимо подобрать параметры системы, обеспечивающие максимальное рассеивание энергии. В задаче на собственные колебания количественной мерой поглощения энергии каждой формой являются соответствующие коэффициенты демпфирования ω_l . Исследовались коэффициенты демпфирования низших форм колебаний как наиболее слабо затухающих. Кроме того, влияние сил инерции особо весомо как раз на эти формы (до 35 % в сторону увеличения собственных частот [6]).

В качестве варьируемых параметров системы были выбраны два: координата крепления демпфера (l_0) и ее мгновенная жесткость (C). В зависимости от этих параметров рассчитывались собственные частоты и коэффициенты демпфирования ω_l . Для обеих задач физические и геометрические характеристики стержня были такими же, как в задаче **I.B**. Угловая скорость вращения стержня $\Omega = 10$ рад/с.

A. При первом расчете изменялась координата l_0 при фиксированной мгновенной жесткости демпфера $C = 5 \times 10^2$ н/м. Вязкоупругие свойства демпфера описывались слабосингулярным ядром релаксации [2]: $R(t) = Ae^{-\beta t} t^{\alpha-1}$ с параметрами $A = 0,01$, $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,05$. На рис. 3 приведена зависимость коэффициентов демпфирования ω_l^1, ω_l^2 от координаты l_0/l .

Первые две собственные формы затухают наиболее медленно, поэтому эти показатели диссипативных свойств системы будут определяющими. Графики указанных коэффициентов пересекаются, и тогда, исходя из принципа **minmax**, глобальным коэффициентом демпфирования, характеризующим диссипативные свойства системы в целом, будет кривая ω_l^* .

График ω_l^* представляет собой суперпозицию кривой ω_l^1 до точки пересечения и кривой ω_l^2 после точки пересечения. Глобальный коэффициент демпфирования ω_l^* имеет явно выра-

женный максимум при $l_0/l = 0,62$, где и будет наиболее эффективное гашение низших форм колебаний.

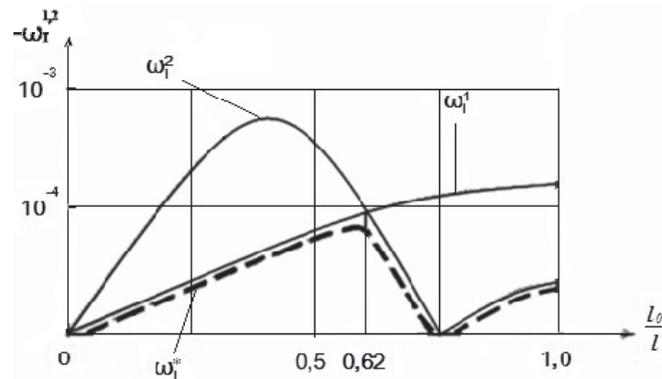


Рис. 3. Коэффициенты демпфирования в зависимости от l_0/l

В. Во втором численном эксперименте варьировалась мгновенная жесткость демпфера C . Координата крепления демпфера к стержню при этом фиксировалась в точке $l_0/l = 0,62$. На рис. 4 показаны зависимости коэффициентов ω_1^1 , ω_1^2 от мгновенной жесткости демпфера C .

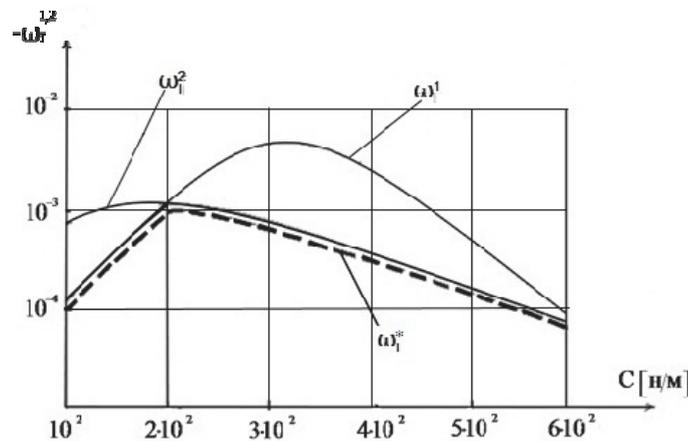


Рис. 4. Коэффициенты демпфирования в зависимости от C

И в этом случае график глобального коэффициента демпфирования ω_1^* имеет максимум, который достигается при $C = 2 \cdot 10^2$ н/м. Рациональный выбор рассматриваемых параметров позволяет существенно увеличить коэффициент демпфирования.

Заключение

Предложен алгоритм решения задачи о собственных колебаниях вращающегося упругого стержня с вязкоупругим демпфером. Для таких структурно-неоднородных систем выявлен эффект взаимодействия низших собственных форм колебания, позволяющий повысить демпфирующие свойства за счет рационального выбора их геометрических, упругих параметров (при неизменной реологии вязкоупругого элемента). Наличие центробежных сил инерции в качественном плане картину не меняет, сдвигая лишь оптимальные значения параметров конструкции.

Литература

1. Влияние рассеяния энергии в материале на колебания лопаток с неоднородностями / А.П. Зиньковский, И.Г. Токарь, В.А. Круц, Я.Д. Круглый // *Авиационно-космическая техника и технология*. – 2012. – № 9(96). – С. 132–137.
2. Кравчук, А.С. *Механика полимерных и композиционных материалов: экспериментальные и численные методы* / А.С. Кравчук, В.П. Майборода, Ю.С. Уржумцев. – М.: Наука, 1985. – 303 с.

3. Филиппов, А.П. Колебания деформируемых систем / А.П. Филиппов. – М.: Машиностроение, 1970. – 734 с.
4. Форсайт, Дж. Машинные методы математических вычислений / Дж. Форсайт, М. Малькольм, К. Моулер. – М.: Мир, 1980. – 279 с.
5. Тимошенко, С.П. Колебания в инженерном деле / С.П. Тимошенко. – М.: Машиностроение, 1985. – 472 с.
6. Елисеев, В.В. Расчетный метод построения диаграмм Кэмпбелла для турбинных лопаток / В.В. Елисеев, А.А. Москалец // Современное машиностроение. Наука и образование. – 2016. – № 5. – С. 413–420.

Поступила в редакцию 12 апреля 2017 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2019, vol. 11, no. 2, pp. 36–43*

DOI: 10.14529/mmph190205

SELF-OSCILLATIONS OF A ROTATING ELASTIC ROD WITH DAMPER

V.M. Yaganov

Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russian Federation

E-mail: avtofur@yandex.ru

We consider the self-oscillations of an elastic rod located in the field of centrifugal forces of inertia and based on a viscoelastic damper. This mathematical model, with the accuracy sufficient for engineers, describes the dynamic processes in the rotating turbine blades, in the working part of the wire brush, and in other similar mechanisms. The formulation of the eigenvalue problem is based on the variational principle and is put in a complex form. This approach makes it possible to estimate the damping ability of the rod through the imaginary part of the eigen frequency (damping coefficient), as well as to easily complicate and vary the design parameters. For example, a rod can be considered with variable cross-section or variable density along its length. In the article the validity of the method results is proved by comparing them with the data available in the literature. The following should be considered as the main result: for structurally inhomogeneous structures (i.e. structures consisting of elastic and viscoelastic elements), in case of a constant damper rheology, it is possible to increase the intensity of vibration damping due to rational selection of their geometric or elastic parameters. Meanwhile the maximum of the absorbed energy, both in the first and in the second case, is determined jointly by the damping coefficients of the two lower forms of oscillations. According to the minmax principle, the damping coefficients of the 1st and 2nd forms of oscillations act alternately as the global damping coefficient. At the extreme point there is a maximum interaction of 2 lower forms of oscillations, as a result of which this synergetic effect is observed. It is obvious that in the case of forced oscillations, the selected parameters of the mechanical system will provide minimal resonant amplitudes.

Keywords: rod; oscillations; damping coefficient; viscoelasticity; eigen frequencies; damper.

References

1. Zinkovskii A.P., Tokar' I.G., Kruts V.A., Kruglyy Ya.D. Influence of Dissipation of Energy in Material on Vibrations of Structural Elements with Nonuniformities. *Aviatsionno-kosmicheskaya tekhnika i tekhnologiya*, 2012, no. 9(96), p. 132–137. (in Russ.).
2. Kravchuk A.S., Mayboroda V.P., Urzhumtsev Yu.S. *Mekhanika polimernykh i kompozitsionnykh materialov: eksperimental'nye i chislennye metody* (Mechanics of polymer and composite materials: experimental and numerical methods). Moscow, Nauka Publ., 1985, 303 p. (in Russ.).
3. Filippov A.P. *Kolebaniya deformiruemyykh sistem* (Oscillations of deformable systems). Moscow, Mashinostroenie Publ., 1970, 734 p. (in Russ.).
4. Forsayt Dzh., Mal'kol'm M., Mouler K. *Mashinnye metody matematicheskikh vychisleniy* (Machine methods for mathematical calculations). Moscow, Mir Publ., 1980, 279 p. (in Russ.).

[Forsythe G.E., Malcolm M.A., Moler C.B. *Computer methods for mathematical computations*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1977, 259 p.]

5. Timoshenko S.P. *Kolebaniya v inzhenernom dele* (Oscillations in engineering). Moscow, Mashinostroenie Publ., 1985, 472 p. (in Russ.).

6. Eliseev V.V., Moskalets A.A. Raschetnyy metod postroeniya diagramm Kempbella dlya turbinnykh lopatok (The calculated method of constructing Campbell diagrams for turbine blades). *Sovremennoe mashinostroenie. Nauka i obrazovanie*, 2016, no. 5, pp. 413–420. (in Russ.).

Received April 12, 2017

IMPORTANCE OF ATOMIC-LIKE BASIS SET OPTIMIZATION FOR DFT MODELLING OF NANOMATERIALS

E.V. Anikina¹, I.A. Balyakin^{2,3}, V.P. Beskachko¹

¹ South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

² Institute of Solid State Chemistry UB RAS, Ekaterinburg, Russian Federation

³ Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russian Federation

E-mail: anikinaev@susu.ru

Atomic-like orbital basis sets allow efficient calculation of nanomaterial's surface properties within the density functional theory. However, unlike plane wave basis sets, they require thorough optimization on a reference system before modelling systems of interest. We considered the basis set optimization procedure for several structures: bulk tantalum carbide, oxygen molecule, bulk lithium, and α -carbyne. We showed that during the optimization procedure not only the total energy of a reference system should be monitored but other physical characteristics (bond length and atomic charges) too. Moreover, optimal basis parameters could not correspond to the minimum total energy of a reference system to get the correct physical properties. We obtained optimal orbital parameters, which can be used for modelling of the following systems: oxygen adsorption on tantalum carbide surface, and Li-functionalized carbyne. Considering oxygen adsorption on TaC surface and Li-functionalization of carbyne, we also demonstrated that the basis set optimization influences binding energies and atomic charges of an adsorbent and a surface.

Keywords: Density functional theory; atomic-like basis set; projector-augmented wave method; adsorption.

Introduction

Density functional theory (DFT) allows researchers to study structure, properties, and behaviour of nanomaterials without any empirical data and with high precision and reproducibility [1], which opens great opportunities for new materials predictions and analysis of entangled experimental data. With the help of this modelling method, we can search for structures with desired properties [2] or in extreme conditions [3]. However, though DFT implementations do not require from researchers any empirical data about a structure but type and positions of atoms, to reduce the many-electron problem to one-electron, some theoretical approximations are needed.

One of the approximate approaches is a system wave function decomposition over some finite basis set. Two types of basis sets are popular among the solid state physicists: plane waves and atomic-like functions. The former basis is easy to implement in programming packages, it is asymptotically complete and allows systematic convergence. However, the computational cost of plane waves is quite high, and vacuum regions in this approach will cost the same as a matter [4]. More efficient for linear-scaling calculations are atomic-like orbital sets, which allow accurate calculation, easy result interpretation and low computational cost of a vacuum [5], therefore, they are suitable for surface modelling. But such basis sets require optimization on reference systems before facing a real project.

In this work, we will discuss the atomic-like basis optimization procedure and its influence on the physical properties of two nanomaterials: tantalum carbide and Li-functionalized carbyne (carbyne@Li). The first material, TaC, could be a promising alloy additive to heatproof steels [6] if it is stable to oxidation. To check this stability we should clarify the interaction mechanism of oxygen molecules with TaC surface. The second material, carbyne@Li, is a promising candidate for hydrogen storage systems.

Models and simulation details

We performed DFT calculations using freeware SIESTA suite [7, 8], where atomic-like basis sets and periodic boundary conditions are implemented. Also, to verify the obtained results we made simulations in the Vienna ab initio simulation package (VASP) [9], where the projector-augmented wave

(PAW) method is implemented [10]. In all calculations, we used generalized gradient approximation for exchange-correlation potential (GGA), Perdew–Burke–Ernzerhof functional [11]. In all SIESTA simulations, MeshCutoff parameter [12] was 350 Ry and geometry relaxation was performed by the conjugate-gradient method with the force convergence criterion of $5 \cdot 10^{-5}$ Ry/Bohr (which is $\approx 1,3 \cdot 10^{-3}$ eV/Å).

Tantalum carbide and oxygen adsorption. For basis set optimization of Ta and C, we chose bulk tantalum carbide as a reference system and modelled cubic unit cell of eight atoms (four C and four Ta atoms) with the translational parameter of 4,48 Å. Pseudopotentials were taken from [13]. For Brillouin zone integration, we used 10 k -points in each periodic direction (10×10×10 sampling). The energy convergence criterion in the electronic step was 10^{-6} eV. With the same unit cell we also made PAW calculations with the following parameters: 11×11×11 Monkhorst-Pack set of k -points, plane wave cut-off energy of 600 eV, and the force convergence criterion of 10^{-3} eV/Å. For basis set optimization of oxygen, we considered a single molecule in the cell of 30×30×30 Å³ (single k -point) as a reference system. Pseudopotential for O was taken from the FHI pseudo database [14].

To reveal the influence of basis set parameters on the adsorption of single oxygen molecule on TaC surface we modelled four unit cells of tantalum carbide (16 C atoms and 16 Ta atoms, see Fig. 3). We found optimal translational parameters, which correspond to the minimum total energy of the systems, for both cases: optimized basis set (8,845 Å) and default basis parameters (8,850 Å). In non-periodic z -direction we put 30 Å of vacuum. For Brillouin zone integration, we used 20×20×1 k -points sampling.

Carbyne@Li. Pseudopotentials for this system were taken from the FHI pseudo database [14]. For basis set optimization of C, we considered pure α -carbyne [15] and simulated unit cell of single acetylene molecule (two carbon atoms) with a translational parameter of 2,57 Å (in non-periodic directions we put ~ 26 Å of vacuum). In the periodic direction we used 64 k -points. For basis set optimization of Li, we considered bulk lithium and modelled its primitive unit cell ($a = b = c = 7,64$ Å; $\alpha = \beta = \gamma = 23,22^\circ$). For Brillouin zone integration, we used 32 k -points in each periodic direction (32×32×32 sampling). The energy convergence criterion in the electronic step was 10^{-6} eV.

To simulate Li sorption on the carbon chain we considered seven acetylene molecules and single Li atom in the unit cell with a translational parameter of 18 Å (in non-periodic directions we put 27 Å of vacuum). We used 32×1×1 k -points sampling. For the same system, we performed PAW calculations with the following parameters: 15×1×1 Monkhorst-Pack set of k -points, plane wave cut-off energy of 800 eV, and the force convergence criterion of 10^{-3} eV/Å.

Basis set optimization

For our calculation we used double-zeta polarized (DZP) basis sets generated by Sankey scheme [5] and split-valence method [16]. With DZ orbitals users could vary two parameters: orbital cut-off radius and cut-off radius of a modified orbital, which is controlled by the parameter SplitNorm. The general rule in optimizing the shape of the orbitals is to minimize the reference system total energy [16]. However, usually, not the total energy, but the energy difference between states of the considered system plays the main role in numerical investigations (e.g. binding, cohesive, formation energy, etc.). Therefore, to obtain reasonable basis during the optimization, it is necessary to monitor also other physical properties of a reference system, like interatomic distance (in case of bulk calculations with a fixed unit cell “pressure” parameter [16] could be an indicator) or/and charge. On Fig. 1 we illustrate the optimization procedure, using O(2p) and C(2p) orbitals (TaC+O₂ system) as an example.

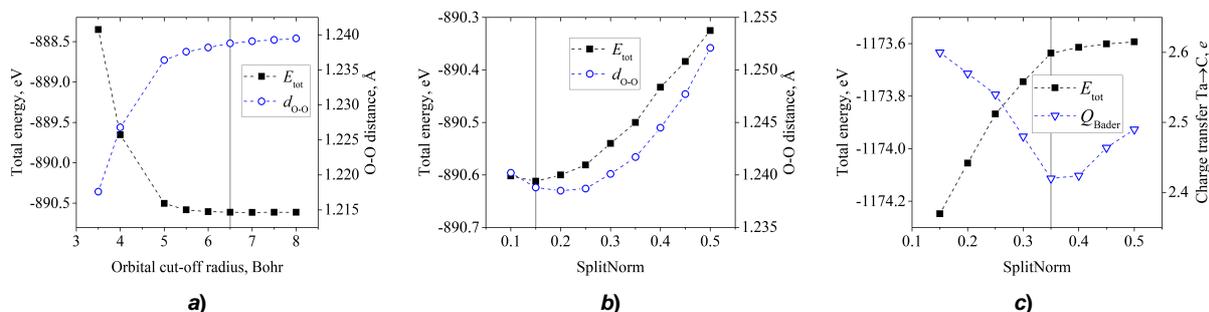


Fig. 1. Dependence of reference system total energy on basis set parameters: a) cut-off radius of O(2p) orbital; b) SplitNorm of O(2p) orbital; c) SplitNorm of C(2p) orbital. On a) and b) also the dependencies of oxygen molecule length are presented, on c) – the Bader charge transfer from Ta atom to C. Solid grey lines note the chosen value of orbital parameters

Usually, the increase of the main orbital radius leads to the decrease of the system’s total energy and its consequent “stabilization”, along with the interatomic distance (Fig. 1, a). And by varying the radius of a modified orbital (match radius, controlled by SplitNorm) we can reach the minimum of system’s total energy and correct the length parameter (Fig. 1, b), as GGA in most cases results in overestimated bond lengths [17]. However, sometimes the choice of the parameter corresponding to the minimum total energy could be unphysical, and, therefore, we need to check other system’s properties. For example, in Fig. 1c default SplitNorm = 0,15 corresponds to the minimum total energy, but we observe deceptive behaviour of atomic charges: according to Mulliken in this point there is almost no charge transfer from Ta to C (0,02 e) and Bader charge analysis [18] gives too high value (2,6 e). From PAW calculations we found that Bader charge transfer is 1,85 e. So, by increasing SplitNorm, we could decrease the Bader charge (Q_{Bader}) and at the same time increase the Mulliken charge (at SplitNorm = 0,35 it equals to 0,91 e). Even though the total energy of TaC is not minimized, the modelled system has correct physical properties. All optimized parameters, along with the default SIESTA values, are presented in Table 1.

Table 1
Optimized basis set parameters for considered systems (oxygen adsorption on tantalum carbide and Li-functionalized carbyne). Default values for radii are noted in the parenthesis. Default SplitNorm parameter is 0,15 for all cases.
 1 Bohr \approx 0,529 Å

System	O ₂ on tantalum carbide						Carbyne@Li		
	C		Ta		O		C	Li	
Element									
Orbital	2s	2p	5d	6s	2s	2p	2s	2p	2s
Cut-off radius, Bohr	6,6 (4,1)	7,6 (4,9)	8,5 (5,5)	9,1 (6,7)	6,0 (3,3)	6,5 (3,9)	8,0 (4,1)	7,6 (4,9)	13,5 (7,8)
Match radius, Bohr	2,7 (3,3)	2,8 (3,5)	3,6 (3,8)	6,0 (6,5)	2,3 (2,5)	2,8 (2,5)	2,8 (3,3)	3,3 (3,5)	7,0 (7,7)
SplitNorm	0,40	0,35	0,25	0,30	0,25	0,15	0,35	0,25	0,35

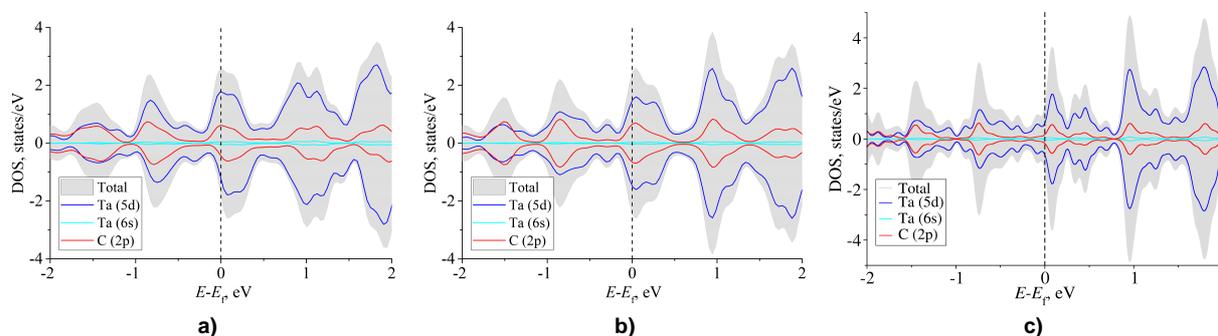


Fig. 2. Total and projected densities of states of TaC: a) SIESTA calculation with not optimized basis set; b) SIESTA calculation with the optimized basis set; c) PAW calculation. Dashed lines note the Fermi level

Tantalum carbide and oxygen adsorption on its surface

First, we performed spin-polarized calculations of bulk TaC and plotted projected densities of states (PDOS), see Fig. 2. This system is not magnetic, so its total spin polarization should be equal to zero and PDOS plot should be symmetric with respect to $y = 0$ (Fig. 2, c). And, indeed, we got such results for the optimized basis set (Fig. 2, b). However, default basis parameters resulted in a slightly unsymmetrical plot, which is explained by a small total spin polarization of the system (0,26 e). Therefore, basis set optimization allows us to obtain the correct properties of TaC.

Also, basis set optimization significantly influences the binding energy of an oxygen molecule adsorbed on the surface of tantalum carbide. We calculated binding energy as follows:

$$E_{bind} = E_{TaC@O_2} - E_{TaC} - E_{O_2},$$

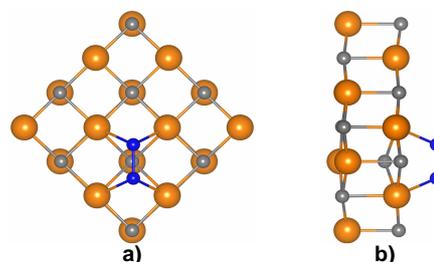


Fig. 3. a) Top and b) side views of an oxygen molecule adsorbed on TaC surface. Ta atoms are orange, C atoms – grey, O atoms – blue

where $E_{\text{TaC@O}_2}$ is the total energy of TaC surface with adsorbed O_2 molecule, E_{TaC} is the total energy of relaxed TaC surface, and E_{O_2} is the total energy of a single O_2 molecule. For the configuration depicted in Fig. 3 we got $E_{\text{bind}} = -1,70$ eV in case of the optimized basis set, and $E_{\text{bind}} = -2,41$ eV in case of the default basis set. The difference of 0,7 eV could play a crucial role in the analysis of the results (e.g. in desorption temperature estimations from binding energy), therefore, one should be cautious, using default basis sets during the modelling of surface processes.

Li-functionalized carbyne

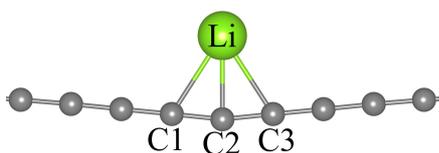


Fig. 4. Relaxed structure of Li-functionalized carbyne

For the relaxed structure of carbyne@Li (see Fig. 4) we calculated Li binding energy and performed charge analysis for different basis set configuration (default, fully optimized, only Li/C optimized). To compare results we also performed PAW calculations for the same system. The Li binding energy was calculated as follows:

$$E_{\text{bind}} = E_{\text{carbyne@Li}} - E_{\text{carbyne}} - E_{\text{Li}},$$

where $E_{\text{carbyne@Li}}$ is the total energy of Li-functionalized carbyne, E_{carbyne} is the total energy of pristine carbyne, and E_{Li} is the total energy of an isolated Li atom. Results of these calculations are presented in Table 2.

Table 2

Binding energies and atomic charges (calculated from different methodologies) of carbyne@Li

Basis set	$E_{\text{bind}}, \text{eV}$	Q_{Li}, e				Q_{C}, e (Bader)		
		Mulliken	Hirshfield	Voronoi	Bader	C1	C2	C2
optimized	-1,86	0,96	0,60	0,62	0,99	-0,20	-0,17	-0,22
only C optimized	-2,08	0,96	0,61	0,66	0,99	-0,19	-0,17	-0,22
only Li optimized	-1,91	0,55	0,52	0,50	0,99	-0,19	-0,21	-0,25
default	-2,14	0,51	0,51	0,51	0,99	-0,25	-0,16	-0,25
PAW	-2,09	-	-	-	0,92	-0,19	-0,19	-0,18

Table 2 shows that atomic charges (either Li or C, depending on the charge analysis procedure) change noticeably with the optimization of the basis set. Quite surprisingly, the most significant contribution is from C orbitals optimization, not Li. And again, as in the case of TaC, the closest to PAW results are atomic charges obtained with the optimized basis set. The energy difference between E_{bind} calculated with the default and optimized basis sets is not negligible (0,28 eV), which indicates the importance of basis set optimization procedure.

Conclusions

Using SIESTA package, we optimized 9 valence orbitals, necessary to investigate tantalum carbide and Li-functionalized carbyne. We showed that during the optimization procedure not only total energy of a reference system should be monitored, but other physical parameters (interatomic distance, charge) too. In some cases, the obvious rule of total energy minimization should be ignored in order to get the correct physical properties of the investigated systems. Optimized orbital parameters could be utilized for further research of the considered systems (of course, with the corresponding pseudopotentials, noted in simulation details). We also demonstrated that basis set optimization changes noticeably the sorptive properties of the considered materials. Therefore, default basis set parameters should be used cautiously for surface investigations.

The reported study utilized the supercomputer resources of South Ural State University and Institute of Mathematics and Mechanics, UB RAS. This work was partly carried out in accordance with the state assignment for the Institute of Solid State Chemistry of the Ural Branch of Russian Academy of Sciences (no. AAAA-A19-119031890029-7).

References

1. Jones R. O. Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future. *Reviews of Modern Physics*, 2015, Vol. 87, Issue 3, pp. 897–923. DOI: 10.1103/RevModPhys.87.897

2. Hastrup S., Strange M., Pandey M., Deilmann T., Schmidt P.S., Hinsche N.F., Gjerding M.N., Torelli D., Larsen P.M., Riis-Jensen A.C., Gath J., Jacobsen K.W., Mortensen J.J., Olsen T., Thygesen K.S. The Computational 2D Materials Database: high-throughput modeling and discovery of atomically thin crystals. *2D Materials*, 2018, Vol. 5, no. 4, p. 36. DOI: 10.1088/2053-1583/aacfc1
3. Bazhanova Z.G., Roizen V.V., Oganov A.R. High-pressure behavior of the Fe–S system and composition of the Earth's inner core. *Physics-Uspekhi*, 2017, Vol. 60, no. 10, pp. 1025–1032. DOI: 10.3367/UFNe.2017.03.038079
4. Payne M.C., Teter M.P., Allan D.C., Arias T.A., Joannopoulos J.D. Iterative minimization techniques for abinitio total-energy calculations – molecular-dynamics and conjugate gradients. *Reviews of Modern Physics*, 1992, Vol. 64, Issue 4, pp. 1045–1097. DOI: 10.1103/RevModPhys.64.1045
5. Junquera J., Paz O., Sanchez-Portal D., Artacho E. Numerical atomic orbitals for linear-scaling calculations. *Physical Review B*, 2001. Vol. 64, Issue 23, p. 9. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.235111
6. Kurlov A.S., Gusev A.I. *Tungsten Carbides: Structure, Properties and Application in Hardmetals*. Springer, Cham-Heidelberg-NY, 2013, 242 p. DOI: 10.1007/978-3-319-00524-9
7. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D., García A., Junquera J. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002, Vol. 14, Issue 11, pp. 2745. DOI: 10.1088/0953-8984/14/11/302
8. Ordejon P., Artacho E., Soler J.M. Self-consistent order-N density-functional calculations for very large systems. *Physical Review B*, 1996, Vol. 53, Issue 16, pp. 10441–10444. DOI: 10.1103/PhysRevB.53.R10441
9. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, 1996, Vol. 54, Issue 16, pp. 11169–11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
10. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 1999, Vol. 59, Issue 3, pp. 1758–1775. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.1758
11. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, 1996. Vol. 77, Issue 18, pp. 3865–3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865
12. Artacho E., Sanchez-Portal D., Ordejon P., Garcia A., Soler J.M. Linear-scaling *ab-initio* calculations for large and complex systems. *Physica Status Solidi B*, 1999, Vol. 215, Issue 1, pp. 809–817. DOI: 10.1002/(sici)1521-3951(199909)215:1<809::aid-pssb809>3.0.co;2-0
13. Rivero P., Garcia-Suarez V.M., Pereniguez D., Utt K., Yang Y.R., Bellaiche L., Park K., Ferrer J., Barraza-Lopez S. Systematic pseudopotentials from reference eigenvalue sets for DFT calculations: Pseudopotential files. *Data in Brief*, 2015, Vol. 3, pp. 21–23. DOI: 10.1016/j.dib.2014.12.005
14. Abinit's Fritz-Haber-Institute (FHI) pseudo database. <http://departments.icmab.es/leem/siesta/Databases/Pseudopotentials/periodictable-intro.html> (accessed 25.11.2018).
15. Kasatochkin V.I., Korshak V.V., Kudryavtsev Y.P., Sladkov A.M., Sterenberg I.E. Crystalline-structure of carbyne. *Carbon*, 1973, Vol. 11, Issue 1, pp. 70–72. DOI: 10.1016/0008-6223(73)90012-2
16. Anglada E., Soler J.M., Junquera J., Artacho E. Systematic generation of finite-range atomic basis sets for linear-scaling calculations. *Physical Review B*, 2002, Vol. 66, Issue 20, p. 4. DOI: 10.1103/PhysRevB.66.205101
17. Grimme S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *Journal of Computational Chemistry*, 2006, Vol. 27, Issue 15, pp. 1787–1799. DOI: 10.1002/jcc.20495
18. Henkelman G., Arnaldsson A., Jonsson H. A fast and robust algorithm for Bader decomposition of charge density. *Computational Materials Science*, 2006, Vol. 36, Issue 3, pp. 354–360. DOI: 10.1016/j.commatsci.2005.04.010

Received April 12, 2019

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ БАЗИСНОГО НАБОРА ДЛЯ DFT МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Е.В. Аникина¹, И.А. Балякин^{2,3}, В.П. Бескачко¹

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

² Институт химии твердого тела УРО РАН, г. Екатеринбург, Российская Федерация

³ Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Российская Федерация

E-mail: anikinaev@susu.ru

Атомноподобные базисные функции позволяют эффективно моделировать свойства поверхностей в рамках теории функционала электронной плотности. Однако в отличие от базисного набора из плоских волн атомноподобные орбитали требуют оптимизации на модельных системах перед расчетом интересующих свойств. В данной работе была рассмотрена процедура оптимизации атомноподобного базисного набора для расчетов в пакете SIESTA. Было показано, что при оптимизации следует не только минимизировать полную энергию модельной системы, но и отслеживать изменения других физических параметров (длин связей, зарядов атомов). Более того, в некоторых случаях оптимальные параметры базисного набора, необходимые для корректного описания модельной системы, не соответствуют минимуму полной энергии. Для демонстрации такого подхода были оптимизированы параметры валентных орбиталей для следующих систем: кристаллический карбид тантала TaC, молекула кислорода, кристаллический литий и α -карбин. На примере расчета адсорбции молекулы кислорода на поверхности карбида тантала и атома лития на карбине показано, что предложенный вариант оптимизации базиса играет существенную роль при оценке сорбционных свойств поверхностей.

Ключевые слова: теория функционала плотности; атомноподобный базисный набор; метод проекционных соединительных волн; адсорбция.

Литература

1. Jones, R.O. Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future / R.O. Jones // *Reviews of Modern Physics*. – 2015. – Vol. 87. – Issue 3. – P. 897–923.
2. The Computational 2D Materials Database: high-throughput modeling and discovery of atomically thin crystals / S. Hastrup, M. Strange, M. Pandey *et al.* // *2D Materials*. – 2018. – Т. 5, № 4. – С. 36.
3. Бажанова, З.Г. Поведение системы Fe–S при высоких давлениях и состав ядра Земли / З.Г. Бажанова, В.В. Ройзен, А.Р. Оганов // *УФН*. – 2017. – Т. 187, № 10. – С. 1105–1113.
4. Iterative minimization techniques for *ab initio* total-energy calculations – molecular-dynamics and conjugate gradients / M.C. Payne, M.P. Teter, D.C. Allan *et al.* // *Reviews of Modern Physics*. – 1992. – Vol. 64. – Issue 4. – P. 1045–1097.
5. Numerical atomic orbitals for linear-scaling calculations / J. Junquera, O. Paz, D. Sanchez-Portal *et al.* // *Physical Review B*. – 2001. – Vol. 64. – Issue 23. – P. 9.
6. Kurlov, A.S. Tungsten Carbides: Structure, Properties and Application in Hardmetals / A.S. Kurlov, A.I. Gusev. – Cham-Heidelberg-NY: Springer, 2013. – 242 с.
7. The SIESTA method for *ab initio* order-N materials simulation / J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale *et al.* // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2002. – Vol. 14, no. 11. – P. 2745.
8. Ordejon, P. Self-consistent order-N density-functional calculations for very large systems / P. Ordejon, E. Artacho, J.M. Soler // *Physical Review B*. – 1996. – Vol. 53, Issue 16. – P. 10441–10444.
9. Kresse, G. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmuller // *Physical Review B*. – 1996. – Vol. 54. – Issue 16. – P. 11169–11186.
10. Kresse, G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method / G. Kresse, D. Joubert // *Physical Review B*. – 1999. – Vol. 59. – Issue 3. – P. 1758–1775.

10. Kresse, G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method / G. Kresse, D. Joubert // *Physical Review B*. – 1999. – Vol. 59. – Issue 3. – P. 1758–1775.
11. Perdew, J.P. Generalized gradient approximation made simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Physical Review Letters*. – 1996. – Vol. 77. – Issue 18. – P. 3865–3868.
12. Linear-scaling ab-initio calculations for large and complex systems / E. Artacho, D. Sanchez-Portal, P. Ordejon *et al.* // *Physica Status Solidi B*. – 1999. – Vol. 215. – Issue 1. – P. 809–817.
13. Systematic pseudopotentials from reference eigenvalue sets for DFT calculations: Pseudopotential files / P. Rivero, V.M. Garcia-Suarez, D. Pereniguez *et al.* // *Data in Brief*. – 2015. – Vol. 3. – P. 21–23.
14. Abinit's Fritz-Haber-Institute (FHI) pseudo database. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://departments.icmab.es/leem/siesta/Databases/Pseudopotentials/periodictable-intro.html> (дата обращения: 25.11.2018.2018).
15. Crystalline-structure of carbene / V.I. Kasatochkin, V.V. Korshak, Y.P. Kudryavtsev *et al.* // *Carbon*. – 1973. – Vol. 11. – Issue 1. – P. 70–72.
16. Systematic generation of finite-range atomic basis sets for linear-scaling calculations / E. Anglada, J.M. Soler, J. Junquera *et al.* // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 66. – Issue 20. – P. 4.
17. Grimme, S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction / S. Grimme // *Journal of Computational Chemistry*. – 2006. – Vol. 27. – Issue 15. – P. 1787–1799.
18. Henkelman, G. A fast and robust algorithm for Bader decomposition of charge density / G. Henkelman, A. Arnaldsson, H. Jonsson // *Computational Materials Science*. – 2006. – Vol. 36. – Issue 3. – P. 354–360.

Поступила в редакцию 12 апреля 2019 г.

БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК В СПЛАВАХ Fe–Cr: МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ РЕШЕТОЧНОГО МОНТЕ-КАРЛО

Г.Д. Баирова, А.А. Мирзоев

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

E-mail: mirzoevaa@susu.ru

Проведено исследование ближнего порядка в сплавах Fe–Cr методом Монте-Карло. Моделирование проводилось в рамках алгоритма Метрополиса в программном пакете LAMMPS. Анализ данных моделирования осуществлялся с помощью программного обеспечения для визуализации и анализа данных Ovito. Модель сплава предполагает, что структура решетки фиксирована и что взаимодействия существуют между первыми соседями и вторыми соседями. Установлено взаимодействие Fe–Cr с применением потенциала межатомного взаимодействия Abell–Brenner–Tersoff (АВОР). Были изучены различные концентрации примесей внедрения хрома в железе, а именно 5–50 ат. %. Рассчитана энергия смешения системы Fe–Cr при различных концентрациях примесей внедрения. Расчеты показали, что выбранный потенциал взаимодействия верно воспроизводит изменения знака энергии смешения как функции концентрации Cr. При применении в кинетическом моделировании по методу Монте-Карло потенциал правильно предсказывает разложение первоначально случайных сплавов Fe–Cr в зависимости от концентрации Cr. Определен параметр ближнего порядка Каули, который используется для количественной оценки степени упорядочения. В соответствии с экспериментами наблюдается сильная тенденция упорядочения в распределении Cr при низких концентрациях, что проявляется в отрицательных значениях параметров ближнего порядка.

Ключевые слова: твердые растворы; моделирование Монте-Карло; энергия смешения; хром; ближний порядок.

Введение

Железо-хромистые стали вызывают значительный интерес в связи с широким использованием в промышленности и имеют большое технологическое значение благодаря своим превосходным свойствам. В частности, они используются в реакторных средах из-за их хорошей устойчивости к радиационному набуханию и коррозионной стойкости [1]. Структурное состояние материалов является важным фактором, определяющим их физические и химические свойства. Согласно существующим представлениям, важную роль в формировании физических и химических свойств в сплавах на основе железа играет наличие определенного типа ближнего порядка. Ближний порядок в сплавах зависит как от состава, так и режимов термообработки, а его определение возможно лишь в рамках микроскопического подхода, учитывающего особенности взаимодействий между атомами разных компонентов. К настоящему времени наиболее полно изучен ближний порядок в бинарной системе Fe–Cr. Первоначально фазовая диаграмма для этого сплава была оценена с использованием методологии CALPHAD. Было показано, что диаграмма имеет вид купола расслоения, верхняя точка которого лежит ниже 800 °С. Другими словами, теплота образования считалась положительной во всем диапазоне концентраций [2]. Прорыв в понимании микроструктуры этих сплавов был сделан с помощью нейтронографических измерений в 1984 году [3], которые показали отрицательность параметров ближнего порядка Каули примесей Cr, что указывает на их ближнее упорядочение при малых концентрациях, и инверсию знака этих параметров с увеличением концентрации Cr. Данные результаты затем были многократно проверены и уточнены [4]. Для прояснения атомистических деталей такого поведения этого сплава был предпринят ряд первопринципных исследований [5–7], посвященных расчету энергий взаимодействия между атомами компонентов. Было показано, что инверсия ближнего порядка в твердом растворе Fe–Cr связана с тем, что атомы Cr в матрице Fe отталкиваются при низкой концентрации, тогда как при высокой концентрации они притягиваются. Изменение знака взаимодействия имеет магнитную природу [6]. Обнаруженная особенность может лежать в основе ряда

механических и прочностных свойств ОЦК твердых растворов Fe–Cr. Например, большинство механических свойств данных растворов сильно немонокотны при изменении концентрации Cr, с заметным изменением поведения вблизи концентрации хрома $x = 0,1$. В то же время достижения в первопринципном моделировании энергий взаимодействий между атомами компонентов в системе Fe–Cr послужили основой для разработки точных моделей межатомного потенциала, которые позволяют широкомасштабное моделирование микроструктуры данных сплавов при различных значениях концентрации и температуры методом Монте-Карло и молекулярной динамики. Наиболее полное изучение температурной зависимости параметров ближнего порядка проведено в работе [7] с использованием EAM потенциалов. Однако следует отметить, что нержавеющие железо-хромистые стали, используемые в реальных условиях, соответствуют дополнительному введению некоторого количества углерода в базовый сплав Fe–Cr, в результате чего возникают более сложные типы микроструктуры стали. Вполне возможно, что добавки углерода могут существенно изменить картину ближнего порядка базовой системы. Это ставит задачу изучить ближний порядок в тройной системе Fe–Cr–C, а не просто полагаться на результаты, полученные для чисто металлической системы Fe–Cr. Для изучения тройной системы железо–хром–углерод в недавней работе [8] была предложена система новых межчастичных потенциалов, описывающих ковалентную природу углеродных связей ВОР-типа (*bond-order potential*) [9]. Прежде чем приступить к моделированию тройной системы, необходимо убедиться, что предлагаемые потенциалы способны правильно воспроизвести ближний порядок в базовой системе Fe–Cr. В связи с этим в данной работе проведено моделирование параметров ближнего порядка системы Fe–Cr на основе потенциалов работы [8]. Проводимое исследование ставит двоякую цель: с одной стороны, убедиться, что предлагаемые потенциалы позволяют правильно воспроизвести экспериментальные данные работы [3, 4], а во-вторых, изучить, насколько чувствительны результаты такого моделирования относительно выбора типа межчастичного потенциала.

Методы

Экспериментально установлено, что степень дальнего порядка не полностью определяет характер взаимного расположения атомов разного сорта по узлам кристаллической решетки. Энергия взаимодействия между атомами разного сорта разная, и поэтому каждый атом стремится окружить себя или атомами другого сорта, или одноименными атомами. Разница в энергии взаимодействия между атомами различного рода и одного вида может быть достаточной для того, чтобы соседи одного или другого рода находились вблизи каждого атома, даже если в твердом растворе нет дальнего порядка. Именно это распределение атомов называется ближним порядком.

Мера ближнего порядка – это отношение N_i^{AB} – числа атомов A и B , расположенных на расстоянии r_i к Nc_Ac_B , к числу пар атомов A и B , которые были бы на этом расстоянии с их полностью хаотичным расположением вдоль узлов решетки (здесь N – общее число атомов, c_i – количество узлов в i координационной сфере, c_A и c_B – концентрации атомов сорта A и B) [10].

Следовательно, параметром ближнего порядка в неупорядоченном твердом растворе для i -й координационной сферы называют величину, которую также называют параметрами порядка Каули:

$$\alpha_i = 1 - \frac{N_i^{AB}}{Nc_Ac_Bc_i} = 1 - \frac{P_i^{AB}}{c_B}, \quad (1)$$

где P_i^{AB} – вероятность нахождения атома B на i координационной сфере около атома A , находящегося в начале координат.

В предыдущих экспериментальных исследованиях ближнего порядка в Fe–Cr использовали параметр ближнего порядка, специфичный для ОЦК-решетки [3]. Этот параметр определяется как среднее по среднему значению параметров ближнего порядка, определенных для первой и второй соседних оболочек из (1):

$$\alpha_{1,2} = \frac{8a_1 + 6a_2}{14}, \quad (2)$$

где α_1 и α_2 – параметры ближнего порядка 1 и 2 координационных сфер соответственно. Для обеспечения согласованности с литературой и упрощения сравнения мы сосредоточимся на этом средневзвешенном параметре SRO.

Существуют определенные методы определения параметров ближнего порядка, к примеру, метод учета диффузного рассеяния рентгеновских лучей, связанного со статическими смещениями атомов-компонент твердых растворов, метод остаточного электросопротивления при изохронном отжиге [11]. В химически неупорядоченных бинарных сплавах для моделирования фазовых переходов упорядочения-разупорядочения для различных типов кристаллической решетки успешно применяется метод Монте-Карло, благодаря высокой скорости и большой емкости памяти в современных вычислительных машинах [12–14].

Идея метода Монте-Карло заключается в конструировании алгоритма, применяемого к выбранной системе атомов и позволяющего построить статистический ансамбль ее конфигураций, с больцмановским распределением по энергиям. Вместо прямой генерации случайных конфигураций, что является достаточно сложным делом, используется процедура перестановок атомов местами (алгоритм Метрополиса).

В предлагаемом нами подходе при моделировании системы Fe–Cr используется потенциал межатомного взаимодействия Abell–Brenner–Tersoff (ABOP). Применение этого потенциала обосновано тем, что еще в 2013 году группа финских ученых (К.О.Е. Henriksson, С. Vjorkas и К. Nordlund) в своей работе представили аналитическую параметризацию в форме Abell–Brenner–Tersoff для системы Fe–Cr–C. Потенциал воспроизвел параметр решетки, энергии формирования и упругие свойства основных карбидов Fe и Cr, была построена кривая энергии формирования Fe–Cr, при этом было достигнуто отличное согласование с предыдущими исследованиями и экспериментальными данными [8].

Моделирование проводилось методом Монте-Карло в рамках алгоритма Метрополиса в программном пакете LAMMPS. Анализ данных моделирования осуществлялся с помощью программного обеспечения для визуализации и анализа данных Ovito. Были использованы ячейки моделирования с $20 \times 20 \times 20$, $22 \times 22 \times 22$ ОЦК единичными ячейками, содержащими 16 000 и 21 296 атомов соответственно при температуре 700 К. Содержание хрома варьировалось от 5 до 50 атомных процентов. Начальная конфигурация задавалась случайным распределением атомов двух типов.

Энергия формирования системы Fe–Cr определялась выражением:

$$E_f = E_t(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x) - (N_{\text{Fe}}E_c(\text{Fe}) + N_{\text{Cr}}E_c(\text{Cr})) \quad (3)$$

где E_t – общая потенциальная энергия, N_{Fe} и N_{Cr} число атомов Fe и Cr соответственно, $E_c(\text{Fe})$ – энергия 1 атома Fe в ОЦК структуре, $E_c(\text{Cr})$ – энергия 1 атома Cr.

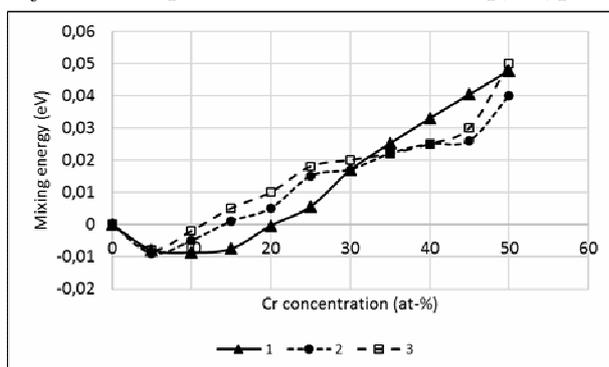


Рис. 1. Энергия формирования бинарного сплава Fe–Cr (ОЦК решетка, содержащая 21 296 атомов). 1 – результаты данной работы, 2 – результаты работы [8], 3 – результаты работы [5]

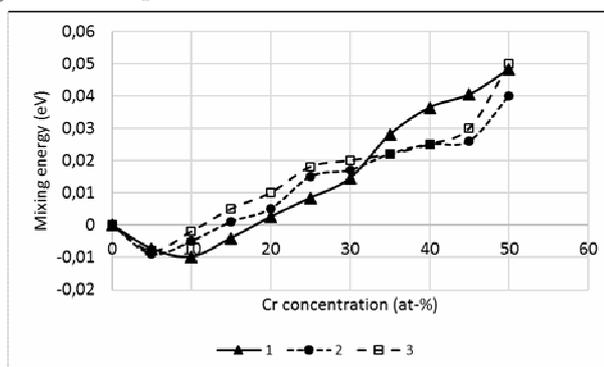


Рис. 2. Энергия формирования бинарного сплава Fe–Cr (ОЦК решетка, содержащая 16 000 атомов). 1 – результаты данной работы, 2 – результаты работы [8], 3 – результаты работы [5]

Результаты и обсуждение

Для проверки адекватности составленного потенциала и работоспособности программы было проведено моделирование структуры сплава Fe–Cr. Была рассчитана энергия формирования структуры и построена зависимость энергии формирования от концентрации Cr. На рис. 1 и 2

приведены графики зависимости энергии формирования для структуры, содержащей 21 296 и 16 000 атомов. Полученные результаты были сравнены с результатами работ [8] и [5], из графиков видно, что результаты воспроизводятся неплохо. Небольшое расхождение связано с тем, что моделирование в этих работах было проведено методами молекулярной динамики, в данной работе – методом Монте-Карло.

Таблица 1

Постоянная решетки и энергия когезии для чистого хрома			
величины	Вычисления [8]	Вычисления [5]	Данная работа
$a, \text{Å}$	2,872	2,878	2,873
$E_c(\text{Cr}), \text{eV/atom}$	-4,0994	-4,1	-4,095

В табл. 1 приведены данные для чистого Cr (параметр решетки и энергия когезии), которые также были сравнены с данными предыдущих работ.

Определение параметров ближнего порядка Каули

С помощью программного обеспечения Ovito были определены координационные числа для Fe и Cr по 1 и 2 координационным сферам и по формуле (1) рассчитаны параметры ближнего порядка для структуры, содержащей 21 296 и 16 000 атомов (табл. 2, 3). Также приведены рассчитанные из (2) средние значения параметров. На рис. 3 показана зависимость параметров ближнего порядка от концентрации, результаты расчетов данной работы сравниваются с результатами [3].

Из графика видно, что значение усредненного параметра ближнего порядка при концентрации Cr 5 ат. % близко к своему максимальному отрицательному значению и меняет знак примерно при концентрации Cr 11 ат. %.

Таблица 2

Значения параметров ближнего порядка для сплава Fe–Cr (21 296 атомов)			
	Fe–Cr, Cr 5 ат, %	Fe–Cr, Cr 10 ат, %	Fe–Cr, Cr 15 ат, %
α_1	-0,01349288	-0,007461376	0,002408333
α_2	-0,029393676	-0,028678848	0,179015983
$\alpha_{1,2}$	-0,020307507	-0,016554578	0,078097326

Таблица 3

Значения параметров ближнего порядка для сплава Fe–Cr (16 000 атомов)			
	Fe–Cr, Cr 5 ат, %	Fe–Cr, Cr 10 ат, %	Fe–Cr, Cr 15 ат, %
α_1	-0,011842879	-0,002258001	0,015275
α_2	-0,033326444	-0,034959427	0,146297094
$\alpha_{1,2}$	-0,021050122	-0,016272898	0,071427326

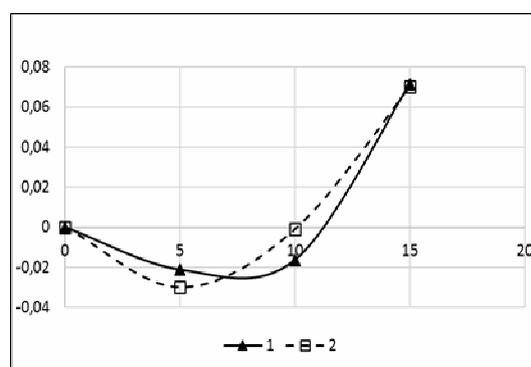
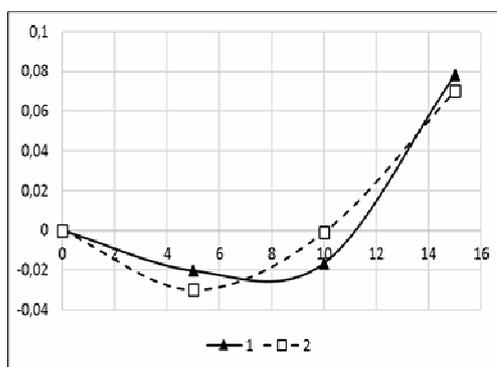


Рис. 3. Изменение среднего значения параметра ближнего порядка в зависимости от концентрации. 1 – данная работа, 2 – работа [3]; а) 21 296 атомов; б) 16 000 атомов

Позже благодаря оптимизации экспериментального оборудования были проведены улучшенные измерения, которые дали более точное определение параметров ближнего порядка. Было

определено, что усредненный параметр ближнего порядка меняет знак при концентрации Cr 11 ат. % [4]. Для сравнения с этими результатами было проведено моделирование Fe–Cr при 873 К (рис. 4).

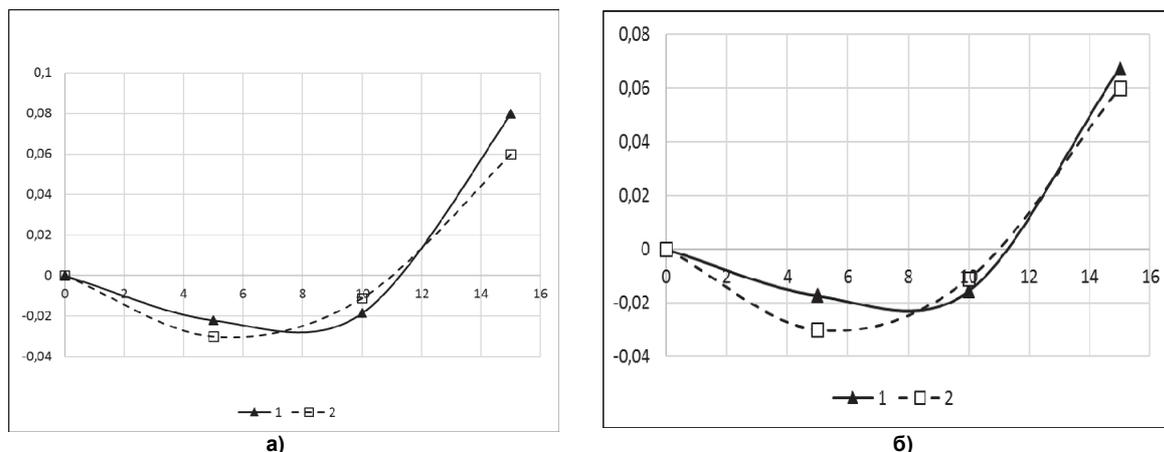


Рис. 4. Изменение среднего значения параметра ближнего порядка в зависимости от концентрации. 1 – данная работа, 2 – работа [4]; а) 16 000 атомов; б) 21 296 атомов

Как видим из рис. 4, концентрация инверсии при моделировании составила примерно 11,3 ат. %, что хорошо согласуется с экспериментальными данными [4].

Заключение

С использованием нового типа потенциалов межатомного взаимодействия (АВОР-потенциалов) проведено моделирование параметров ближнего порядка в бинарных сплавах Fe–Cr методом Монте-Карло. Проведено тестирование выбранного потенциала взаимодействия и используемой программы путем сравнения результатов с данными эксперимента [3, 4], а также с результатами моделирования с использованием потенциалов ЕАМ-типа [6]. Изучена зависимость средних значений параметров ближнего порядка для 1 и 2 координационных сфер от концентрации и температуры. Показано, что рассчитанные параметры ближнего порядка с небольшим расхождением совпадают с результатами работы [6], а также хорошо согласуются с данными эксперимента [3, 4].

Авторы благодарят Министерство науки и высшей школы за поддержку работы в рамках грантов №3.8385.2017/ВУ и 3.9660.2017/ВЧ.

Литература

1. Garner, F.A., Comparison of swelling and irradiation creep behavior of FCC-austenitic and BCC-ferritic/martensitic alloys at high neutron exposure / F.A. Garner, M.B. Toloczko, B.H. Sence // Journal of Nuclear Materials. – 2000. – Vol. 276. – Issues 1–3. – P. 123–142
2. Saunders, N. Thermodynamic Models for Solution and Compound Phases / N. Saunders, A.P. Miodownik // CALPHAD, Calculation of Phase Diagrams, A Comprehensive Guide, Pergamon Materials Series Vol. 1. – Elsevier Science Ltd, 1998. – P. 92.
3. Mirebeau, I. First measurement of short-range-order inversion as a function of concentration in a transition alloy / I. Mirebeau, M. Hennion, G. Parette // Phys. Rev. Lett. – 1984. – Vol. 53. – Issue 7. – P. 687–690.
4. Mirebeau, I. Neutron study of the short range order inversion in $Fe_{1-x}Cr_x$ / I. Mirebeau, G. Parette // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 82. – Issue 10. – P. 104203.
5. Olsson, P. Electronic origin of the anomalous stability of Fe-rich bcc Fe–Cr alloys / P. Olsson, I.A. Abrikosov, J. Wallenius // Phys. Rev. B. – 2006. – Vol. 73. – Issue 10. – P. 104416.
6. Мирзоев, А.А. Расчет энергии смешения сплавов Fe–Cr первопринципными методами компьютерного моделирования / А.А. Мирзоев, М.М. Ялалов, Д.А. Мирзаев // Физика металлов и металловедение. – 2004. – Т. 97, № 4. – С. 11–16.
7. Klaver, T.P.C. Magnetism and thermodynamics of defect-free Fe–Cr alloys / T.P.C. Klaver, R. Drautz, M.W. Finnis // Phys. Rev. – 2006. – Vol. 74. – Issue 9. – P. 094435.

8. Henriksson, K. Atomistic simulations of stainless steels: a many-body potential for the Fe–Cr–C system / K. Henriksson, C. Bjorkas, K. Nordlund // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2013. – Vol. 25, no. 44. – P. 445401.

9. Krasko, G.L. A bond-order potential for atomistic simulations in iron / G.L. Krasko, B. Rice, S. Yip // *Journal of Computer-Aided Materials Design*. – 1999. – Vol. 6. – Issue 2–3. – P. 129–136.

10. Иверонова, В.И. Ближний порядок в твердых растворах / В.И. Иверонова, А.А. Кацнельсон. – М.: Наука, 1977. – 255 с.

11. Силонов В.М. Ближний порядок и размерный эффект в металлических твердых растворах / В.М. Силонов // *Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии (РЭНСИТ)*. – 2011. – Т. 3, № 1. – С. 34–46.

12. Fosdick, L.D. Calculation of order parameters in a binary alloy by the Monte Carlo Method / L.D. Fosdick // *Phys. Rev.* – 1959. – Vol. 116. – Issue 3. – P. 565–573.

13. Flinn, P.A. Monte Carlo calculation of the order-disorder transformation in the body-centered cubic lattice / P.A. Flinn, G.M. McManus // *Phys. Rev.* – 1961. – Vol. 124. – Issue 1. – P. 54–59.

14. Мирзоев, А.А. Новая методика моделирования структуры ближнего порядка бинарных неупорядоченных систем в рамках метода сильной связи / А.А. Мирзоев, Н.А. Смолин, Б.Р. Гельчинский // *Известия Челябинского научного центра*. – 1998. – Вып. 2. – С. 21–26.

Поступила в редакцию 6 февраля 2019 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2019, vol. 11, no. 2, pp. 51–57*

DOI: 10.14529/mmph190207

SHORT-RANGE ORDER IN Fe–Cr ALLOYS: SIMULATION BY THE LATTICE MONTE CARLO METHOD

G.D. Bairova, A.A. Mirzoev

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: mirzoevaa@susu.ru

Short-range order in Fe–Cr alloys was studied by the Monte Carlo method. The simulation was carried out in the framework of the Metropolis algorithm in LAMMPS software package. Simulation data analysis was carried out using Ovito data visualization and analysis software. The alloy model assumes that the lattice structure is fixed and that interactions exist between the first neighbors and the second neighbors. The FeCr interaction was determined using the Abell–Brenner–Tersoff interatomic interaction potential (ABOP). Various admixture concentrations of chromium interstitial in iron have been studied, namely, 5–50 at. %. The mixing energy of the Fe–Cr system was calculated for various concentrations of interstitial impurities. Calculations showed that the chosen interaction potential correctly simulates changes in the sign of the mixing energy as a function of Cr concentration. When used in Monte Carlo kinetic modeling, the potential correctly predicts decomposition of initially random Fe–Cr alloys, depending on Cr concentration. The Cowley short-range order parameter, which is used for quantitative assessment of the degree of order, has been determined. According to experiments, there is a strong tendency of ordering in distribution of Cr at low concentrations, which becomes evident in negative values of the short-range order parameters.

Keywords: solid solutions; Monte Carlo simulation; mixing energy; chromium; short-range order.

References

1. Garner F.A., Toloczko M.B., Sence B.H. Comparison of swelling and irradiation creep behavior of fcc-austenitic and bcc-ferritic/martensitic alloys at high neutron exposure. *Journal of Nuclear Materials*, 2000, Vol. 276, Issues 1–3, pp. 123–142. DOI:10.1016/S0022-3115(99)00225-1

2. Saunders N., Miodownik A.P. Thermodynamic Models for Solution and Compound Phases. *CALPHAD, Calculation of Phase Diagrams, A Comprehensive Guide*, Pergamon Materials Series Vol. 1, Elsevier Science Ltd, 1998, p. 92. DOI: 10.1016/S1470-1804(13)60012-7

3. Mirebeau I., Hennion M., Parette G. First measurement of short-range-order inversion as a function of concentration in a transition alloy. *Phys. Rev. Lett.*, 1984, Vol. 53, Issue 7, pp. 687–690. DOI: 10.1103/PhysRevLett.53.687
4. Mirebeau I., Parette G. Neutron study of the short range order inversion in $\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x$. *Phys. Rev. B*, 2010, Vol. 82, Issue 10, p. 104203. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.104203
5. Olsson P., Abrikosov I.A., Wallenius J. Electronic origin of the anomalous stability of Fe-rich bcc Fe–Cr alloys. *Phys. Rev. B*, 2006, Vol. 73, Issue 10, p. 104416. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.104416
6. Mirzoev A.A., Yalalov M.M., Mirzaev D.A. Calculation of the energy of mixing for the Fe–Cr alloys by the first-principles methods of computer simulation. *The Physics of Metals and Metallography*, 2004, Vol. 97, no. 4, pp. 336–341. (in Russ.). DOI: 10.1134/s0031918x06040065
7. Klaver T.P.C., Drautz R., Finnis M.W. Magnetism and thermodynamics of defect-free Fe–Cr alloys. *Phys. Rev.*, 2006, Vol. 74, Issue 9, p. 094435. DOI: 10.1103/PhysRevB.74.094435
8. Henriksson K., Bjorkas C., Nordlund K. Atomistic simulations of stainless steels: a many-body potential for the Fe–Cr–C system. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2013, Vol. 25, no. 44, p. 445401. DOI: 10.1088/0953-8984/25/44/445401
9. Krasko G.L., Rice B., Yip S. A bond-order potential for atomistic simulations in iron. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 1999, Vol. 6, Issue 2–3, pp. 129–136. DOI:10.21236/ada382421
10. Iveronova V.I., Katsnel'son A.A. *Blizhniy poryadok v tverdykh rastvorakh* (Nearing order in solid solutions). Moscow, Nauka Publ., 1977, 255 p. (in Russ.).
11. Silonov V.M. *Radioelektronika. Nanosistemy. Informatsionnye tekhnologii*, 2011, Vol. 3, no. 1, pp. 34–46. (in Russ.).
12. Fosdick L.D. Calculation of order parameters in a binary alloy by the Monte Carlo Method. *Phys. Rev.*, 1959, Vol. 116, Issue 3, pp. 565–573. DOI: 10.1103/physrev.116.565
13. Flinn P.A., McManus G.M. Monte Carlo calculation of the order-disorder transformation in the body-centered cubic lattice. *Phys. Rev.*, 1961, Vol. 124, Issue 1, pp. 54–59. DOI: 10.1103/physrev.124.54
14. Mirzoev A.A., Smolin N.A., Gel'chinskiy B.R. Novaya metodika modelirovaniya struktury blizhnego poryadka binarnykh neuporyadochennykh sistem v ramkakh metoda sil'noy svyazi (A new method for modeling the structure of the nearing order of binary disordered systems in the framework of the tight coupling method). *Izvestiya Chelyabinskogo nauchnogo tsentra*, 1998, Issue 2, pp. 21–26. (in Russ.).

Received February 6, 2019

AB INITIO CALCULATION OF VACANCY FORMATION ENERGY IN ANTIPEROVSKITE Mn_3GaC

D.R. Baigutlin¹, M.A. Zagrebin^{1,2,*}, 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: d0nik1996@mail.ru

In this article, we presented the ab initio calculation of vacancy formation energy according to Schottky in the alloy Mn_3GaC . Calculations were carried out in the frameworks of the density functional theory (DFT), implemented in VASP software package. For approximation of the exchange-correlation functional, the generalized gradient approximation in the Perdew–Burke–Ernzerhof formulation was used. It was shown that for the alloy under research, the most energetically favorable formation of a vacancy is in the place of C atom; formation of vacancies in places of Mn atoms is also beneficial, whereas the Ga vacancies are energetically unfavorable. Also, the concentration of vacancies at a finite temperature was calculated. It was shown that Mn and C vacancies have almost identical equilibrium concentration at a nonzero temperature; at that, the concentration of Ga vacancies is negligibly small. In addition, elastic moduli for various magnetic orderings (ferromagnetic, noncollinear, and antiferromagnetic) in the alloy under research were calculated. Using the quasi-harmonic Debye model, the Helmholtz free energy curves were constructed. Using these curves, it was also shown that Schottky monovacancies do not destabilize the ferromagnetic phase. Stability of the ferromagnetic phase is due to the large contribution of magnetic entropy to the Helmholtz free energy for the alloy under research.

Keywords: vacancy; vacancy formation energy; Helmholtz free energy; ab initio.

1. Introduction

The ternary X_3YC carbide phases formed with the participation of d-metals VIIa-, VIIIa- subgroups (X) and non-transition elements IIb–VIb-subgroups (Y) have a simple cubic structure of antiperovskitetype [1]. Being in the high-temperature region of paramagnets of the type, a series of perovskite-like carbides undergoes tetragonal lattice distortions at low temperatures and exhibits magnetic properties that correspond to the formation of several possible types of magnetic structures.

Antiperovskite compounds of the Mn_3GaC type are interesting due to their relatively simple and stable cubic structure, numerous possible technological applications (sensors, microelectromechanical systems, storage devices, etc.) [2–6] and a wide range of properties such as: the giant magnetoresistance, magnetovolume effect, giant negative thermal expansion, magnetostriction. Moreover, this type of compounds can be used as a refrigerant for magnetic cooling devices [7], thanks to the presence of its magnetocaloric effect, which is observed around the magnetic phase transitions [8–12].

2. Computational details

The total energy of the studied alloy was calculated using the density functional theory implemented in the VASP [12, 13]. For approximation of exchange correlation potential was used the generalized gradient approximation (GGA) in the Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) formulation [13]. For VASP pseudopotentials we used the following electronic configurations: Mn($3p^6 3d^6 4s^1$), C($1s^1 2s^2 2p^2$), Ga($4d^{10} 4s^2 4p^1$). The kinetic energy cut-off was taken to be 500 eV. A Monkhorst-Pack grid was employed to sample the Brillouin zone [14]. Grid k -points $8 \times 8 \times 8$ was used.

In this paper, a defect of the vacancy type was considered. Calculations of the energy of the crystal containing the vacancy were performed on 90 atomic supercells. The super cell was obtained from the unit cell by means of translations (3 3 2). In this supercell, an atom (Mn, Ga or C) was removed near the center.

The defect formation energy is calculated with the following equations:

$$E_V = E_{def} - E_0 + n_{Mn}\mu_{Mn}^0 + n_{Ga}\mu_{Ga}^0 + n_C\mu_C^0. \quad (1)$$

E_V is the energy of the crystal containing the defect, E_0 is the energy of an ideal crystal, n_i is defect concentration for Mn, Ga, C, respectively, μ is chemical potential of an isolated atom. In order to study thermodynamical properties of materials studied under finite temperature and pressure, we applied the quasi-harmonic Debye model. Free energy was calculated using the equation:

$$F = E + F_{vib} - TS_{mix} - TS_{mag}, \quad (2)$$

where E is the total energy of the crystal, obtained by first-principle calculations, S_{mix} is mixing entropy, S_{mag} is magnetic entropy, F_{vib} is free energy of a crystal lattice. In this work we neglect the electronic contribution to free energy, due to its smallness. Magnetic and defect formation entropy was calculated by following equation:

$$S_{mix} = k_B C_v \ln(C_v) + k_B (1 - C_v) \ln(1 - C_v); \quad (3)$$

$$S_{mag} = k_B \ln(m + 1), \quad (4)$$

where m is the magnetic moment obtained in self-consistent calculations, k_B is Boltzmann constant, C_v is concentration of vacancy. Free energy of a crystal lattice includes zero-point energy and temperature dependent part according to:

$$F_{vib} = k_B T \left(\frac{9}{8} \frac{\Theta_D}{T} + 3 \ln \left(1 - e^{-\frac{\Theta_D}{T}} + D(T) \right) \right), \quad (5)$$

where Θ_D is Debye temperature, $D(T)$ is Debye function:

$$D\left(\frac{T}{\Theta_D}\right) = 3 \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx. \quad (6)$$

In order to calculate the Debye temperature, we used the quasi-harmonic Debye model [15], where the Debye temperature can be expressed as

$$\Theta_D = \frac{h}{2\pi k_B} \sqrt[3]{6\pi^2 \sqrt{V_0} n f(\sigma)} \sqrt{\frac{B}{M}}, \quad (7)$$

where k_B is the Boltzmann constant, V_0 is the equilibrium volume, n is the number of atoms per unit cell, B is the bulk modulus, M is the molar mass of compound. The function $f(\sigma)$ is given by

$$f(\sigma) = 3 \left[2 \left(\frac{2(1+\sigma)}{3-2\sigma} \right)^{3/2} + \left(\frac{1+\sigma}{3(1-\sigma)} \right)^{3/2} \right]^{-1}, \quad (8)$$

where σ is the Poisson's ratio.

3. Results and discussions

3.1. Properties of Mn₃GaC without defect

First, using ionic relaxation, we found the equilibrium lattice parameter, energy, and magnetic moment for various magnetic configurations shown in Fig. 1.

Table 1 shows the optimized lattice parameters, magnetic moments, and total energy for various magnetic states. For Mn₃GaC, the optimized lattice constant is found to be $\approx 3,824$ Å for favorable state and $\approx 3,862$ Å for noncolinear state that is slightly less than the experimental one by 1,5 % and 0,5 % respectively ($\approx 3,88$ Å [3, 7, 8]).

Table 1
Equilibrium energy per atom, magnetic moment per unit cell, and lattice parameter for Mn₃GaC

Magnetic configuration	Total energy, eV	Magnetic moment, μ_B	Equilibrium lattice parameter, Å
FM	-7,971	4,711	3,824
NC	-7,959	0,020	3,862
AFM	-7,947	0,000	3,803

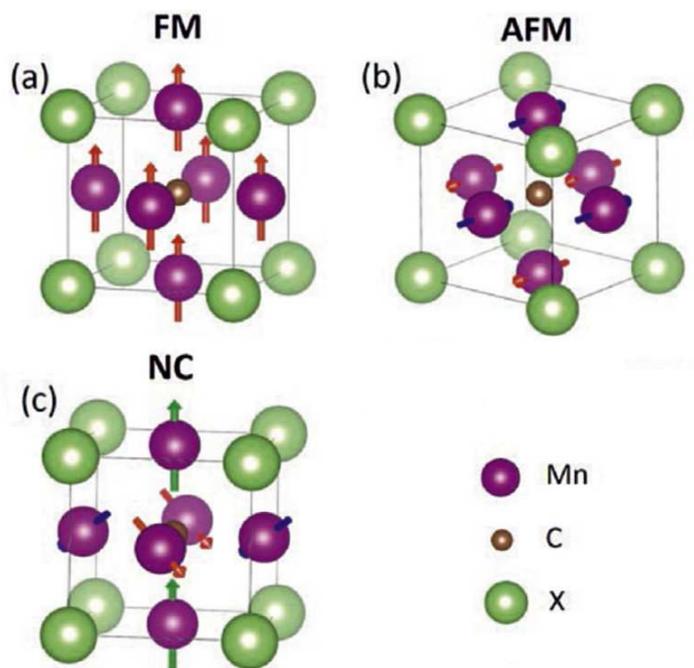


Fig. 1. Various spin configurations of Mn atoms were considered in the calculations: (a)FM, (b)AFM, (c)NC

Also, Poisson's coefficients, bulk elastic moduli and Debye temperatures, indicated in Table 2, was calculated for various magnetic orderings.

Table 2
Poisson's ratio, Young's modulus, and Debye temperature for various magnetic states

Magnetic configuration	ν	E , GPa	θ_D , K
FM	0,242	266,0	570,2
NC	0,284	179,5	465,3
AFM	0,277	286,6	584,4

3.2. Defect formation energy

The purpose of calculating the defect formation energy is to estimate the stability of the different kinds of vacancy in the parent phase in Mn_3GaC alloys.

The formation energy of a vacancy was estimated according to equation 1 and it is given in Table 3. It can be seen from this table the most likely formation of a vacancy in the position of the atom C. It is also likely the formation of a vacancy Mn atoms.

Table 3
The energy of the formation of a vacancy at the site of the atom Mn, Ga and C, respectively

	Mn	Ga	C
E_v , eV	0,625	0,692	0,604

Fig. 2 shows the temperature dependence of the concentration of vacancies per cell, this concentration was estimated using the equation:

$$C_v = Ne^{-\frac{E_v}{k_B T}}, \quad (9)$$

where N is number of atoms in a cell.

As can be seen from this figure, vacancies make a visible contribution to free energy starting at a temperature of 400 K. It can also be seen that Ga vacancies are formed significantly less than vacancies at C and Mn sites. Vacancies Mn and C make about the same contribution to the entropy of mixing.

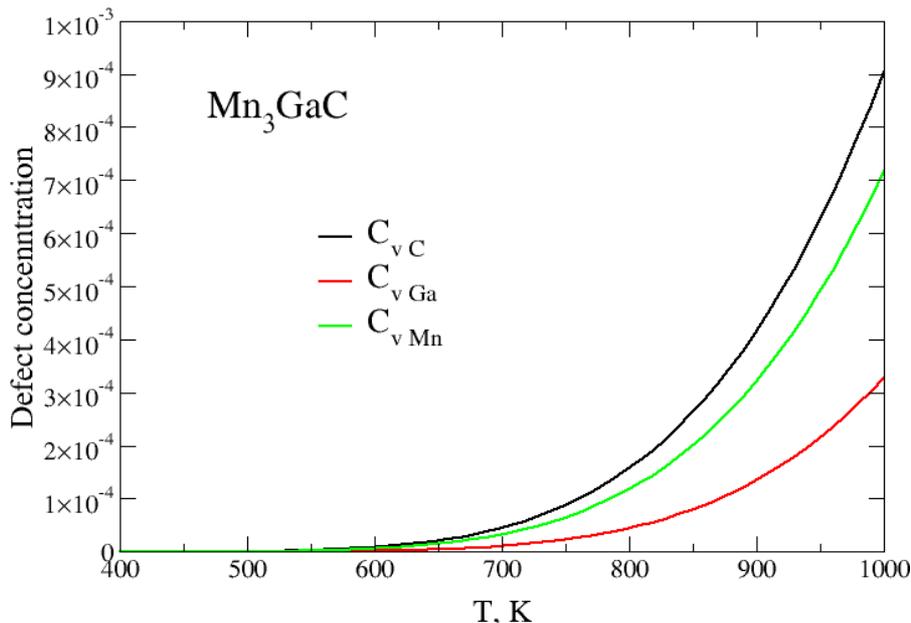


Fig. 2. Concentration of various types of vacancies in Mn_3GaC

3.3. Helmholtz free energy

To assess the stability of the various phases, the free energy of the compound under study was calculated. Figure 3 shows the dependence of the Helmholtz energy per atom versus temperature for various magnetic configurations. This graph demonstrates that monovacancies do not destabilize the FM phase in the temperature range under study. It is shown that the ferromagnetic configuration is advantageous in comparison with the antiferromagnetic and non-collinear configuration.

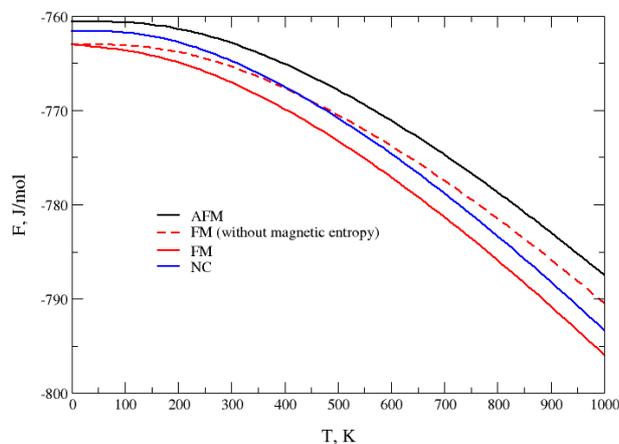


Fig. 3. Free energy for various magnetic configurations Mn_3GaC

4. Summary

Thermodynamic structural and magnetic properties were calculated for Mn_3GaC alloy within the density functional theory. Equilibrium lattice parameters, the magnetic moments, the Debye temperature, and the elastic constants are calculated for various magnetic orderings investigated alloy.

It is also shown that Schottky monovacancies do not destabilize the ferromagnetic phase. The stability of the ferromagnetic phase is due to the large contribution of magnetic entropy to free energy.

Acknowledgments

This work was supported by Russian Science Foundation grant No. 17-72-20022.

References

1. Goldschmidt H.J. *Alloys of Implantation*. Moscow, Mir Publ., 1971, Issue 1, 424 p.; Moscow, Mir Publ., 1971, Issue 2, 464 p. (in Russ.).
2. Fruchart D., Bertaut E.F. Magnetic Studies of the Metallic Perovskite-Type Compounds of Manganese. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1978, Vol. 44, no. 3, pp. 781–791. DOI: 10.1143/jpsj.44.781
3. Kaneko T., Kanomata T., Shirakawa K. Pressure Effect on the Magnetic Transition Temperatures in the Intermetallic Compounds Mn_3MC (M=Ga, Zn and Sn). *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1987, Vol. 56, no. 11, pp. 4047–4055. DOI: 10.1143/jpsj.56.4047
4. Harada T., Makabe T., Kanomata T., Kaneko T. Transport properties of the intermetallic compounds $Mn_3Ga_{1-x}Zn_xC$. *J. Magn. Magn. Mater.*, 1992, Vol. 104–107, part 3, pp. 1955–1956. DOI: /10.1016/0304-8853(92)91620-9
5. Kamishima K., Goto T., Nakagawa H., Miura N., Ohashi M., Mori N., Sasaki T., Kanomata T. Giant magnetoresistance in the intermetallic compound Mn_3GaC . *Phys. Rev. B.*, 2000, Vol. 63, p. 024426. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.024426
6. Takenaka K., Asano K., Misawa M., Takagi H. Negative thermal expansion in Ge-free antiperovskite manganese nitrides: Tin-doping effect. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, Vol. 92, p. 011927. DOI: 10.1063/1.2831715
7. Gschneidner K.A. (jr.), Pecharsky V.K., Tsokol A.O. Recent developments in magnetocaloric materials. *Rep. Prog. Phys.*, 2005, Vol. 68, no. 6, pp. 1479–1539. DOI: 10.1088/0034-4885/68/6/R04
8. Yu M.-H., Lewis L.H., Moodenbaugh A.R. Large magnetic entropy change in the metallic anti-perovskite Mn_3GaC . *J. Appl. Phys.*, 2003, Vol. 93, Issue 12, p. 10128. DOI: 10.1063/1.1574591
9. Çakır Ö., Acet M. Reversibility in the inverse magnetocaloric effect in Mn_3GaC studied by direct adiabatic temperature-change measurements. *Appl. Phys. Lett.*, 2012, Vol. 100, Issue 20, p. 202404. DOI: 10.1063/1.4717181
10. Çakır Ö., Acet M., Farle M., Senyshyn A. Neutron diffraction study of the magnetic-field-induced transition in Mn_3GaC . *J. Appl. Phys.*, 2014, Vol. 115, Issue 4, p. 043913. DOI: 10.1063/1.4862903
11. Dias E.T., Priolkar K.R., Nigam A.K., Singh R., Das A., Aquilanti G. Phase-separated magnetic ground state in $Mn_3Ga_{0.45}Sn_{0.55}C$. *Phys. Rev. B*, Vol. 95, p. 144418. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.144418
12. Dias E.T., Priolkar K.R., Çakır Ö., Acet M., Nigam A.K. Effect of composition on magnetocaloric properties of $Mn_3Ga_{(1-x)}Sn_xC$. *J. Appl. Phys.*, 2015, Vol. 117, Issue 12, p. 123901. DOI: 10.1063/1.4916095
13. Perdew J.P., Burke K., Enzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, Vol. 77, p. 3865. DOI: 10.1103/physrevlett.77.3865
14. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, 1976, Vol. 13, p. 5188. DOI: 10.1103/physrevb.13.5188
15. Blanco M.A., Francisco E., Luaña V. GIBBS: isothermal-isobaric thermodynamics of solids from energy curves using a quasi-harmonic Debye model. *Comput. Phys. Commun.*, 2004, Vol. 158, pp. 57–72. DOI: 10.1016/j.comphy.2003.12.001

Received March 21, 2019

УДК 538.91

DOI: 10.14529/mmph190208

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ФОРМИРОВАНИЯ ВАКАНСИЙ В АНТИПЕРОВСКИТЕ Mn_3GaC

Д.Р. Байгутлин¹, М.А. Загребин^{1,2,*}, 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: d0nik1996@mail.ru

В данной работе представлено первопринципное вычисление энергии образования вакансий по Шотки в сплаве Mn_3GaC . Вычисления проводились в рамках теории функционала плотности (DFT), реализованной в программном пакете VASP. Для аппроксимации обменно-корреляционного функционала использовалась обобщенная градиентная аппроксимация в формулировке Пердью–Бурке–Эйзенхофа. Показано, что в исследуемом сплаве наиболее энергетически выгодно образование вакансий на месте атома С, так же выгодно образование вакансий на местах атомов Mn, в то время как вакансии Ga являются энергетически невыгодными. Также вычислена концентрация вакансий при конечной температуре. Продемонстрировано, что вакансии Mn и С имеют практически одинаковую равновесную концентрацию при ненулевой температуре, при этом концентрация вакансий Ga пренебрежимо мала. Кроме того, рассчитаны модули упругости для различных магнитных упорядочений (ферромагнитное, неколлинеарное и антиферромагнитное) в исследуемом сплаве. Используя квазигармоническую модель Дебая, построены кривые свободной энергии Гельмгольца. Используя эти кривые, показано также, что моновакансии Шотки не дестабилизируют ферромагнитную фазу. Стабильность ферромагнитной фазы обусловлена наличием большого вклада магнитной энтропии в свободную энергию Гельмгольца для исследуемого сплава.

Ключевые слова: вакансия; энергия образования вакансий; энергия Гельмгольца; ab initio.

Литература

1. Гольдшмидт, Х.Дж. Сплавы внедрения / Х.Дж. Гольдшмидт. – М.: Мир, 1971. – Вып. 1. – 424 с.; М.: Мир, 1971. – Вып. 2. – 464 с.
2. Fruchart, D. Magnetic Studies of the Metallic Perovskite-Type Compounds of Manganese / D. Fruchart, E.F. Bertaut // Journal of the Physical Society of Japan. – 1978. – Vol. 44, no. 3. – P. 781–791.
3. Kaneko, T. Pressure Effect on the Magnetic Transition Temperatures in the Intermetallic Compounds Mn_3MC (M=Ga, Zn and Sn) / T. Kaneko, T. Kanomata, K. Shirakawa // Journal of the Physical Society of Japan. – 1987. – Vol. 56, no. 11. – P. 4047–4055.
4. Transport properties of the intermetallic compounds $Mn_3Ga_{1-x}Zn_xC$ / T. Harada, T. Makabe, T. Kanomata, T. Kaneko // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 1992. – Vol. 104–107. – Part 3. – P. 1955–1956.
5. Giant magnetoresistance in the intermetallic compound Mn_3GaC / K. Kamishima, T. Goto, H. Nakagawa *et al.* // Phys. Rev. B. – 2000. – Vol. 63. – P. 024426.
6. Negative thermal expansion in Ge-free antiperovskite manganese nitrides: Tin-doping effect / K. Takenaka, K. Asano, M. Misawa, H. Takagi // Appl. Phys. Lett. – 2008. – Vol. 92. – P. 011927.
7. Gschneidner Jr., K.A. Recent developments in magnetocaloric materials / K.A. Gschneidner Jr., V.K. Pecharsky, A.O. Tsokol // Rep. Prog. Phys. – 2005. – Vol. 68, no. 6. – P. 1479–1539.
8. Yu, M.-H. Large magnetic entropy change in the metallic antiperovskite Mn_3GaC / M.-H. Yu, L.H. Lewis, A.R. Moodenbaugh // J. Appl. Phys. – 2003. – Vol. 93. – Issue 12. – P. 10128.

9. Çakır Ö. Reversibility in the inverse magnetocaloric effect in Mn_3GaC studied by direct adiabatic temperature-change measurements / Ö. Çakır, M. Acet // *Appl. Phys. Lett.* – 2012. – Vol. 100. – Issue 20. – P. 202404.
10. Neutron diffraction study of the magnetic-field-induced transition in Mn_3GaC / Ö. Çakır, M. Acet, M. Farle, A. Senyshyn // *J. Appl. Phys.* – 2014. – Vol. 115. – Issue 4. – P. 043913.
11. Phase-separated magnetic ground state in $Mn_3Ga_{0.45}Sn_{0.55}C$ / E.T. Dias, K.R. Priolkar, A.K. Nigam *et al.* // *Phys. Rev. B.* – Vol. 95. – P. 144418.
12. Effect of composition on magnetocaloric properties of $Mn_3Ga_{(1-x)}Sn_xC$ / E.T. Dias, K.R. Priolkar, Ö. Çakır *et al.* // *J. Appl. Phys.* – 2015. – Vol. 117, Issue 12. – P. 123901.
13. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Enzerhof // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77. – P. 3865.
14. Monkhorst, H.J. Special points for Brillouin-zone integrations / H.J. Monkhorst, J.D. Pack // *Phys. Rev. B.* – 1976. – Vol. 13. – P. 5188.
15. Blanco, M.A. GIBBS: isothermal-isobaric thermodynamics of solids from energy curves using a quasi-harmonic Debye model / M.A. Blanco, E. Francisco, V. Luaña // *Computer Physics Communications.* – 2004. – Vol. 158. – P. 57–72.

Поступила в редакцию 21 марта 2019 г.

ФАЗООБРАЗОВАНИЕ, СТРУКТУРА И ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ АНТИМОНАТ-МОЛИБДАТОВ СЕРЕБРА

Ю.А. Лупицкая, Д.А. Калганов, Л.Ю. Коваленко,
Ф.А. Ярошенко, Ю.В. Антонова

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация
E-mail: lupitskaya@gmail.com

Методом твердофазной реакции синтезированы соединения на основе антимоната серебра, образующиеся при частичном замещении ионов пятивалентной сурьмы ионами шестивалентного молибдена. В широком температурном интервале от 300 до 1023 К изучены особенности процессов фазообразования смесей с различным мольным соотношением исходных компонентов системы, содержащей нитрат серебра, оксиды трехвалентной сурьмы и шестивалентного молибдена. С помощью данных термогравиметрического анализа установлены оптимальные температуры синтеза порошков. Методом качественного рентгенофазового анализа определены составы продуктов реакции твердофазного взаимодействия при различных изотермических выдержках. Для температуры 1023 К выявлена гомогенная область образования твердого раствора антимонат-молибдатов серебра со структурой типа дефектного пирохлора в концентрационном интервале $0,0 \leq x \leq 2,0$. В рамках пространственной группы $Fd-3m$ полнопрофильным анализом (методом Ритвельда) проведено уточнение кристаллической структуры (координаты заселенности ионов по кристаллографическим позициям, параметры элементарной ячейки) и установлена взаимосвязь состава полученных пирохлорных фаз со структурной разупорядоченностью. Методом диэлектрической спектроскопии в частотном диапазоне от 10 Гц до 2 МГц исследованы электропроводящие свойства антимонат-молибдатов серебра. Для керамических образцов, спеченных при 1373 К, определены относительная плотность и средний размер частиц.

Ключевые слова: фазообразование; антимонат серебра; твердые растворы; структура типа дефектного пирохлора; ионная проводимость; керамические материалы.

Введение

В настоящее время значительное внимание уделяется поиску новых катион- и анионпроводящих материалов [1–7], которые могли бы конкурировать с существующими на сегодняшний день традиционными твердыми электролитами. С этой точки зрения интерес представляют оксидные соединения, имеющие каркасное строение [4–7]. Такие материалы находят широкое практическое применение в качестве электролитов в различных электрохимических устройствах: топливных элементах, электролизерах водяного пара, сенсорах [3, 7].

Среди известных ионных проводников со структурой типа пирохлора следует выделить класс оксидов семейства $A_2B_2O_7$, характеризующихся примесной разупорядоченностью кристаллической решетки и высокими значениями электропроводности. Типичными представителями таких оксидных систем являются антимоматы одновалентных металлов MSb_3O_7 ($M^+ = Na, K, Ag$), получить которые можно путем твердофазного синтеза [3, 5]. Однако при нагревании соединения оказываются термически неустойчивыми – в системе протекают сложные окислительно-восстановительные процессы, сопровождающиеся изменением валентного состояния оксидов сурьмы, при этом образуются фазы различного состава и симметрии.

В [5–7], известно, что стабилизировать ажурный каркас (16с- и 48f- позиции) антимомагов, изоморфных пирохлору, и при этом получить фазы с максимальным содержанием дефектов в катионной подрешетке (16d- и 8b- позиции) можно путем гетеровалентного замещения ионов $Sb(V)$ на $Mo(VI)$ или $Sb(V)$ на $W(VI)$ в 16с-позициях структуры соответственно. Ввиду близких значений ионных радиусов катионов [3, 7] следует ожидать, что в широком концентрационном интервале образуются твердые растворы $Ag_{2-x}Sb_{2-x}M_xO_6$ ($M - Mo, W$), обладающие высокими значениями ионной проводимости.

В связи с этим целью работы явилось изучение особенностей процессов фазообразования в системе $\text{Ag}_2\text{O}-\text{Sb}_2\text{O}_3-\text{MoO}_3$ при нагревании, определение гомогенной области устойчивости антимонат-молибдатов серебра, изоморфных пирохлору, уточнение их кристаллической структуры по порошковым данным методом Ритвельда и исследование электропроводности синтезированных соединений в широком частотном и температурном интервалах.

Объекты и методы

Для синтеза антимонат-молибдатов серебра $\text{Ag}_{2-x}\text{Sb}_{2-x}\text{Mo}_x\text{O}_6$ ($0,0 \leq x \leq 2,0$) использовали предварительно просушенные оксиды Sb_2O_3 , MoO_3 квалификации «х.ч.» и азотнокислое серебро AgNO_3 квалификации «ч.д.а.». Приготовленные смеси в соответствии с заданными навесками исходных реагентов смешивали и тщательно перетирали в агатовой ступке с добавлением небольшого количества этилового спирта в течение длительного времени [6, 7].

Полученную спиртосодержащую шихту прессовали под давлением 50 МПа в виде цилиндрических образцов диаметром 8 мм и толщиной 1–3 мм [7] и прокаливали в муфельной печи при различных температурах в соответствии с данными термогравиметрического анализа [6, 7].

Контроль фазового состава образцов после каждой изотермической выдержки осуществляли с помощью рентгеновского аппарата ДРОН-3 (монохроматическое излучение) при комнатной температуре. Анализ рентгеновских дифрактограмм и уточнение кристаллической структуры соединений, характеризующихся пространственной группой $Fd-3m$, проводили методом Ритвельда [7].

Керамические образцы, изготовленные в виде таблеток, для исследований электропроводности получали путем прессования порошков с последующим спеканием при 1373 К в течение 6 ч. Определение электрических параметров полученных соединений проводили с помощью импедансметра Z-1500J (Elins, Russia) в интервале частот от 10 Гц до 2 МГц.

Анализ микроструктуры образцов и микрозондовый элементный анализ осуществляли с напылением на образцы тонкого проводящего слоя платины с помощью растрового электронного микроскопа JEOL JSM-6510A.

Результаты и обсуждение

Согласно [7], из данных термогравиметрического анализа следует, что процесс образования антимонат-молибдатов серебра характеризуется многоступенчатым изменением массы в исследуемом интервале температур 300–1023 К, что соответствует протеканию окислительно-восстановительных процессов в системе $\text{AgNO}_3-\text{Sb}_2\text{O}_3-\text{MoO}_3$ при твердофазном синтезе.

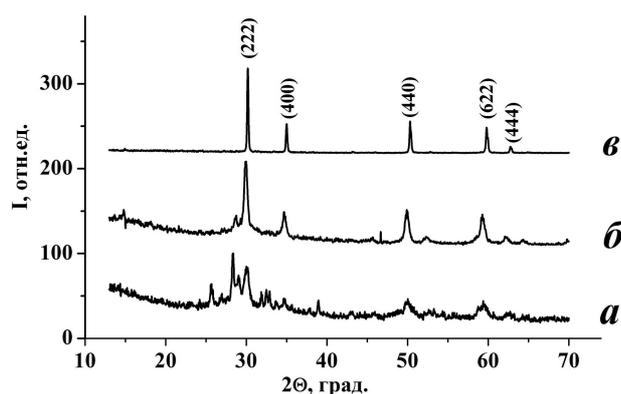


Рис. 1. Рентгенограммы соединений $\text{Ag}_{2-x}\text{Sb}_{2-x}\text{Mo}_x\text{O}_6$ ($0,0 \leq x \leq 2,0$), полученных в результате термообработки при 633 (а), 843 (б), 1023 К (в)

Анализ рентгеновских дифрактограмм позволил выявить сложный характер взаимодействия компонентов в исследуемых реакционных смесях. Так, рентгенограммы образцов (рис. 1), термообработанных при 633 К, содержат максимумы (рис. 1, а), принадлежащие оксидам Sb_2O_3 (сенармонтит), MoO_3 и фазам кубической сингонии (Ag_2MoO_4 и $\text{Sb}_2\text{Mo}_2\text{O}_{10}$), которые устойчивы

вплоть до 843 К, и только при дальнейшем повышении температуры полностью реагируют с образованием сложных оксидов пространственной группы $Fd\bar{3}m$ (Sb_6O_{13} и $AgSbO_3$) (рис. 1, б). Увеличение температуры в интервале от 969 до 1023 К приводит к образованию однофазных продуктов состава $Ag_{2-x}Sb_{2-x}Mo_xO_6$ с кубическим типом симметрии кристаллической решетки, на что указывает строго определенная последовательность ярко выраженных дифракционных максимумов (рис. 1, в), удовлетворительно описывающихся квадратичной формой кристаллов для пр. гр. $Fd\bar{3}m$ [5].

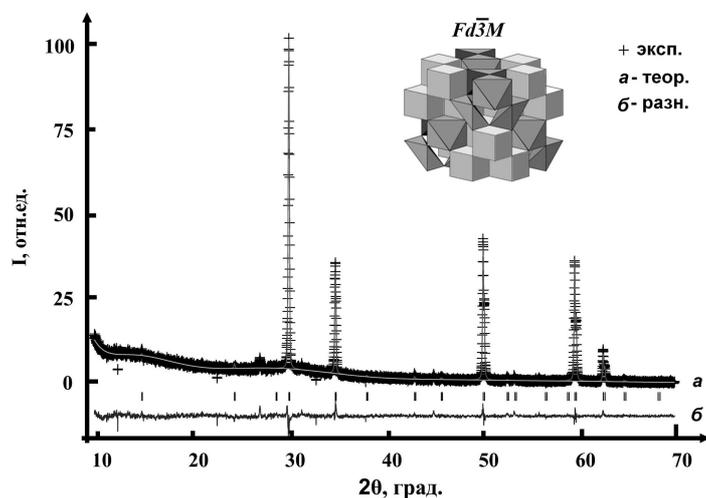


Рис. 2. Экспериментальная (+), теоретическая (а) и разностная (б) дифрактограммы образца состава $Ag_{1,10}Sb_{1,10}Mo_{0,90}O_6$

Таким образом, данные термогравиметрического и качественного рентгенофазового анализа позволили заключить, что гетеровалентное замещение ионов $Sb(V)$ на $Mo(VI)$ в антимолате $AgSbO_3$ путем твердофазного синтеза приводит к образованию широкой концентрационной области, в которой образуется твердый раствор состава $Ag_{2-x}Sb_{2-x}Mo_xO_6$ ($0,0 \leq x \leq 2,0$) со структурой типа дефектного пироклора.

По результатам рентгендифракционного анализа для фаз, кристаллизующихся в рамках пр. гр. $Fd\bar{3}m$, выявлен характер распределения ионов по кристаллографическим позициям структуры типа пироклора [7]. На рис. 2 наблюдается хорошее совпадение экспериментальной и расчетной рентгенограмм для соединения $Ag_{1,10}Sb_{1,10}Mo_{0,90}O_6$. В табл. приведены основные параметры уточнения кристаллической структуры антимолат-молибдатов серебра [7].

Результаты уточнения кристаллической структуры антимолат-молибдатов серебра [7]

Состав фазы	$a, \text{Å}$	$V_a, \text{Å}^3$	$R_p, \%$	$R_{wp}, \%$	χ^2
$Ag_2Sb_2O_6$	10,249	1076,575	8,7	9,1	1,56
$Ag_{1,85}Sb_{1,85}Mo_{0,15}O_6$	10,247	1075,945	10,3	10,5	1,58
$Ag_{1,70}Sb_{1,70}Mo_{0,30}O_6$	10,243	1074,686	10,1	11,0	1,63
$Ag_{1,55}Sb_{1,55}Mo_{0,45}O_6$	10,243	1074,686	9,8	10,4	1,65
$Ag_{1,40}Sb_{1,40}Mo_{0,60}O_6$	10,241	1074,056	9,7	10,4	1,77
$Ag_{1,25}Sb_{1,25}Mo_{0,75}O_6$	10,239	1073,427	8,9	9,0	1,59
$Ag_{1,10}Sb_{1,10}Mo_{0,90}O_6$	10,237	1072,798	8,7	9,0	1,57

В [3, 5, 7] отмечалось, что повысить устойчивость трехмерного каркаса, образованного из сочлененных вершинами $[BO_3]^{n-6}$ – октаэдров ($B(n)$ – элементы V, VI групп), в соединениях антимолат-вольфраматов одновалентных металлов при обязательном условии отсутствия регулярных дефектов в 16с- и 48f-позициях каркаса [5] можно путем введения ионов калия в катионную подрешетку (8b-позиции) структуры типа пироклора. При этом 16d-позиции остаются полностью или частично разупорядоченными [3], что позволяет ионам с небольшим ионным радиусом (Li^+ , Na^+) мигрировать по системе каналов (16d- и 8b-позиции) в направлении $\langle 111 \rangle$.

Следует полагать, что и в соединениях $Ag_{2-x}Sb_{2-x}Mo_xO_6$ механизм ионного транспорта сохраняется [7], однако ионы серебра не только участвуют в переносе электрического заряда, но и ста-

билизируют каркас структуры, статистически располагаясь в 16d-позициях, при этом 8b-позиции остаются вакантными.

Максимальные значения проводимости наблюдались у образцов состава $\text{Ag}_{1,55}\text{Sb}_{1,55}\text{Mo}_{0,45}\text{O}_6$ и во всем исследуемом частотном диапазоне превышали в два раза аналогичные значения для недопированного состава AgSbO_3 (рис. 3, а, б). Как видно из рис. 3, зависимость электропроводности керамических образцов с ростом частоты существенно не изменяется вплоть до некоторого значения, начиная с которого экспоненциально возрастает, что, по-видимому, соответствует межзеренному вкладу в общую проводимость. Полная проводимость образцов с ростом температуры увеличивается, а граничная частота смещается в область высоких частот. Возрастание проводимости во всем исследуемом температурном интервале при низких частотах обусловлено увеличением концентрации основных носителей заряда.

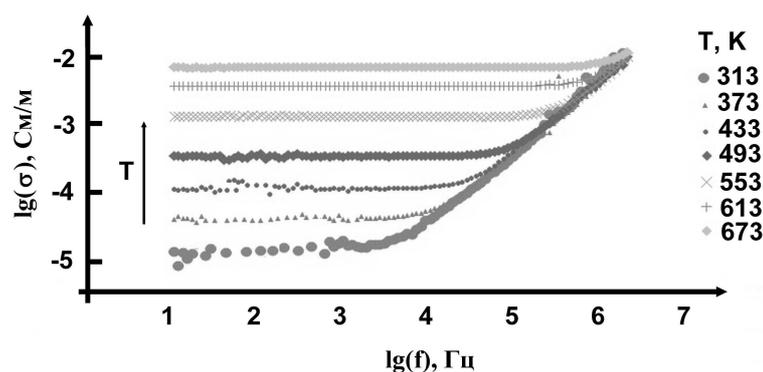


Рис. 3. Зависимость электропроводности образцов состава $\text{Ag}_{1,55}\text{Sb}_{1,55}\text{Mo}_{0,45}\text{O}_6$ от частоты и температуры

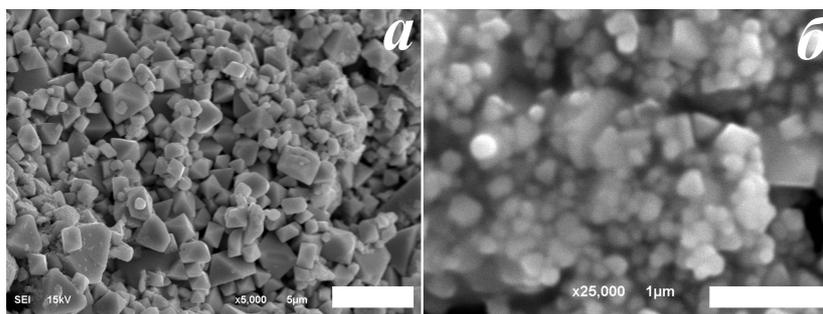


Рис. 4. Микрофотографии скола (а) и поверхности (б) образца $\text{Ag}_{1,10}\text{Sb}_{1,10}\text{Mo}_{0,90}\text{O}_6$, спеченного при 1373 К

На микрофотографиях скола (рис. 4, а) и поверхности (рис. 4, б) образцов, спеченных при 1373 К, наблюдаются агломерации частиц с размером 0,2–0,5 мкм. Микроструктура образца представлена частично расплавленными сросшимися многогранниками (рис. 4). Плотность исследуемых керамических образцов составила 88 %.

Заключение

Таким образом, в системе $\text{AgNO}_3\text{--Sb}_2\text{O}_3\text{--MoO}_3$ изучены особенности образования антимонат-молибдатов серебра при твердофазном синтезе. Для температуры 1023 К выявлена гомогенная область образования твердого раствора антимонат-молибдатов серебра $\text{Ag}_{2-x}\text{Sb}_{2-x}\text{Mo}_x\text{O}_6$ ($0,0 \leq x \leq 2,0$) со структурой типа дефектного пирохлора. На основании данных рентгенодифракционного анализа предложена модель распределения ионов по кристаллографическим позициям в рамках пр. гр. $Fd\text{-}3m$ и установлена взаимосвязь состава полученных пирохлорных фаз со структурной разупорядоченностью и их ионпроводящими свойствами. Для керамических образцов, спеченных при 1373 К, определены относительная плотность и средний размер частиц.

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-00269.

Литература

1. Стенина, И.А. Низко- и среднетемпературные протонпроводящие электролиты / И.А. Стенина, А.Б. Ярославцев // Неорганич. материалы. – 2017. – Т. 53, № 3. – С. 241–251.

2. Nikodemski, S. Solid-state reactive sintering mechanism for proton conducting ceramics / S. Nikodemski, J. Tong, R. O'Hayre // *Solid State Ionics*. – 2013. – Vol. 253. – P. 201–210.

3. Лулицкая, Ю.А. Ионная проводимость антимоноатов-вольфрамов калия с частичным замещением K^+ на Na^+ или Li^+ / Ю.А. Лулицкая, В.А. Бурмистров // *Неорган. материалы*. – 2013. – Т. 49, № 9. – С. 998–1002.

4. Синтез и ионная проводимость двойных молибдатов серебра-магния и серебра-кобальта / А.А. Ильина, И.А. Стенина, Г.В. Лысанова и др. // *Журн. неорган. химии*. – 2006. – Т. 51, № 6. – С. 960–965.

5. Бурмистров, В.А. Образование ионопроводящих фаз со структурой дефектного пироклора в системе $K_2O-Sb_2O_3-WO_3$ / В.А. Бурмистров, Д.А. Захарьевич // *Неорган. материалы*. – 2003. – Т. 39, № 1. – С. 77–80.

6. Лулицкая, Ю.А. Структура и ионная проводимость твердых растворов в системе $K_2CO_3-AgNO_3-Sb_2O_3-MeO_3$ ($Me = W, Mo$) / Ю.А. Лулицкая, В.А. Бурмистров, Д.А. Калганов // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. – 2015. – № 6. – С. 83–88.

7. Лулицкая, Ю.А. Образование соединений в системе $Ag_2O-Sb_2O_3-MoO_3$ при нагревании / Ю.А. Лулицкая, Д.А. Калганов, М.В. Ключева // *Неорган. материалы*. – 2018. – Т. 54, № 3. – С. 252–256.

Поступила в редакцию 12 апреля 2019 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2019, vol. 11, no. 2, pp. 65–70*

DOI: 10.14529/mmph190209

PHASE FORMATION, STRUCTURE AND ION CONDUCTIVITY OF SILVER ANTIMONATE-MOLIBDATS

Yu.A. Lupitskaya, D.A. Kalganov, L.Yu. Kovalenko, F.A. Yaroshenko, Yu.V. Antonova
Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: lupitskaya@gmail.com

Silver antimonate-based compounds, formed at partial substitution of ions of quinquevalent antimony with ions of hexavalent molybdenum, have been synthesized using the method of solid-phase reaction. Specificities of phase formation processes of mixtures with various mole ratios of the initial components of a system containing silver nitrate and oxides of trivalent antimony and hexavalent molybdenum have been studied in a wide temperature range from 300 to 1023 K. Using the thermogravimetric analysis data, optimal temperatures for synthesis of powders have been determined. Using the method of qualitative X-ray phase analysis together with the method of high-temperature X-ray diffraction, compositions of reaction products of solid-phase interaction at open air heating have been determined. For the temperature of 1023 K, a homogenous area of formation of a solid solution of silver antimonate-molibdates with the structure of a defective pyrochlore-type within $0,0 \leq x \leq 2,0$ concentration interval has been determined. In the frameworks of $Fd-3m$ spatial group, a full-profile analysis (the Rietveld method) has been carried out to specify the crystal structure (coordinates of population of ions by crystallographic positions, elementary cell parameters), and interrelation in compositions of the obtained pyrochlore phases with their structural disorder and ion-conducting properties has been determined. Ceramic properties (relative density and average size of particles) of the samples sintered at the temperature of 1373 K have been studied.

Keywords: phase formation; silver antimonate; solid solutions; defective pyrochlore-type structure; ion-conducting properties; ceramic properties.

References

1. Stenina I.A., Yaroslavtsev A.B. Low- and intermediate-temperature proton-conducting electrolytes. *Inorganic Materials*, 2017, Vol. 53, no. 3, pp. 253–262. DOI: 10.1134/S0020168517030104
2. Nikodemski S., Tong J., O'Hayre R. Solid-state reactive sintering mechanism for proton conducting ceramics. *Solid State Ionics*, 2013, Vol. 253, pp. 201–210. DOI: 10.1016/j.ssi.2013.09.025
3. Lupitskaya Y.A., Burmistrov V.A. Ionic conductivity of potassium antimonate tungstates with partial Na⁺ or Li⁺ substitution for K⁺. *Inorganic Materials*, 2013, Vol. 49, no. 9, pp. 930–934. DOI: 10.1134/s0020168513090082
4. П'ина А.А., Stenina I.A., Lysanova G.V., Yaroslavtsev A.B., Veresov A.G. Silver magnesium molybdate and silver cobalt molybdate: Synthesis and ionic conductivity. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2006, Vol. 51, no. 6, pp. 890–894. DOI: 10.1134/s0036023606060076
5. Burmistrov V.A., Zakhar'evich D.A. Ion-conducting defect pyrochlore phases in the K₂O–Sb₂O₃–WO₃ system. *Inorganic Materials*, 2003, Vol. 39, no. 1, p. 68–71.
6. Lupitskaya Yu.A., Burmistrov V.A., Kalganov D.A. Structure and Ionic Conductivity of Solid Solutions in the System K₂CO₃–AgNO₃–Sb₂O₃–MeO₃ (Me = W, Mo). *Journal of Surface Investigation X-ray Synchrotron and Neutron Techniques*, 2015, Vol. 9, no. 3, pp. 624–629. DOI: 10.1134/S1027451015030283
7. Lupitskaya Y.A., Kalganov D.A., Klyueva M.V. Formation of Compounds in the Ag₂O–Sb₂O₃–MoO₃ System on Heating. *Inorganic Materials*, 2018, Vol. 54, no. 3, pp. 240–244. DOI: 10.1134/s0020168518030081

Received April 12, 2019

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), 01.04.07 – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

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

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России», E29211 в Интернет-каталоге агентства «Книга-Сервис».

Периодичность выхода – 4 номера в год.

Адрес редакции, издателя: 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76, Издательский центр ЮУрГУ, каб. 32.

ВЕСТНИК
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
Серия
«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»
Том 11, № 2
2019

16+

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

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 22.04.2019. Дата выхода в свет 30.04.2019.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 8,37.

Тираж 500 экз. Заказ 106/231. Цена свободная.

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