

ВЕСТНИК



**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

**2021
Т. 13, № 1**

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

СЕРИЯ

**«МАТЕМАТИКА.
МЕХАНИКА.
ФИЗИКА»**

Решением ВАК России включен в Перечень рецензируемых научных изданий

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

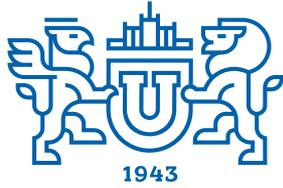
Основной целью серии «Математика. Механика. Физика» является публикация и распространение оригинальных результатов научных исследований в области математики, механики и физики, а также их приложений в естественных, технических и экономических науках.

Редакционная коллегия

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

Редакционный совет

д.т.н., профессор **Богомолов А.В.** (Государственный научный центр Российской Федерации – Федеральный медицинский биофизический центр имени А.И. Бурназяна, г. Москва)
д.ф.-м.н. **Бржезинская М.М.** (Берлинский центр материалов и энергии им. Гельмгольца, г. Берлин, Германия)
д.ф.-м.н., профессор **Бровко Г.Л.** (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.** (Университет Невады, г. Рино, США)
д.ф.-м.н., профессор **Зелик С.В.** (Университет Суррея, г. Гилфорд, Великобритания)
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** (Корейский институт передовых исследований KIAS, г. Сеул, Южная Корея)
Ph. D., профессор **Ким Кишик** (ИННА-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
SERIES

2021
Vol. 13, no. 1

“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
S.V. Zelik, University of Surrey, Guildford, United Kingdom
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, Russian Federation
I. Verpoest, Catholic University, Leuven, Belgium
V.A. Strauss, University of Simon Bolivar, Caracas, Venezuela

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

АДУКОВА Н.В., ДИЛЬМАН В.Л. Устойчивость факторизационных множителей канонической факторизации Винера–Хопфа матриц-функций	5
СУРИН В.А. Об обработке зашумленных контрастных изображений	14
УХОБОТОВ В.И., ЛИВАНОВ Н.Д. Об одной задаче управления движущейся тележкой с находящимся на ней упругим стержнем.....	22
УШАКОВ А.Л. Анализ смешанной краевой задачи для уравнения Пуассона.....	29

Физика

БЕЛЕНКОВ М.Е., ЧЕРНОВ В.М., БУТАКОВ А.В., БЕЛЕНКОВ Е.А. Структура и электронные свойства кристаллов 3-12 фторографена	41
KOSHKIN A.B., ZAGREBIN M.A., SOKOLOVSKIY V.V., BUCHELNIKOV V.D. First-Principles Studies of the Phase Transitions in Fe-Si Alloys	52
СИТДИКОВА Л.Ф., ГИМАЛТДИНОВ И.К. Задача о распространении акустических волн в пористой среде, насыщенной пузырьковой жидкостью	59

CONTENTS

Mathematics

ADUKOVA N.V., DILMAN V.L. Stability of Factorization Factors of the Canonical Factorization of Wiener–Hopf Matrix Functions.....	5
SURIN V.A. On Processing Noisy Contrast Images	14
UKHOBOTOV V.I., LIVANOV N.D. On a Problem of Controlling a Moving Cart with Elastic Rod.....	22
USHAKOV A.L. Analysis of the Mixed Boundary Value Problem for the Poisson’s Equation	29

Physics

BELENKOV M.E., CHERNOV V.M., BUTAKOV V.A., BELENKOV E.A. Structure and Electronic Properties of 3-12 Fluorographene Crystals	41
KOSHKIN A.B., ZAGREBIN M.A., SOKOLOVSKIY V.V., BUCHELNIKOV V.D. First-Principles Studies of the Phase Transitions in Fe-Si Alloys	52
SITDIKOVA L.F., GIMALTDINOV I.K. The Problem of the Propagation of Acoustic Waves in a Porous Environment Saturated with Bubble Liquid	59

УСТОЙЧИВОСТЬ ФАКТОРИЗАЦИОННЫХ МНОЖИТЕЛЕЙ КАНОНИЧЕСКОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ ВИНЕРА–ХОПФА МАТРИЦ- ФУНКЦИЙ

Н.В. Адукова, В.Л. Дильман

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

E-mail: adukovanv@susu.ru

Задача факторизации Винера–Хопфа матриц-функций является одной из самых востребованных задач математического анализа. Однако, ее применение сдерживается тем, что к настоящему времени в общем случае нет методов конструктивного построения факторизации. Кроме того, задача является, вообще говоря, неустойчивой, то есть малое возмущение исходной матрицы-функции может привести к изменению целочисленных инвариантов задачи (частных индексов), а факторизационные множители исходной и возмущенной матриц-функций могут быть не близкими. Это означает, что зависимость факторов от возмущения не является непрерывной. Положение осложняется тем, что факторизационные множители находятся неединственным образом, и потому перед сравнением факторизаций их требуется пронормировать. Эта задача также не решена в общем случае. В известной теореме М.А. Шубина проблема нормировки обходится следующим образом: в ней доказано, что если исходная и возмущенная матрицы-функции имеют одинаковые наборы частных индексов, то существуют их факторизации с близкими факторизационными множителями. Ясно, что в данном случае провести эффективную оценку степени их близости нельзя. В предлагаемой работе теорема М.А. Шубина уточняется для случая, когда исходная матрица-функция допускает каноническую факторизацию. В этом случае указано, как должны быть пронормированы канонические факторизации двух достаточно близких матриц-функций для того, чтобы их факторизационные множители также были достаточно близки. Главным результатом работы является получение явных оценок, в терминах факторизации исходной матрицы-функции, для абсолютной погрешности при приближенном вычислении факторов. Оценки получены с использованием техники теплицевых операторов.

Ключевые слова: факторизация Винера–Хопфа; матрица-функция; частные индексы; нормировка факторизации; непрерывность факторов; оценка погрешности.

Введение

Обозначим $W^{n \times n}$ – множество $n \times n$ матриц-функций, элементы которых принадлежат алгебре Винера W , то есть разлагается в абсолютно сходящийся комплексный ряд Фурье.

Тогда $W^{n \times n}$ состоит из тех матриц-функций $A(t)$, которые разлагаются в абсолютно сходящийся матричный ряд Фурье:

$$A(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} A_k t^k, A_k \in \mathbb{C}^{n \times n}, |t| = 1,$$

причем $\|A\|_W := \sum_{k=-\infty}^{\infty} \|A_k\| < \infty$. Здесь $\|A_k\|$ – любая операторная норма матриц.

$W^{n \times n}$ со стандартными операциями сложения и умножения матриц-функций, наделенное нормой $\|\cdot\|_W$, является банаховой алгеброй.

Определим два подмножества алгебры $W^{n \times n}$:

$$W_+^{n \times n} = \left\{ A_+(t) \in W^{n \times n} : A_+(t) = \sum_{k=0}^{\infty} A_k^+ t^k \right\}$$

и

$$W_-^{n \times n} = \left\{ A_-(t) \in W^{n \times n} : A_-(t) = \sum_{k=-\infty}^0 A_k^- t^k \right\}$$

– это замкнутые подалгебры $W^{n \times n}$ с единицей, которой является единичная матрица I_n .

Любая обратимая матрица-функция $A(t) \in W^{n \times n}$ допускает следующее представление:

$$A(t) = A_-(t)D(t)A_+(t), \quad |t|=1.$$

Здесь $A_-(t), A_-^{-1}(t) \in W_-^{n \times n}$, $A_+(t), A_+^{-1}(t) \in W_+^{n \times n}$, а $D(t)$ является диагональной матрицей-функцией вида

$$D(t) = \text{diag} \left[t^{\varkappa_1}, \dots, t^{\varkappa_n} \right], \quad \varkappa_j \in \mathbb{Z}.$$

Это представление называется *правой факторизацией Винера–Хопфа* $A(t)$ на единичной окружности, а целые числа $\varkappa_1, \dots, \varkappa_n$ называются *правыми частными индексами* $A(t)$.

Основные факты о факторизации приведены в [1], более общая постановка задачи дана в [2].

Задача факторизации Винера–Хопфа является одной из наиболее востребованных задач комплексного анализа. Она имеет многочисленные применения в задачах математической физики (дифракция волн, акустика, теория упругости, механика разрушения, геофизика) [3, 4], в теории дифференциальных уравнений (аналитическая теория, теория солитонов) [5] и математического анализа (системы уравнений Винера–Хопфа, системы сингулярных интегральных уравнений) [6, 7].

Основной проблемой, ограничивающей применение факторизации, является отсутствие в общем случае явных формул для частных индексов и факторов $A_{\pm}(t)$.

Известно, что частные индексы определяются однозначно матрицей-функцией $A(t)$, однако факторы $A_{\pm}(t)$ находятся не единственным образом (см. [1], гл. VIII, Теорема 1.1 и Теорема 1.2). Кроме того, частные индексы, вообще говоря, неустойчивы при малом возмущении матрицы-функции $A(t)$. Необходимым и достаточным условием устойчивости индексов является условие Гохберга–Крейна–Боярского

$$|\varkappa_n - \varkappa_1| \leq 1.$$

Поскольку неизвестно, как вычислять частные индексы, этот критерий не является эффективным. Также неизвестно как нормировать факторизацию, чтобы множители $A_{\pm}(t)$ находились единственным образом. Однако, если все частные индексы равны нулю (такая факторизация называется *канонической*), то такую нормировку можно провести: нужно, например, потребовать, чтобы $A_-(\infty) = A_0$, где A_0 – любая фиксированная обратимая матрица. Любая каноническая факторизация с таким условием будет определяться единственным образом. В настоящее время в общем случае не известно, когда матрица-функция допускает каноническую факторизацию. Однако для лорановских матричных многочленов имеется эффективный критерий существования канонической факторизации [8].

В силу неустойчивости частных индексов нельзя ожидать, что при достаточно малом возмущении матрицы-функции $A(t)$ факторы $A_{\pm}(t)$ будут также мало меняться. Однако, если наложить условие, что возмущенная матрица-функция $\tilde{A}(t)$ имеет те же частные индексы, что и $A(t)$, можно получить следующий результат, впервые отмеченный М.А. Шубиным [9]: для любого достаточно малого $\epsilon > 0$ можно указать такое $\delta > 0$, что при $\|A - \tilde{A}\|_W < \delta$ найдется факторизация $\tilde{A} = \tilde{A}_-(t)D(t)\tilde{A}_+(t)$, для которой справедливы неравенства

$$\|A_+(t) - \tilde{A}_+(t)\|_W < \epsilon \text{ и } \|A_-(t) - \tilde{A}_-(t)\|_W < \epsilon.$$

Здесь $\|\cdot\|_W$ – норма в банаховой алгебре $W^{n \times n}$. Мы привели этот результат в редакции близкой к формулировке Теоремы 6.15 (см. [2], гл. 6). Эта теорема очень важна, поскольку она показывает, что главной проблемой при решении неустойчивой задачи факторизации является задача устойчивого вычисления частных индексов.

Однако, для того чтобы вышеприведенный результат можно было применять при приближенном построении факторизации, нужно:

1) указать способ нормировки факторизации $A(t)$ и $\tilde{A}(t)$, которая гарантирует непрерывность факторов $A_{\pm}(t)$ при малом возмущении,

2) указать явные оценки абсолютных погрешностей $\|A_+ - \tilde{A}_+\|$, $\|A_- - \tilde{A}_-\|$, что позволит строить приближенно факторизацию $A(t)$ с гарантированной точностью.

В статье мы ответим на эти вопросы для случая канонической факторизации. Это удастся сделать потому, что для канонической факторизации частные индексы устойчивы при малом возмущении, и мы знаем, каким образом проводится нормировка этой факторизации.

1. Предварительные утверждения

В этом параграфе мы рассмотрим некоторые стандартные утверждения об оценке погрешности решений операторных уравнений в удобной для дальнейшего форме. Для полноты изложения приведем доказательства этих утверждений.

Пусть \mathcal{A} , $\tilde{\mathcal{A}}$ – линейные ограниченные операторы в банаховом пространстве X .

Рассмотрим в X операторные уравнения $\mathcal{A}x = b$ и $\tilde{\mathcal{A}}\tilde{x} = \tilde{b}$. Если \mathcal{A} – обратный оператор и возмущенный оператор $\tilde{\mathcal{A}}$ удовлетворяют неравенству

$$\|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\| < \frac{1}{\|\mathcal{A}^{-1}\|}, \quad (1)$$

то $\tilde{\mathcal{A}}$ также обратим и $x = \mathcal{A}^{-1}b$, $\tilde{x} = \tilde{\mathcal{A}}^{-1}\tilde{b}$ – единственные решения этих уравнений. Оценим абсолютную погрешность решения $\|x - \tilde{x}\|$ при замене уравнения $\mathcal{A}x = b$ возмущенным уравнением $\tilde{\mathcal{A}}\tilde{x} = \tilde{b}$.

Для получения более простых оценок можно потребовать выполнения более сильного условия $\|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\| < \frac{q}{\|\mathcal{A}^{-1}\|}$, для некоторого $0 < q < 1$. Чтобы не загромождать оценки мы возьмем $q = \frac{1}{2}$

и считаем, что справедливо неравенство

$$\|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\| < \frac{1}{2\|\mathcal{A}^{-1}\|}. \quad (2)$$

Прежде всего, получим формулу для $\tilde{\mathcal{A}}^{-1}$ и оценим норму этого оператора.

Лемма 1. Если $\|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\| < \frac{1}{2\|\mathcal{A}^{-1}\|}$, то оператор $\tilde{\mathcal{A}}$ обратим,

$$\tilde{\mathcal{A}}^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (\mathcal{A}^{-1}(\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}))^k \cdot \mathcal{A}^{-1} \quad (3)$$

и

$$\|\tilde{\mathcal{A}}^{-1}\| \leq 2\|\mathcal{A}^{-1}\|. \quad (4)$$

Доказательство. Справедливо равенство

$$\tilde{\mathcal{A}} = \mathcal{A} - (\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}) = \mathcal{A}(I - \mathcal{A}^{-1}(\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}})),$$

где $\|\mathcal{A}^{-1}(\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}})\| \leq \|\mathcal{A}^{-1}\| \|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\| < q < 1$.

Поэтому оператор $I - \mathcal{A}^{-1}(\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}})$ обратим и

$$(I - \mathcal{A}^{-1}(\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}))^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (\mathcal{A}^{-1}(\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}))^k.$$

Здесь ряд сходится абсолютно.

Таким образом, $\tilde{\mathcal{A}}$ обратим как произведение обратимых операторов и

$$\tilde{\mathcal{A}}^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (\mathcal{A}^{-1}(\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}))^k \cdot \mathcal{A}^{-1}.$$

В силу абсолютной сходимости ряда получаем

$$\|\tilde{\mathcal{A}}^{-1}\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} (\|\mathcal{A}^{-1}\| \|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\|)^k \cdot \|\mathcal{A}^{-1}\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^k} \|\mathcal{A}^{-1}\| = 2\|\mathcal{A}^{-1}\|. \quad \blacksquare$$

Замечание. Конечно же выбрав $\|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\|$ достаточно малым можно добиться, чтобы $\|\tilde{\mathcal{A}}^{-1}\|$ была сколь угодно близка к $\|\mathcal{A}^{-1}\|$.

Оценим теперь $\|\mathcal{A}^{-1} - \tilde{\mathcal{A}}^{-1}\|$.

Лемма 2. Если $\|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\| < \frac{1}{2\|\mathcal{A}^{-1}\|}$, то $\|\mathcal{A}^{-1} - \tilde{\mathcal{A}}^{-1}\| \leq 2\|\mathcal{A}^{-1}\|^2 \|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\|$.

Доказательство. Воспользовавшись формулой (3), получаем

$$\mathcal{A}^{-1} - \tilde{\mathcal{A}}^{-1} = \left(I - \sum_{k=0}^{\infty} (\mathcal{A}^{-1}(\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}))^k \right) \cdot \mathcal{A}^{-1} = \mathcal{A}^{-1}(\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}) \sum_{k=0}^{\infty} (\mathcal{A}^{-1}(\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}))^k \cdot \mathcal{A}^{-1}.$$

Поэтому, $\|\mathcal{A}^{-1} - \tilde{\mathcal{A}}^{-1}\| \leq \|\mathcal{A}^{-1}\|^2 \|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^k} = 2\|\mathcal{A}^{-1}\|^2 \|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\|.$ ■

Замечание. Утверждения лемм 1, 2 очевидным образом выполняются в любой банаховой алгебре. Теперь можно получить оценку абсолютной погрешности решения уравнения $\mathcal{A}x = b$.

Лемма 3. Если $\|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\| \leq \frac{1}{2\|\mathcal{A}^{-1}\|}$, то

$$\|x - \tilde{x}\| \leq 2\|\mathcal{A}^{-1}\|^2 \|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\| \|b\| + 2\|\mathcal{A}^{-1}\| \|b - \tilde{b}\|.$$

Доказательство. Так как $x - \tilde{x} = (\mathcal{A}^{-1} - \tilde{\mathcal{A}}^{-1})b + \tilde{\mathcal{A}}^{-1}(b - \tilde{b})$, то

$$\|x - \tilde{x}\| \leq \|\mathcal{A}^{-1} - \tilde{\mathcal{A}}^{-1}\| \|b\| + \|\tilde{\mathcal{A}}^{-1}\| \|b - \tilde{b}\|.$$

Воспользовавшись леммой 1 и леммой 2 получаем нужную оценку

$$\|x - \tilde{x}\| \leq 2\|\mathcal{A}^{-1}\|^2 \|\mathcal{A} - \tilde{\mathcal{A}}\| \|b\| + 2\|\mathcal{A}^{-1}\| \|b - \tilde{b}\|. \quad \blacksquare$$

Этот результат приведен без доказательства в [10] для случая матричных уравнений и любого q , $0 < q < 1$.

2. Непрерывность факторов канонической факторизации

В силу того, что факторизация Винера–Хопфа

$$A(t) = A_-(t)D(t)A_+(t), \quad |t|=1,$$

находится неединственным образом, в формулировке теоремы Шубина имеется некая неопределенность: не указано, как выбрать факторизацию близкой к $A(t)$ матрицы-функции $\tilde{A}(t)$ для того, чтобы получить факторизацию с близкими к $A_{\pm}(t)$ факторами.

Основной причиной этого пробела в теории факторизации является то, что к настоящему времени в общем случае нет условий нормировки факторизации, которые гарантировали бы ее единственность.

Однако в случае канонической факторизации

$$A(t) = A_-(t)A_+(t)$$

такие условия легко указать. Нетрудно проверить, что, например, нормировка

$$A_-(\infty) = A_0, \quad (5)$$

где A_0 – произвольная, наперед заданная обратимая матрица, позволяет найти каноническую факторизацию единственным образом.

Далее мы будем предполагать, что условие (5) с фиксированной матрицей A_0 выполнено. Обычно для получения оценок погрешностей при нахождении приближенной факторизации привлекается техника сингулярных интегральных операторов (например, см. [2], гл. 6).

Для факторизации в алгебре Винера $W^{n \times n}$ вместо сингулярных интегральных операторов можно использовать операторы Винера–Хопфа с матричным символом $A(t)$. Однако в нашем случае удобнее будет использовать вместо классического оператора Винера–Хопфа аналог такого оператора, определенный на банаховой подалгебре $W_+^{n \times n}$, рассматриваемой как банахово пространство.

Помимо $W_-^{n \times n}$ введем еще одно подмножество $W^{n \times n}$:

$$(W_-^{n \times n})_0 = \left\{ A_-(t) \in W_-^{n \times n} : A_-(t) = \sum_{k=-\infty}^{-1} A_k^- t^k \right\}.$$

Это банахова подалгебра $W^{n \times n}$ без единицы и $(W_-^{n \times n})_0 \cap W_+^{n \times n} = \emptyset$. Поэтому

$$W^{n \times n} = (W_-^{n \times n})_0 \oplus W_+^{n \times n},$$

то есть алгебра $W^{n \times n}$ является распадающейся.

Определим оператор проектирования $\mathcal{P}_+ : W^{n \times n} \rightarrow W_+^{n \times n}$, действующий по правилу

$$\mathcal{P}_+ \sum_{k=-\infty}^{\infty} A_k t^k = \sum_{k=0}^{\infty} A_k t^k.$$

Это линейный ограниченный оператор, причем $\|\mathcal{P}_+\| \leq 1$.

Пусть $A(t) \in W^{n \times n}$. На банаховом пространстве $W_+^{n \times n}$ определим оператор T_A , действующий в $W_+^{n \times n}$ по правилу

$$T_A X(t) = \mathcal{P}_+ A(t) X(t).$$

Очевидно, что T_A – линейный оператор и $\|T_A\| \leq \|A\|_W$. Оператор T_A обладает следующим легко проверяемым свойством частичной мультипликативности

$$T_{A_- A_+} = T_{A_-} T_{A_+}$$

при условии, что $A_{\pm} \in W_{\pm}^{n \times n}$. Отсюда следует, что оператор $T_{A_-} (T_{A_+})$ обратим тогда и только тогда, когда $A_-^{-1}(t) (A_+^{-1}(t) \in W_+^{n \times n})$, причем $T_{A_-}^{-1} = T_{A_-^{-1}} (T_{A_+}^{-1} = T_{A_+^{-1}})$.

Поэтому оператор T_A обратим тогда и только тогда, когда символ A допускает каноническую правую факторизацию Винера–Хопфа

$$A(t) = A_-(t)A_+(t),$$

где $A_{\pm}^{\pm 1}(t) \in W_{\pm}^{n \times n}$.

Теперь мы можем доказать основные результаты работы.

Теорема 1. Пусть $A(t) \in W^{n \times n}$ допускает каноническую факторизацию

$$A(t) = A_-(t)A_+(t), |t|=1,$$

факторизация нормирована условием $A_-(\infty) = A_0$, и матрица-функция $\tilde{A}(t) \in W^{n \times n}$ удовлетворяет неравенству

$$\|A - \tilde{A}\|_W \leq \frac{1}{2\|A_+^{-1}\|_W \|A_-^{-1}\|_W}, 0 < q < 1.$$

Тогда $\tilde{A}(t)$ – обратимая матрица-функция, допускающая каноническую факторизацию

$$\tilde{A}(t) = \tilde{A}_-(t)\tilde{A}_+(t), |t|=1.$$

Если эту факторизацию пронормировать условием $\tilde{A}_-(\infty) = A_0$, то справедлива оценка:

$$\|A_+^{-1} - \tilde{A}_+^{-1}\|_W \leq 2\|A_+^{-1}\|_W^2 \|A_-^{-1}\|_W^2 \|A_0\| \|A - \tilde{A}\|_W.$$

Доказательство. Поскольку $\|A^{-1}\|_W \leq \|A_+^{-1}\|_W \|A_-^{-1}\|_W$, то $\frac{1}{2\|A_+^{-1}\|_W \|A_-^{-1}\|_W} \leq \frac{1}{2\|A^{-1}\|_W}$, то есть

$\|A - \tilde{A}\|_W < \frac{1}{2\|A^{-1}\|_W}$ и поэтому \tilde{A} – обратимая матрица-функция.

Докажем, что \tilde{A} допускает каноническую факторизацию. Поскольку

$$\|T_A - T_{\tilde{A}}\| \leq \|A - \tilde{A}\|_W < \frac{1}{2\|A_+^{-1}\|_W \|A_-^{-1}\|_W} \tag{6}$$

и T_A обратим, причем $T_A^{-1} = T_{A_+^{-1}} T_{A_-^{-1}}$, то $\|T_A^{-1}\| \leq \|T_{A_+^{-1}}\| \|T_{A_-^{-1}}\| \leq \|A_+^{-1}\|_W \|A_-^{-1}\|_W$.

Значит, $\frac{1}{2\|A_+^{-1}\|_W \|A_-^{-1}\|_W} \leq \frac{1}{2\|T_A^{-1}\|}$.

Из неравенства (6) следует тогда, что оператор $T_{\tilde{A}}$ обратим и поэтому \tilde{A} допускает каноническую факторизацию $\tilde{A} = \tilde{A}_- \tilde{A}_+$.

Рассмотрим теперь операторные уравнения $T_A X = A_0$ и $T_{\tilde{A}} \tilde{X} = A_0$, которые имеют единственные решения. Нетрудно видеть, что это будут матрицы-функции $X = A_+^{-1}$ и $\tilde{X} = \tilde{A}_+^{-1}$ из $W_+^{n \times n}$.

В самом деле, $T_A A_+^{-1} = T_- T_{A_+} A_+^{-1} = \mathcal{P}_+ A_- \mathcal{P}_+ A_+ A_+^{-1} = \mathcal{P}_+ A_- I_n = \mathcal{P}_+ A_- = A_-(\infty) = A_0$.

Применим теперь к этим решениям лемму 3

$$\|A_+^{-1} - \tilde{A}_+^{-1}\|_W \leq 2\|T_A^{-1}\|^2 \|T_A - T_{\tilde{A}}\| \|A_0\|.$$

Поскольку, как уже отмечалось $\|T_A^{-1}\| \leq \|A_+^{-1}\|_W \|A_-^{-1}\|_W$, то получаем

$$\|A_+^{-1} - \tilde{A}_+^{-1}\|_W \leq 2\|A_+^{-1}\|_W^2 \|A_-^{-1}\|_W^2 \|A_0\| \|A - \tilde{A}\|_W.$$

Необходимая оценка получена. ■

Теперь мы можем доказать непрерывность фактора A_- .

Теорема 2. Пусть $A(t) \in W^{n \times n}$ допускает каноническую факторизацию

$$A(t) = A_-(t)A_+(t), |t|=1,$$

где $A_-(\infty) = A_0$.

Если $\|A - \tilde{A}\|_W \leq \min \left\{ \frac{1}{2\|A_+^{-1}\|_W \|A_-^{-1}\|_W}, \|A\|_W \right\}$, то для фактора $\tilde{A}_-(t)$ канонической факторизации

$\tilde{A}(t) = \tilde{A}_-(t)\tilde{A}_+(t)$, нормированной условием $\tilde{A}_- = A_0$ справедливо неравенство

$$\|A_-(t) - \tilde{A}_-(t)\| < \left(\|A_+^{-1}\|_W + 4\|A\|_W \|A_+^{-1}\|_W^2 \|A_-^{-1}\|_W^2 \|A_0\| \right) \|A - \tilde{A}\|_W.$$

Доказательство. Условие $\|A - \tilde{A}\|_W < \frac{1}{2\|A_+^{-1}\|_W \|A_-^{-1}\|_W}$ в силу теоремы 1 обеспечивает суще-

ствование канонической факторизации $\tilde{A}_-(t)$. Из канонических факторизаций $A(t) = A_-(t)A_+(t)$, $\tilde{A}(t) = \tilde{A}_-(t)\tilde{A}_+(t)$ следует $A_- - \tilde{A}_- = (A - \tilde{A})A_+^{-1} + \tilde{A}(A_+^{-1} - \tilde{A}_+^{-1})$.

Поэтому

$$\|A_- - \tilde{A}_-\|_W \leq \|A_+^{-1}\|_W \|A - \tilde{A}\|_W + \|\tilde{A}\|_W \|A_+^{-1} - \tilde{A}_+^{-1}\|_W.$$

Поскольку

$$\|\tilde{A}\|_W \leq \|A\|_W + \|A - \tilde{A}\|_W \leq 2\|A\|_W$$

из теоремы 1 $\|A_+^{-1} - \tilde{A}_+^{-1}\|_W < 2\|A_+^{-1}\|_W^2 \|A_-^{-1}\|_W^2 \|A_0\| \|A - \tilde{A}\|_W$, то

$$\|A_- - \tilde{A}_-\|_W \leq \left(\|A_+^{-1}\|_W + 4\|A\|_W \|A_+^{-1}\|_W^2 \|A_-^{-1}\|_W^2 \|A_0\| \right) \|A - \tilde{A}\|_W. \quad \blacksquare$$

Наконец, докажем непрерывность фактора $A_+(t)$ при малом возмущении $A(t)$.

Теорема 3. Пусть $A(t) \in W^{n \times n}$ допускает каноническую факторизацию $A(t) = A_-(t)A_+(t)$, $A_-(\infty) = A_0$.

Если

$$\|A - \tilde{A}\|_W \leq \min \left\{ \frac{1}{2\|A_+^{-1}\|_W \|A_-^{-1}\|_W}, \frac{1}{4\|A_+\|_W \|A_+^{-1}\|_W^2 \|A_-^{-1}\|_W^2 \|A_0\|} \right\}, \quad (7)$$

то для фактора $\tilde{A}_+(t)$ канонической факторизации $\tilde{A}(t) = \tilde{A}_-(t)\tilde{A}_+(t)$ справедливо неравенство

$$\|A_+ - \tilde{A}_+\|_W \leq 4\|A_+\|_W^2 \|A_+^{-1}\|_W^2 \|A_-^{-1}\|_W^2 \|A_0\| \|A - \tilde{A}\|_W.$$

Доказательство. Условие $\|A - \tilde{A}\|_W \leq \frac{1}{2\|A_+^{-1}\|_W \|A_-^{-1}\|_W}$ гарантирует по теореме 1 существование

канонической факторизации $\tilde{A}(t)$. Кроме того, в силу этой теоремы $\|A_+^{-1} - \tilde{A}_+^{-1}\|_W \leq 2\|A_+^{-1}\|_W^2 \|A_-^{-1}\|_W^2 \|A_0\| \|A - \tilde{A}\|_W$. Таким образом, из (7) получаем

$$\|A_+^{-1} - \tilde{A}_+^{-1}\|_W \leq \frac{1}{2\|A_+\|_W}.$$

Применим лемму 2 к $\mathcal{A} = A_+^{-1}(t)$ из банаховой алгебры $W_+^{n \times n}$. Тогда

$$\|A_+ - \tilde{A}_+\|_W \leq 2\|A_+\|_W^2 \|A_+^{-1} - \tilde{A}_+^{-1}\|_W \leq 4\|A_+\|_W^2 \|A_+^{-1}\|_W^2 \|A_-^{-1}\|_W^2 \|A_0\| \|A - \tilde{A}\|_W. \quad \blacksquare$$

Итак, мы получили явные оценки для абсолютных погрешностей $\|A_+ - \tilde{A}_+\|_W$ и $\|A_- - \tilde{A}_-\|_W$ в терминах канонических факторизаций исходной матрицы-функции $A(t)$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Челябинской области в рамках научного проекта № 20-41-000001.

Литература

1. Гохберг, И.Ц. Уравнения в свертках и проекционные методы их решения / И.Ц. Гохберг, И.А. Фельдман. – М: Наука, 1971. – 352 с.
2. Litvinchuk, G.S. Factorization of Measurable Matrix Functions / G.S. Litvinchuk, I.M. Spitkovsky. – Birkhauser, Basel-Boston, 1987. – 372 p.
3. Daniele, V.G. The Wiener–Hopf Method in Electromagnetics / V.G. Daniele, R.S. Zich. – ISMB Series. New York: SciTech Publishing, Edison, 2014. – 384 p.
4. Lawrie, J.B. A Brief Historical Perspective of the Wiener–Hopf Technique / J.B. Lawrie, I.D. Abrahams // Journal of Engineering Mathematics. – 2007. – Vol. 59. – P. 351–358.
5. Тахтаджян, Л.А. Гамильтонов подход в теории солитонов / Л.А. Тахтаджян, Л.Д. Фадеев. – М: Наука, 1986. – 527 с.
6. Гохберг, И.Ц. Системы интегральных уравнений на полупрямой с ядрами, зависящими от разности аргументов / И.Ц. Гохберг, М.Г. Крейн // УМН. – 1958. – Т. 13. – Вып. 2(80). – С. 3–72.
7. Векуа, Н.П. Системы сингулярных интегральных уравнений и некоторые граничные задачи / Н.П. Векуа. – М.: Наука, 1970. – 379 с.
8. Adukova, N.V. On Effective Criterion of Stability of Partial Indices for Matrix Polynomials / N.V. Adukova, V.M. Adukov // Proc. R. Soc. A. – 2020. – Vol. 476, Iss. 2238. – 20200012.
9. Шубин, М.А. Факторизация зависящих от параметра матриц–функций в нормированных кольцах и связанные с ней вопросы теории нетеровых операторов / М.А. Шубин // Матем. сб. – 1967. – Т. 73(115), № 4. – С. 610–629.
10. Adukov, V.M. Algorithm of Polynomial Factorization and its Implementation in Maple / V.M. Adukov // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2018. – Т. 11, № 4. – С. 110–122.

Поступила в редакцию 19 января 2021 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series “Mathematics. Mechanics. Physics”
2021, vol. 13, no. 1, pp. 5–13*

DOI: 10.14529/mmph210101

STABILITY OF FACTORIZATION FACTORS OF THE CANONICAL FACTORIZATION OF WIENER–HOPF MATRIX FUNCTIONS

N.V. Adukova, V.L. Dilman

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: adukovanv@susu.ru

The problem of Wiener–Hopf factorization of matrix functions is one of the most demanded problems of mathematical analysis. However, its application is constrained by the fact that at the present time, there are no methods for constructively constructing factorization in the general case. In addition, the problem is far and by unstable, that is, a small perturbation of the original matrix function can lead to a change in the integer invariants of the problem (partial indices), and the factorization factors of the original and perturbed matrix functions may not be close. This means that the dependence of factors on perturbation is not continuous. The situation is complicated by the fact that factorization factors are found in a non-unique way, and therefore, before comparing factorizations, they need to be normalized. This problem is also not solved in the general case. In the well-known theorem of M.A. Shubin, the normalization problem is bypassed in the following way: it is proved that if the original and perturbed matrix functions have the same sets of partial indices, then their factorizations with close factorization factors exist. It is clear that in this case it is impossible to assess the degree of their proximity efficiently. In the proposed work, the theorem of M.A. Shubin is refined for the case when the original matrix function admits a canonical factorization. In this case, it is indicated how the canonical factorizations of two sufficiently close matrix functions should be normalized so that their factorization factors are also close enough. The main result of the work is to obtain explicit estimates, in terms of factorization of the origi-

nal matrix function, for the absolute error in the approximate calculation of factors. The estimates are obtained by using the Toeplitz operator technique.

Keywords: Wiener–Hopf factorization; matrix functions; partial indices; normalization of factorization; continuity of factors; error estimation.

References

1. Gokhberg I.Ts., Fel'dman I.A. *Uravneniya v svertkakh i proektsionnye metody ikh resheniya* (Convolution Equations and Projection Methods for Their Solution). Moscow, Nauka Publ., 1971, 352 p. (in Russ.).
2. Litvinchuk G.S., Spitkovsky I.M. *Factorization of measurable matrix functions*. Birkhauser, Basel-Boston, 1987, 372 p. DOI: 10.1007/978-3-0348-6266-0
3. Daniele V.G., Zich R.S. *The Wiener–Hopf method in electromagnetics*. ISMB Series. New York: SciTech Publishing, Edison, 2014, 384 p. DOI: 10.1049/SBEW503E
4. Lawrie J.B., Abrahams I.D. A Brief Historical Perspective of the Wiener–Hopf Technique. *J. Eng. Math.*, 2007, Vol. 59, pp. 351–358. DOI: 10.1007/s10665-007-9195-x
5. Takhtadzhyan L.A., Fadeev L.D. *Gamil'tonov podkhod v teorii solitonov* (Hamiltonian Approach to Soliton Theory). Moscow, Nauka Publ., 1986, 527 p. (in Russ.).
6. Gokhberg I.Ts., Krein M.G. Systems of Integral Equations on the Half-Line with Kernels Depending on the Difference of the Arguments. *Uspekhi Mat. Nauk*, 1958, Vol. 13, Iss. 2(80), pp. 3–72. (in Russ.).
7. Vekua N.P. *Sistemy singulyarnykh integral'nykh uravneniy i nekotorye granichnye zadachi* (Systems of Singular Integral Equations and some Boundary Value Problems) Moscow, Nauka Publ., 1970, 379 p. (in Russ.).
8. Adukova N.V., Adukov V.M. On Effective Criterion of Stability of Partial Indices for Matrix Polynomials. *Proc. R. Soc. A.*, 2020, Vol. 476, Iss. 2238, 20200012. DOI: 10.1098/rspa.2020.0012
9. Šubin M.A. Factorization of Parameter-Dependent Matrix-Functions in Normed Rings and Certain Related Questions in the Theory of Noetherian Operators. *Mathematics of the USSR-Sbornik*, 1967, Vol. 2, no. 4, pp. 543–560. DOI: 10.1070/SM1967v002n04ABEH002354
10. Adukov V.M. Algorithm of Polynomial Factorization and its Implementation in Maple. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2018, Vol. 11, no. 4, pp. 110–122. DOI: 10.14529/mmp180408

Received January 19, 2021

ОБ ОБРАБОТКЕ ЗАШУМЛЕННЫХ КОНТРАСТНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

В.А. Сурин

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

Рассматривается проблема подавления шума на резком перепаде яркости в цифровых зашумленных контрастных изображениях. Цифровые изображения, получаемые при оцифровке аналогового сигнала цифровой фотоматрицей, помимо полезного сигнала имеют шумовую составляющую. Причем для получения привычного нам цифрового изображения в стандартной цветовой модели RGB к изображению полученному с цифровой фотоматрицы необходимо применить интерполяционный алгоритм, называемый демозаикой. Вследствие таких преобразований гауссовость распределения шума в цифровом зашумленном изображении нарушается.

Использование стандартной модели представления изображения в цифровом виде для подавления шума является не целесообразным. Для более эффективного подавления шума цифровое изображение переводится из цветовой модели RGB в цветовую модель HSV или LAB, в которых можно отдельно фильтровать яркостную и цветовую составляющую цифрового шума. Подавление цветового шума происходит в цветовых каналах изображения с применением фильтра Гаусса.

Подавление шума в яркостном канале цифрового изображения является более сложной задачей, в особенности на границе резкого перепада яркостей. Для подавления яркостного шума в контрастных изображениях предлагается использовать нелинейный фильтр на основе обобщенного метода наименьших модулей (ОМНМ). Описан процесс сглаживания контрастного зашумленного перепада ОМНМ-фильтром и показана его эффективность в сравнении с медианной фильтрацией.

Ключевые слова: зашумленное контрастное изображение; негауссовость распределения шума; подавление шума; фильтрация изображений; контрастный перепад; обобщенный метод наименьших модулей.

Введение

Любое растровое компьютерное изображение состоит из пикселей, расположенных по строкам и столбцам. Основным элементом, из которых строятся все компьютерные изображения, является пиксель. *Пиксель* – «наименьший пространственный элемент дисплея, к которому возможна адресация, способный воспроизводить полный цветовой диапазон» [1].

Цифровые изображения формируются из аналогового сигнала, путем оцифровки его аналого-цифровым преобразователем (АЦП) [2]. Они состоят из большого количества маленьких светочувствительных сенсоров, которые захватывают и накапливают фотоны света, попадающие на них, и преобразуют их в электрический ток. Получая информацию с каждого сенсора светочувствительной матрицы, аппаратура формирует изображение [2]. Ввиду различных физических ограничений устройства формирования цифровых изображений не могут быть идеальны. Как и многие другие измерительные устройства, при оцифровке аналогового изображения имеются погрешности измерений. В результате сформированное изображение содержит полезный сигнал и цифровой шум [3].

В идеальном случае, когда телекамера не вносит каких-либо искажений в формируемый сигнал, её чувствительность зависит только от фотонного шума. Фотонный шум – случайное отклонение числа фотонов относительно среднего значения. Вследствие независимости фотонов в потоке света количество фотонов на отдельном выбранном участке (пикселе) в конкретном кадре подчинено статистике Пуассона [4]. Исходя из этого, часто полагают, что распределение цифрового шума подчиняется гауссовскому закону распределения, и не проводят отдельных исследований поведения шума в цифровых контрастных изображениях [5, 6].

В [7] было показано, что распределение шума в цифровых изображениях может существенно отличаться от гауссовского. В этом случае необходимо понять вследствие чего нарушается зна-

чально гауссовское распределение шума в цифровых изображениях и какие методы подавления шума следует использовать для обработки зашумленных контрастных изображений.

1. Модель изображения

В светочувствительных матрицах используются сенсоры, которые не могут различать цвет, а только яркость. Информацию о цвете получают путем постановки перед сенсорами цветных фильтров синего, красного или зеленого цвета. Расположение таких фильтров на матрице может быть разным, но наиболее популярное называется фильтр Байера или шаблон Байера [8]. Это самый первый и наиболее используемый в настоящее время массив цветных фильтров.

В классическом фильтре Байера используются светофильтры трёх цветов, которые распознает человеческий глаз. Расположены они таким образом, что красный и синий соседствуют с зелеными по вертикали и диагонали, в следующем порядке (см. рис. 1).

Финальное изображение, полученное с матрицы, не является привычным нам цифровым изображением, которое мы видим на компьютере. В нем каждый пиксель содержит только одну цветовую составляющую проекции объективом реального изображения на фотоматрицу (рис. 2).

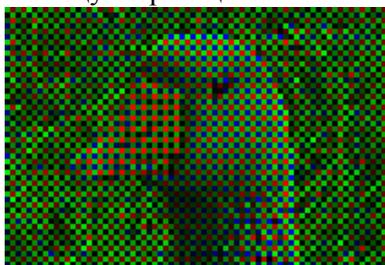


Рис. 2. Итоговое изображение, полученное с матрицы, без какой-либо цифровой обработки



Рис. 3. Итоговое изображение после цифровой обработки

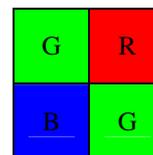


Рис. 1. Порядок расположения цветных фильтров

Для того чтобы привести изображение к полноцветному виду и сохранить истинное разрешение фотоматрицы недостающие цветовые составляющие каждого пикселя рассчитываются математически, на основе информации о цвете соседних пикселей. Результат математической интерполяции представляется в виде 24-битного изображения (рис. 3) где на кодирование пикселя используется 8 бит для каждого из трех цветов или, как их по-другому называют, каналов в цветовой модели RGB [9].

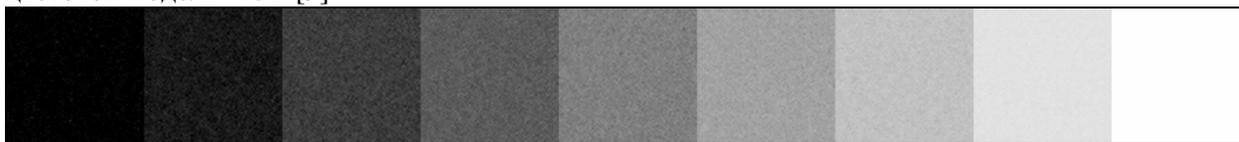


Рис. 4. Участки с различным уровнем яркости

Таблица 1

Числовые характеристики для различных участков яркости									
Теоретическое м.о.	0	32	64	96	128	160	192	224	255
М.о.	2,58	25,40	60,69	91,52	127,76	161,91	193,55	225,72	254,64
Дисперсия	13,08	64,47	63,80	46,66	43,77	26,96	15,34	3,56	0,23
Коэффициент асимметрии	2,353	0,034	-0,148	-0,031	-0,124	-0,148	-0,206	-0,189	-0,604
Коэффициент эксцесса	8,790	0,559	0,545	0,438	0,450	0,379	0,431	0,369	-1,620

Такой процесс называется демозаикой [10]. Существует несколько вариантов демозаики полученного с фотоматрицы изображения, например, АМaZE – универсальный алгоритм для многих ситуаций. На этом этапе изначально гауссовское распределение шума в цифровом изображении может быть нарушено. Пример такого поведения шума на монотонных участках различной яркости в цифровом изображении был рассмотрен ранее (рис. 4) [7].

Было рассмотрено 9 областей изображения различной яркости, каждая из которых состоит из 10 000 значений. Для каждой области были рассчитаны математическое ожидание (м.о.), диспер-

сия, значения коэффициентов асимметрии и эксцесса, значения которых приведены в табл. 1. Полученные величины коэффициентов асимметрии и эксцесса для различных монотонных участков изображения характеризуют смещение распределения относительно гауссовского распределения.

Рассмотрим зашумленное изображение, в котором яркость резко переходит из меньшего значения в большее. На рис. 5 изображены два участка различной яркости.

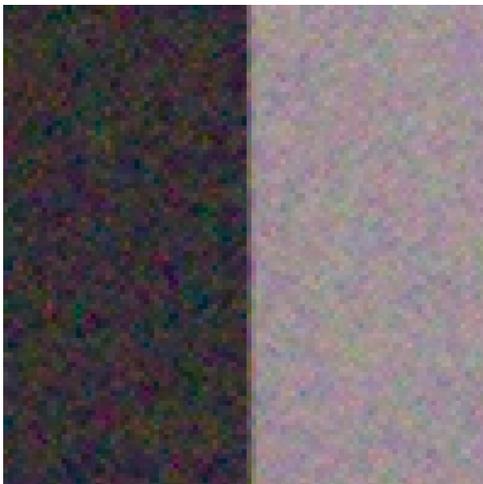


Рис. 5. Полноцветное зашумленное изображение с резким переходом яркости от темного к серому

При рассмотрении границы двух участков различной яркости мы можем получить следующее распределение яркостей для каждого из каналов цвета (рис. 6):

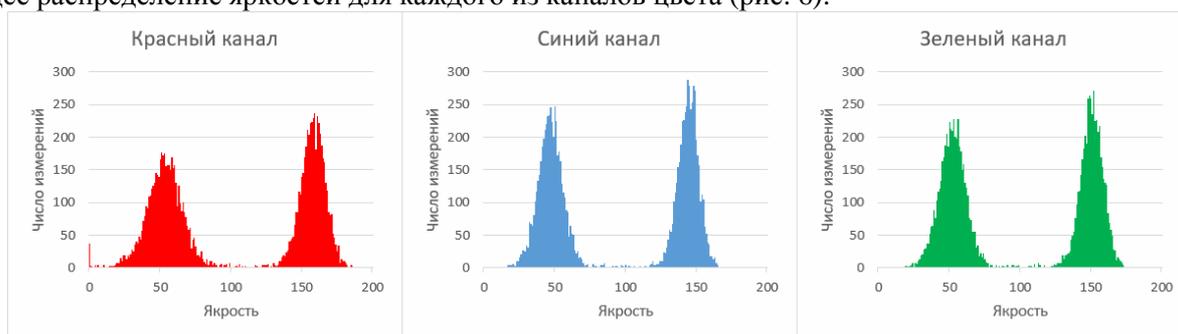


Рис. 6. Распределение значений яркости пикселей в трех каналах цвета

Но использование стандартной цветовой модели для подавления шума представляется не целесообразным, так как в этом случае будет удалена только яркостная составляющая шума, а цветовой шум может даже усилиться. Для избежания подобной ситуации целесообразно использовать другие цветовые модели изображения, такие как LAB (CIE $L^*a^*b^*$) и HSV (Hue, Saturation, Value – тон, насыщенность, значение) [11]. Их преимущество состоит в том, что информация о цвете и яркости хранится отдельно, причем все детали изображения хранятся в яркостном канале. Тот факт, что цветовое пространство LAB и HSV может содержать больше информации о цветности в сравнении со стандартной моделью, позволяет без потери информации конвертировать изображение из модели RGB в любую из приведённых выше моделей.

2. Подавление шума на контрастном перепаде

Для устранения цветового шума в модели HSV достаточно провести размытие цветового канала. Цветовые пятна на изображении будут устранены, а информация о «деталях» изображения из яркостного канала не будет затронута (рис. 7, а).

Подобное размытие в яркостном канале приведет к потере мелких деталей в изображении и сильному снижению контраста (рис. 7, б) поэтому для яркостного канала требуется другие методы сглаживания.

В случае применения цветовой модели HSV к рассматриваемому изображению, распределение яркости пикселей в канале V будет следующим (см. рис. 8).

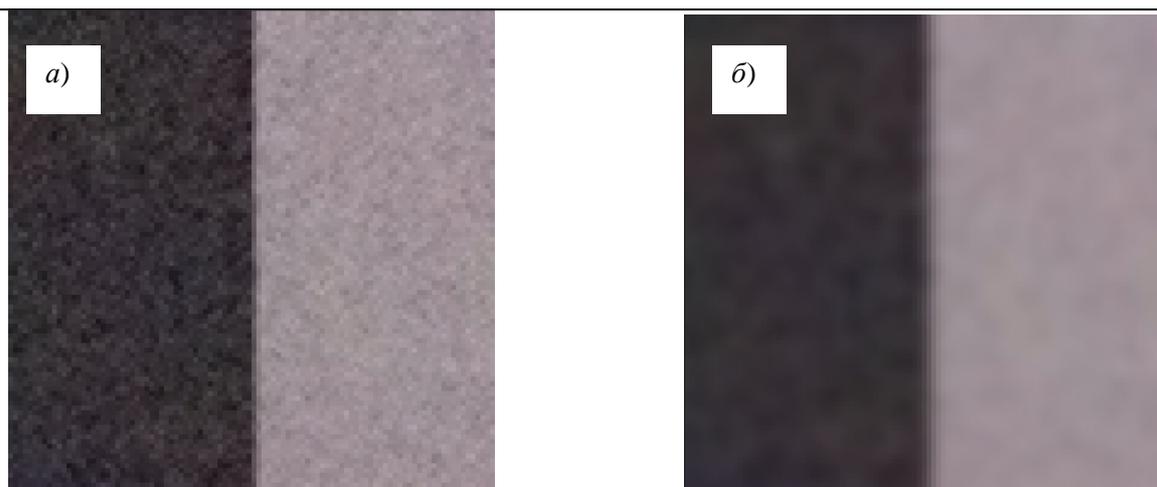


Рис. 7. Полноцветное зашумленное изображение с резким переходом яркости от темного к серому после удаления фильтром Гаусса: а) цветового шума; б) яркостного шума

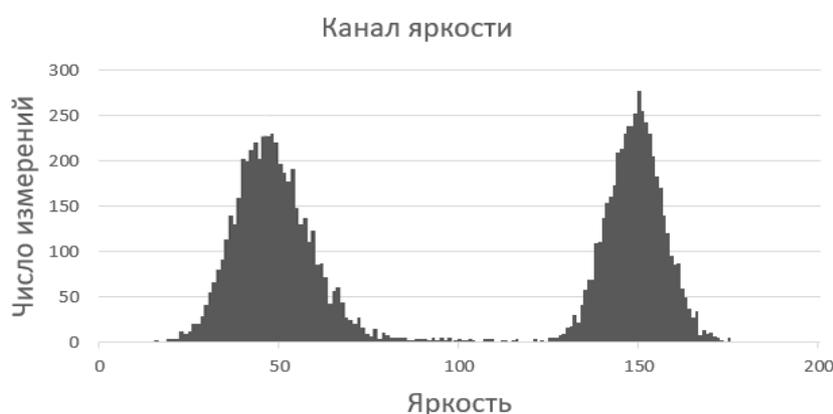


Рис. 8. Распределение значений яркости пикселей в яркостном канале модели HSV

При этом характеристики распределения для каждого из пиков будут отличаться, несмотря на то, что принадлежат одному и тому же кадру. Характеристики приведены в табл. 2.

Таблица 2
Характеристики распределения яркостей на исследуемом изображении

	Яркость 50	Яркость 150
Математическое ожидание	48,07	149,1
дисперсия	85,65	61,32
С.К.О.	9,25	7,83
Коэффициент асимметрии	0,470	0,091

Достаточно высокий коэффициент асимметрии указывает на скошенность распределения яркостей.

Рассмотрим вариант зашумленного контрастного перепада с представленными характеристиками шума и яркости. Модель перепада с шумом $y_k = f_k + \eta_k$, где y_k – яркость пикселей зашумленного изображения; f_k – исходное не зашумленное изображение, равное 50 по одну сторону от перепада и 150 – по другую; η_k – шум с различной дисперсией, соответствующей яркости. Перепад яркости в таком случае будет $h = 100$.

Одним из методов сглаживания экспериментальных данных является скользящее сглаживание L -типа [12]. Положим апертуру фильтров $l = 5$. В качестве сглаживающего фильтра будем использовать медианный фильтр [14], так как он устойчив к резким выбросам, и фильтр на основе обобщенного метода наименьших модулей (ОМНМ) [15], разработанный для подавления шума в контрастных изображениях.

Пусть перепад происходит в пикселе с номером 6. На рис. 9 показана последовательность значений математического ожидания скользящей медианы вблизи перепада яркости равного 100 и апертуре сглаживания равной 5:

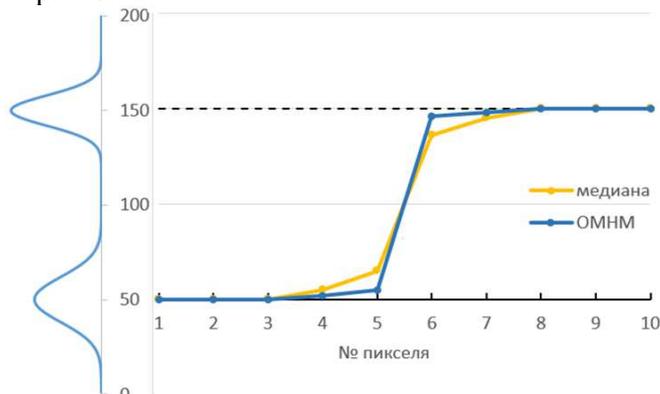


Рис. 9. Математическое ожидание скользящих медианы и ОМНМ для модели «перепад + шум».

В представленном на рис. 9 случае, при скользящем сглаживании L -типа с апертурой фильтров $l = 5$, когда искомым пиксель находится в позиции 3, в аперттуру попадают значения пикселей с номерами с 1-го по 5-й и для всех матожидание яркости будет равно 50, поэтому оба фильтра сработают схожим образом. Но в случае, когда искомым пиксель находится в позиции 4, то в аперттуру попадут пиксели с номерами со 2-го по 6-й. Соответственно 4 пикселя, попадающих в аперттуру, будут иметь матожидание равное 50, а 1 пиксель – 150. Значение яркости этого пикселя будет являться засорением, имеющим отличное от остальных значений матожидание и дисперсию, в итоге имеет место несимметричное засорение. В таком случае медиана выберет не среднее значение яркости из четырех значений имеющие одинаковые характеристики, а смещенное в сторону резкого выброса. ОМНМ-фильтр более устойчив к несимметричному засорению, что было продемонстрировано в [15] применительно к фильтрации сигналов, следовательно смещение будет менее выражено. Еще более выраженное смещение имеет место в случае, когда искомым пиксель находится в позиции 5. Здесь в аперттуру попадут пиксели с номерами с 3-его по 7-ой, соответственно 3 пикселя будут иметь матожидание равное 50, а 2 пикселя – 150. Несимметричным засорением в этом случае будут являться уже два из пяти значений, попадающих в аперттуру. Медиана выберет наибольшее из трех значений, которые не являются несимметричным засорением для конкретного случая.

Когда фильтр будет двигаться дальше, несимметричным засорением будут считаться яркости пикселей, матожидание которых равно 50, но ситуация повторится и смещение также будет иметь место.

Медиана в данном случае заметно искажает полезный сигнал, что приводит к растеканию контрастной границы на контрастном перепаде. ОМНМ-фильтр в данном случае меньше искажает полезный сигнал на перепаде и растекание контрастной границы хоть и имеет место, но в значительно меньшей степени (рис. 11).

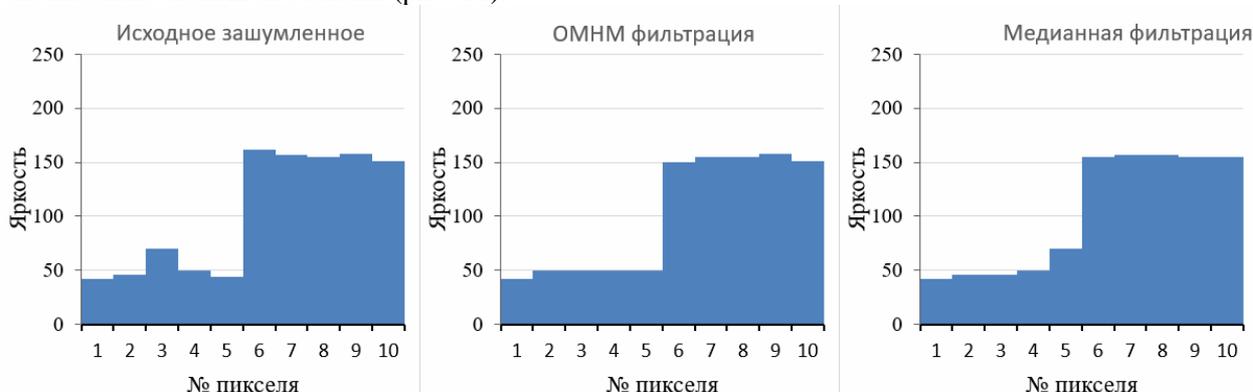


Рис. 10. Фильтрация зашумленного перепада 50–150

Причем с увеличением величины перепада h выигрыш ОМНМ фильтра будет увеличиваться (рис. 11).

В случае же уменьшения h или увеличения с.к.о. шума эффективность применения будет снижаться, рис. 12, и, когда распределение шума на нижней границе перепада в значительной мере будет накладываться на распределение яркостей на верхней границе перепада, то выигрыш ОМНМ фильтрации по сравнению с медианной фильтрацией может сойти на нет.



Рис. 11. Фильтрация зашумленного перепада 50–210



Рис. 12. Фильтрация зашумленного перепада 80–120

Эффективность сглаживания перепадов можно оценивать как среднее линейное отклонение яркостей пикселей, обработанных фильтрами перепадов с исходными не зашумленными перепадами. Характеристики среднего линейного отклонения для рассмотренных перепадов приведены в табл. 3.

Таблица 3

Величина среднего линейного отклонения для рассмотренных случаев

Перепад	h	Медианный фильтр	ОМНМ-фильтр
50–210	160	3,2	0,4
50–150	100	4,1	2,1
80–120	40	3,7	2,8

Чем меньше величина перепада, тем выше значение среднего линейного отклонения для ОМНМ-фильтра. Данный фильтр эффективно использовать в случае, если величина перепада h больше или равна среднему квадратичному отклонению.

Заключение

Распределение шума в цифровых контрастных изображениях, вследствие дискретности яркостей и некоторых нелинейных преобразований, таких как процедура демозаики, может иметь не гауссовский асимметричный характер.

Применяя альтернативные RGB цветовые модели, такие как LAB или HSV можно эффективно устранить цветовой шум, применяя фильтр гаусса к цветовым каналам, и останется подавить только яркостной шум.

При подавлении шума в зашумленных контрастных изображениях эффективности медианного фильтра недостаточно и необходимо использовать более устойчивые к несимметричному зашумлению фильтры, например фильтр на основе обобщенного метода наименьших модулей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 20-41-660008 p_a).

Литература

1. Гонсалес, Р.С. Цифровая обработка изображений / Р.С. Гонсалес, Р.Е. Вудс. – М.: Техносфера, 2012. – 1104 с.
2. Прэтт, У. Цифровая обработка изображений: в 2-х кн. / У. Прэтт, Д.С. Лебедев. – М.: Мир, 1982. – Кн. 1. – 310 с.; кн. 2. – 790 с.
3. Ярославский, Л.П. Введение в цифровую обработку изображений / Л.П. Ярославский. – М.: Советское радио, 1979. – 312 с.
4. Никитин, В.В. Телевидение в системах физической защиты / В.В. Никитин, А.К. Цыцулин. – СПб.: СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2001. – 132 с.
5. Применение переключающихся медианных фильтров для восстановления зашумленных изображений / С.С. Бухтояров, А.Л. Приоров, И.В. Апальков, В.В. Хрящев // Вопросы радиоэлектроники: Серия общетехническая. – 2006. – Т. 4, № 2. – С. 137–147.
6. Мамаев, Н.В. HeNLM-LA: Локально-адаптивный алгоритм нелокального среднего на основе разложения по функциям Эрмита / Н.В. Мамаев, А.С. Лукин, Д.В. Юрин // Программирование. – 2014. – Т. 40, № 4. – С. 46–54.
7. Surin, V.A. Research of properties of digital noise in contrast images / V.A. Surin, A.N. Tyrsin // CEUR Workshop Proceeding. – 2016. – Vol. 1710. – P. 340–348. <http://ceur-ws.org/Vol-1710/paper34.pdf>
8. Television noise reduction IC / G. de Naan, T.G. Kwaaitaal-Spassova, M.M. Larragy *et al.* // IEEE Transactions on Consumer Electronics. – 1998. – Vol. 44, no. 1. – pp. 143–154.
9. Синтез цвета. Фотокинетика: Энциклопедия / гл. ред. Е.А. Иофис. – М.: Советская энциклопедия, 1981. – 447 с.
10. Davies, A. Digital Imaging for Photographers / A. Davies, P. Fennessy // Focal Press. – 2001. – Paperback. – 214 p.
11. CIE Recommendations on Uniform Color Spaces, Color Difference Equations, Psychometric Color Terms, Supplement 2 to CIE publication 15 (E1.3.1) 1971/(TC1.3). Central Bureau of the Commission Internationale de l'Éclairage (Vienna, Austria). – 1978.
12. Быстрые алгоритмы в цифровой обработке изображений. Преобразования и медианные фильтры / Т.С. Хуанг, Дж.-О. Эклунд, Г.Дж. Нуссбаумер и др. – М.: Радио и связь, 1984. – 221 с.
13. Tukey, J.W. Discussion, Emphasizing the Connection Between Analysis of Variance and Spectrum Analysis / J.W. Tukey // Technometrics. – Vol. 3, no. 2. – P. 191–219.
14. Сурин, В.А. Модель нелинейного фильтра для цифровой обработки контрастных изображений / В.А. Сурин, А.Н. Тырсин // Автометрия. – 2018. – Т. 54, № 2. – С. 54–62.
15. Тырсин, А.Н. Робастное построение регрессионных зависимостей на основе обобщенного метода наименьших модулей / А.Н. Тырсин // Записки научных семинаров ПОМИ РАН. – 2005. – Т. 328. – С. 236–250.

Поступила в редакцию 26 января 2021 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 1, pp. 14–21*

DOI: 10.14529/mmph210102

ON PROCESSING NOISY CONTRAST IMAGES

V.A. Surin

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

The problem of noise reduction at sharp transitions of brightness in digital noisy contrast images is considered. In addition to the useful signal, digital images obtained by digitizing an analogue signal with a digital photo matrix have a noise component. Moreover, to obtain a digital image in the standard RGB color model, a demosaicing interpolation algorithm must be applied to the image obtained from a digital

photo matrix. Due to such transformations, the Gaussian distribution of noise in a digital noisy image is violated.

Using a standard image digitization model for noise reduction is not effective. For more effective noise reduction, the digital image is transferred from the RGB color model to the HSV or LAB color model, where the brightness and color components of the digital noise can be filtered separately. Color noise is suppressed in the color channels of the image using a Gaussian filter.

Noise reduction in the brightness channel of a digital image is more difficult task, especially at the edge of sharp transitions of brightness. To suppress the brightness noise in contrast images, it is proposed to use a nonlinear filter based on the generalized method of least absolute values (GMLAV). The process of smoothing the contrast noisy transition by the GMLAV-filter is described, and its efficiency is shown in comparison with the median filtration.

Keywords: noisy contrast image; non-Gaussian noise distribution; noise reduction; image filtering; color model; contrast transition; generalized method of least absolute values.

References

1. Gonzalez R.C., Woods R.E. *Digital Image Processing*. 4th edition. Pearson Education, Inc., New York, 2018, 1092 p.
2. Pratt W.K. *Digital Image Processing*. John Wiley & Sons Inc., Hoboken, New Jersey, 2007, 807 p. DOI: 10.1002/0470097434
3. Yaroslavsky L.P. *Vvedenie v cifrovuyu obrabotku izobrazhenij* (Introduction to Digital Image Processing). Moscow, Sovetskoe radio, 1979, 312 p. (in Russ.).
4. Nikitin V.V., Tsytulin A.K. *Televidenie v sistemakh fizicheskoy zashchity* (Television in Systems of Physical Protection). SPb.: SPbGETU "LETI" Publ., 2001, 132 p. (in Russ.).
5. Bukhtoyarov S.S., Priorov A.L., Apal'kov I.V., Khryashchev V.V. Primenenie pereklyuchayushchikhnya mediannykh fil'trov dlya vosstanovleniya zashumlennykh izobrazheniy (Application of Switching Median Filters for Restoring Noisy Images). *Voprosy radioelektroniki: Seriya obshchetekhnicheskaya*, 2006, Vol. 4, no. 2, pp. 137–147. (in Russ.).
6. Mamaev N.V., Lukin A.S., Yurin D.V. HeNLM-LA: A Locally Adaptive Non-Local Means Algorithm Based on Hermite Functions Expansion. *Programming and Computer Software*, 2014, Vol. 40, no. 4, pp. 199–207. DOI: 10.1134/S0361768814040070
7. Surin V.A., Tyrsin A.N. Research of Properties of Digital Noise in Contrast Images. *CEUR Workshop Proceeding*, 2016, Vol. 1710, pp. 340–348. <http://ceur-ws.org/Vol-1710/paper34.pdf>
8. de Haan G., Kwaaitaal-Spassova T.G., Larragy M.M., Ojo O.A., Schutten R.J. Television Noise Reduction IC. *IEEE Transactions on Consumer Electronics*, 1998, Vol. 44, no. 1, pp. 143–154. DOI: 10.1109/30.663741
9. Iofis E.A. (ed.) *Sintez tsveta. Fotokinotekhnika: Entsiklopediya* (The Synthesis of Color. Photo and Film Equipment: Encyclopedia). Moscow, Sovetskaya entsiklopediya Publ., 1981, 447 p. (in Russ.).
10. Davies A., Fennessy P. *Digital Imaging for Photographers*. Oxford, Focal Press, 2001, 214 p.
11. *CIE Recommendations on uniform color spaces, color difference equations, psychometric color terms, Supplement 2 to CIE publication 15 (E1.3.1) 1971/(TC1.3)*. Central Bureau of the Commission Internationale de l'Éclairage (Vienna, Austria), 1978.
12. Huang T.S., Ekiundh J.-O., Justusson B.I., Nussbaumer H.J., Tyan S.G., Zohar S., Yustusson B.I. *Two-dimensional digital signal processing II: transforms and median filters*. Berlin, Heidelberg, New York, Springer-Verlag Publ., 1981, 224 p. DOI: 10.1007/BFb0057592
13. Tukey J.W. Discussion, Emphasizing the Connection Between Analysis of Variance and Spectrum Analysis. *Technometrics*, 1961, Vol. 3, no. 2, p. 191–219. DOI: 10.1080/00401706.1961.10489940
14. Surin V.A., Tyrsin A.N. Nonlinear Filter Model for Digital Imaging of Contrast Images. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2018, Vol. 54, no. 2. pp. 155–161. DOI: 10.3103/S8756699018020061
15. Tyrsin A.N. Robust Regression Models Definition on Base of Generalised Method of Least Modules. *Journal of Mathematical Sciences*, 2006, Vol. 139, Iss. 3, pp. 6634–6642. DOI: 10.1007/s10958-006-0380-7

Received January 26, 2021

ОБ ОДНОЙ ЗАДАЧЕ УПРАВЛЕНИЯ ДВИЖУЩЕЙСЯ ТЕЛЕЖКОЙ С НАХОДЯЩИМСЯ НА НЕЙ УПРУГИМ СТЕРЖНЕМ

В.И. Ухоботов^{1,2}, Н.Д. Ливанов²

¹ Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

² Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Email: ukh@csu.ru, nikita.livanov.mail@gmail.com

Рассматривается задача управления процессом продольных колебаний упругого однородного стержня постоянного сечения. Под стержнем понимается тело, длина которого значительно превышает его поперечные размеры. Стержень лежит на движущейся тележке, правый конец которого жестко закреплен, а левый конец свободен. Трение между стержнем и поверхностью тележки в рассматриваемой задаче отсутствует. При движении тележки стержень совершает вынужденные продольные колебания в неинерциальной системе отсчета связанной с тележкой. Управлением является ускорение тележки, величина которого ограничена. Границы ее допустимых значений заданы. Величина совокупности внешних сил, действующих на стержень, точно не известна, а заданы только её границы изменения. Цель процесса управления заключается в том, чтобы в заданный момент времени среднее значение величины растяжения стержня находилось в заданном промежутке. Это среднее значение вычисляется с помощью заданной функции.

Для решения поставленной задачи был применен метод оптимизации гарантированного результата. Был осуществлен переход к новой одномерной переменной, с помощью которой рассматриваемая задача управления продольными колебаниями стержня была сведена к однотипной задаче управления при наличии помехи. Это позволило найти необходимые и достаточные условия, при которых можно осуществить выполнение поставленной цели при любой допустимой совокупности внешних сил, суммарная величина которых удовлетворяет заданным ограничениям. Предложен соответствующий алгоритм построения закона изменения ускорения тележки. Разобран пример, наглядно показывающий, как строится управление тележкой, гарантирующее достижение поставленной цели.

Ключевые слова: управление; упругий стержень; гарантированный результат.

Введение

При изучении управляемых процессов колебания упругих систем возникают математические задачи управления гиперболическими уравнениями [1–5]. Так на практике встречаются задачи управления процессом транспортировки упругих балок, когда точное значение внешних сил не известно. При исследовании таких задач можно применить метод оптимизации гарантированного результата [6]. В основе этого метода лежит теория дифференциальных игр [7].

В данной работе рассматривается задача, когда управлением является ограниченное по величине ускорение тележки, на которой лежит упругий стержень. Точное значение величины силы, действующей на стержень, не известно. Известны границы её изменения. Цель процесса управления заключается в том, чтобы в заданный момент времени среднее значение величины растяжения стержня находилось в заданном промежутке. Среднее значение вычисляется с помощью заданной функции. С помощью замены переменной задача сводится к однотипной задаче управления при наличии помехи. Для таких задач, рассматриваемых в рамках теории дифференциальных игр, построены оптимальные управления игроков [8].

Постановка задачи

Рассмотрим тележку, на которой лежит упругий стержень, правый конец которого жестко закреплен, а левый свободен. Трение между стержнем и поверхностью тележки отсутствует. Ускорение w тележки является управлением, и оно ограничено.

При движении тележки стержень совершает продольные колебания. Свяжем с тележкой систему координат, ось X которой направлена по стержню. Считаем, что стержень единичной длины. Плотность совокупности внешних сил, действующих на стержень, задается непрерывной функцией $f(x, t)$, где x – абсцисса некоторого сечения стержня, когда последний находится в покое. Обозначим через $U(x, t)$ смещение этого сечения в момент времени t . Поскольку введенная система отсчета является неинерциальной, то уравнение вынужденных продольных колебаний стержня примет вид [9].

$$\frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial x^2} - w + f(x, t), x \in [0, 1], t \in [0, p]. \quad (1)$$

Это уравнение рассматривается при заданных начальных условиях

$$U(x, 0) = g(x), \frac{\partial U(x, 0)}{\partial t} = G(x), \quad (2)$$

где функции g и G непрерывны на отрезке $[0, 1]$. Кроме того, из условия, что правый конец стержня жестко закреплен, а левый свободен, получим граничные условия [9]

$$\frac{\partial U(0, t)}{\partial x} = 0, U(1, t) = 0, t \in [0, p]. \quad (3)$$

По условию ускорение тележки ограничено, поэтому его можно записать в виде

$$w = a_1(t) - a_2(t)\xi, |\xi| \leq 1, a_2(t) > 0. \quad (4)$$

Параметр ξ является управлением.

Считаем, что плотность $f(x, t)$ внешних сил точно не известна. Известна её оценка

$$f_2(x, t) \leq f(x, t) \leq f_1(x, t), x \in [0, 1], t \in [0, p]. \quad (5)$$

Здесь $f_i: [0, 1] \times [0, p] \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, 2$ – непрерывные функции.

Заданы числа $l \in \mathbb{R}$ и $\varepsilon \geq 0$. Цель выбора управления ξ (4) заключается в том, чтобы осуществить неравенство

$$\left| \int_0^1 U(x, p) \sigma(x) dx - l \right| \leq \varepsilon \quad (6)$$

для любой реализации внешней силы, плотность которой удовлетворяет условию (5). Здесь функция $\sigma: [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ является непрерывной и удовлетворяет условиям

$$\sigma(0) = \sigma(1) = 0. \quad (7)$$

Формализация задачи

Опишем допустимое правило формирования управления ξ (4). Оно означает, что каждому моменту времени $0 \leq \vartheta < p$ и каждой возможной функции растяжения стержня $U(x, \vartheta)$ ставится в соответствие функция $\xi: [\vartheta, p] \rightarrow [0, 1]$. Такое правило будем обозначать

$$\xi(t) = \mathcal{N}(t, U(\cdot, \vartheta)), t \in [\vartheta, p]. \quad (8)$$

Зафиксируем разбиение

$$\omega: 0 < t_0 < t_1 < \dots < t_i < t_{i+1} < \dots < t_{m+1} = p$$

отрезка $[0, p]$ с диаметром $d(\omega) = \max_{0 \leq i \leq p} (t_{i+1} - t_i)$. Зафиксируем управление (8), плотность $f(x, t)$ внешних сил при $x \in [0, 1], 0 \leq t \leq p$. Построим решение $U_\omega(x, t), 0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq p$ задачи (1)–(3) следующим образом.

Положим $g_0(x) = g(x), G_0(x) = G(x)$ при $0 \leq x \leq 1$. При $t_0 \leq t \leq t_1, 0 \leq x \leq 1$ функция $U_\omega(x, t)$ определяется, как решение следующей задачи:

$$\frac{\partial^2 U_\omega(x, t)}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 U_\omega(x, t)}{\partial x^2} + a_1(t) - a_2(t)\xi_i + f(x, t), \quad (9)$$

$$U_\omega(x, t_i) = g_i(x), \frac{\partial U_\omega(x, t_i)}{\partial t} = G_i(x), \quad (10)$$

$$\frac{\partial U_\omega(0, t)}{\partial x} = 0, U_\omega(1, t) = 0, \quad (11)$$

$$\xi_i = \mathcal{N}(t_i, U_\omega(\cdot, t_i)). \quad (12)$$

Здесь $i = 0, x \in [0, 1], t \in [t_0, t_1]$.

Пусть функция $U_\omega(x, t)$ определена при $t_0 \leq t \leq t_{i-1}, 0 \leq x \leq 1$. Положим $g_i(x) = U_\omega(x, t_{i-1}), G_i(x) = \partial U_\omega(x, t_{i-1}) / \partial t$. С помощью формул (9)–(12) строим функцию $U_\omega(x, t)$ при $t_{i-1} \leq t \leq t_i$.

Будем говорить, что управление (8) гарантирует выполнение поставленной цели (6), если для любого числа $\gamma > \varepsilon$ найдется число $\delta > 0$ такое, что для любого разбиения ω с диаметром $d(\omega) < \delta$ и для любой непрерывной функции $f(x, t)$, удовлетворяющей условию (5), выполнено неравенство

$$\left| \int_0^1 U_\omega(x, p) \sigma(x) dx - l \right| \leq \gamma. \quad (13)$$

Переход к одномерной задаче

Пусть функция $\psi(x, \tau)$ при $0 \leq x \leq 1, 0 \leq \tau \leq p$ является решением следующей задачи:

$$\frac{\partial^2 \psi(x, \tau)}{\partial \tau^2} = a^2 \frac{\partial^2 \psi(x, \tau)}{\partial x^2}, \quad (14)$$

$$\frac{\partial \psi(0, \tau)}{\partial x} = 0, \psi(1, \tau) = 0, 0 \leq \tau \leq p, \quad (15)$$

$$\frac{\partial \psi(x, 0)}{\partial \tau} = \sigma(x), \psi(x, 0) = 0, 0 \leq x \leq 1. \quad (16)$$

Из равенства (7) следует, что условия согласования на концах отрезка выполнены. Из равенств (5) получим, что

$$\int_0^1 f(x, t) \psi(x, p-t) dx = b_1(t) + b_2(t) \nu, |\nu| \leq 1. \quad (17)$$

Здесь

$$b_1(t) = \frac{1}{2} \int_0^1 (f_1(x, t) + f_2(x, t)) \psi(x, p-t) dx, \quad b_2(t) = \frac{1}{2} \left| \int_0^1 (f_1(x, t) - f_2(x, t)) \psi(x, p-t) dx \right| \geq 0. \quad (18)$$

Положим

$$\theta_\omega(t) = \int_0^1 \left(\frac{\partial \psi(x, p-t)}{\partial \tau} U_\omega(x, t) + \psi(x, p-t) \frac{\partial U_\omega(x, t)}{\partial t} \right) dx. \quad (19)$$

Тогда

$$\dot{\theta}_\omega(t) = \int_0^1 \left(-\frac{\partial^2 \psi(x, p-t)}{\partial \tau^2} U_\omega(x, t) + \psi(x, p-t) \frac{\partial^2 U_\omega(x, t)}{\partial t^2} \right) dx.$$

Учтем уравнения (9), (14) и равенства (17), (18). Получим

$$\begin{aligned} \dot{\theta}_\omega(t) = & \int_0^1 \left(-a^2 \frac{\partial^2 \psi(x, p-t)}{\partial x^2} U_\omega(x, t) \right) dx + \int_0^1 \left(a^2 \psi(x, p-t) \frac{\partial^2 U_\omega(x, t)}{\partial x^2} \right) dx + \\ & + (a_1(t) - a_2(t) \xi_i) \int_0^1 \psi(x, p-t) dx + b_1(t) + b_2(t) \nu_i \end{aligned} \quad (20)$$

при $t_i \leq t \leq t_{i+1}$. Интегрируя по частям и учитывая граничные условия (11) и (15), получим

$$\int_0^1 \psi(x, p-t) \frac{\partial^2 U_\omega(x, t)}{\partial x^2} dx = \int_0^1 \frac{\partial \psi(x, p-t)}{\partial x} \frac{\partial U_\omega(x, t)}{\partial x} dx = \int_0^1 \frac{\partial^2 \psi(x, p-t)}{\partial x^2} U_\omega(x, t) dx.$$

Отсюда и из (20) следует, что при $t_i \leq t \leq t_{i+1}$

$$\dot{\theta}_\omega(t) = - \left| a_2(t) \int_0^1 \psi(x, p-t) dx \right| u_i + b_2(t) v_i + a_1(t) \int_0^1 \psi(x, p-t) dx + b_1(t).$$

Здесь

$$\xi = \text{sign} \left(a_2(t) \int_0^1 \psi(x, p-t) dx \right) u. \quad (21)$$

Полагаем, что $\text{sign} 0 = 1$.

Обозначим

$$z_\omega(t) = \theta_\omega(t) + \int_i^p \left(a_1(r) \int_0^1 \psi(x, p-r) dx + b_1(r) \right) dr - l. \quad (22)$$

Тогда

$$\dot{z}_\omega(t) = -a(t)u_i + b(t)v_i, |u_i| \leq 1, |v_i| \leq 1, t_i \leq t \leq t_{i+1}. \quad (23)$$

Здесь обозначено

$$a(t) = \left| a_2(t) \int_0^1 \psi(x, p-t) dx \right| \geq 0, \quad b(t) = b_2(t) \geq 0. \quad (24)$$

Далее, учитывая условие (11) и формулы (19), (22), перепишем неравенство (13) в следующем виде:

$$|z_\omega(p)| \leq \gamma. \quad (25)$$

Условия возможности окончания в одномерной задаче

Рассмотрим одномерную задачу (23), (25). Отметим, что функции (24) являются непрерывными. Построим ломаные

$$z_\omega(t) = z_\omega(t_i) - \int_{t_i}^t a(r) dr u_i + \int_{t_i}^t b(r) dr v_i, \quad t_i \leq t \leq t_{i+1}, \quad (26)$$

с начальным условием $z_\omega(0) = z(0)$. Семейство этих ломаных, определенных на отрезке $[0, p]$, является равномерно ограниченным и равномерно непрерывным [8, с. 46]. По теореме Арцелла [10, с. 104] из любой последовательности ломаных (26) можно выделить подпоследовательность, равномерно сходящуюся на отрезке $[0, p]$.

Пусть в (26)

$$u_i = \text{sign } z_\omega(t_i), \quad i = \overline{0, m}, \quad (27)$$

а функция $z(t)$ при $0 \leq t \leq p$ является равномерным пределом последовательности ломаных $z_{\omega_k}(t)$ (26), у которых диаметр разбиения $d(\omega_k) \rightarrow 0$. Тогда [8, теорема 8.1] выполнено неравенство

$$|z(p)| \leq F(z(0)).$$

Здесь обозначено

$$F(z) = \max \left(|z| + \int_0^p (b(r) - a(r)) dr; \max_{0 \leq \tau \leq p} \int_\tau^p (b(r) - a(r)) dr \right).$$

Пусть число $\varepsilon \geq F(z(0))$. Тогда можно показать, что для любого числа $\gamma > \varepsilon$ существует число $\delta > 0$ такое, что выполняется неравенство (25) для любой ломаной (26) с диаметром разбиения $d(\omega) < \delta$ и с управлением (27).

Пусть в (26)

$$v_i = \text{sign } z_\omega(t_i), i = \overline{0, m}, \quad (28)$$

а функция $z(t)$ при $0 \leq t \leq p$ является равномерным пределом последовательности ломаных $z_{\omega_k}(t)$ (26), у которых $d(\omega_k) \rightarrow 0$. Тогда [8, теорема 8.2] выполнено неравенство

$$|z(p)| \leq F(z(0)).$$

Отсюда можно получить, что если числа $\varepsilon < \gamma < F(z(0))$, то существует число $\delta > 0$ такое, что

$$|z_\omega(p)| > \gamma,$$

для любой ломаной $z_\omega(t)$ (26) с диаметром разбиения $d(\omega) < \delta$ и с v_i (28).

Таким образом, можно построить управление (8), которое гарантирует выполнение поставленной цели (13) тогда и только тогда, когда $F(z(0)) \leq \varepsilon$.

Из формул (21), (27) получим, что

$$\xi = \text{sign} \left(z a_2(t) \int_0^1 \psi(x, p-t) dx \right) u.$$

Здесь z определяется формулами (19) и (22) с заданной в (22) $U_\omega(x, t)$ на $U(x, t)$.

Пример

Пусть функция

$$\sigma(x) = 3\pi a \sin(\pi x) \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right),$$

тогда условие (7) выполнено. Рассмотрим функцию

$$\psi(x, \tau) = 3 \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}a\tau\right) - \cos\left(\frac{3\pi}{2}x\right) \sin\left(\frac{3\pi}{2}a\tau\right),$$

которая удовлетворяет уравнению (14) и условиям (15), (16). Подставим функцию $\psi(x, \tau)$ в формулу (19) при $U_\omega(x, t) = U(x, t)$. Тогда из (22) следует, что

$$\begin{aligned} z(t) = & \frac{3\pi a}{2} \int_0^1 \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right) \cos\left(\frac{\pi}{2}a(p-t)\right) U(x, t) dx + \\ & + \int_0^1 \left(3 \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}a(p-t)\right) - \cos\left(\frac{3\pi}{2}x\right) \sin\left(\frac{3\pi}{2}a(p-t)\right) \right) \frac{\partial U(x, t)}{\partial t} dx + \\ & + \int_t^p \left[a_1(r) \frac{6}{\pi} \left(\sin\left(\frac{\pi}{2}a(p-r)\right) + \frac{1}{9} \sin\left(\frac{3\pi}{2}a(p-r)\right) \right) + b_1(r) \right] dr - l. \end{aligned}$$

Алгоритм сведения задачи управления колебанием упругого стержня к одномерной дифференциальной игре разработан В.И. Ухоботовым при поддержке Российского научного фонда (проект 19-11-00105).

Литература

1. Осипов, Ю.С. К теории позиционного управления в гиперболических системах / Ю.С. Осипов, С.П. Охезин // Докл. АН СССР. – 1977. – Т. 233, № 4. – С. 551–554.
2. Лионс, Ж.-Л. Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными / Ж.-Л. Лионс. – М.: Мир, 1972. – 414 с.

3. Васильев, Ф.П. Методы решения экстремальных задач / Ф.П. Васильев. – М.: Наука, 1981. – 400 с.
4. Егоров, А.И. Управление упругими колебаниями / А.И. Егоров. – ДАН УССР. Сер. Физмат. и техн. наук. – 1986. – № 5. – С. 60–63.
5. Осипов, Ю.С. Динамическое моделирование параметров в гиперболических системах / Ю.С. Осипов, А.И. Короткий // Изв. АН. СССР. Техн. кибернетика. – 1991. – № 2. – С. 154–164.
6. Красовский, Н.Н. Управление динамической системой / Н.Н. Красовский. – М.: Наука, 1985. – 518 с.
7. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. – М.: Наука, 1974. – 456 с.
8. Ухоботов, В.И. Метод одномерного проектирования в линейных дифференциальных играх с интегральными ограничениями: учеб. пособие / В.И. Ухоботов. – Челябинск: Челябинский гос. ун-т. – 2005. – 123 с.
9. Кошляков, Н.С. Основные дифференциальные уравнения математической физики / Н.С. Кошляков, Э.Б. Глинер, М.М. Смирнов. – М.: Физматгиз, 1962. – 767 с.
10. Колмогоров, А.Н. Элементы теории функций и функционального анализа / А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин. – М.: Наука, 1972. – 496 с.

Поступила в редакцию 19 ноября 2020 г.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 1, pp. 22–28

DOI: 10.14529/mmph210103

ON A PROBLEM OF CONTROLLING A MOVING CART WITH ELASTIC ROD

V.I. Ukhobotov^{1,2}, N.D. Livanov²

¹ Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Science, Yekaterinburg, Russian Federation

² Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: ukh@csu.ru, nikita.livanov.mail@gmail.com

This article discusses the problem of controlling the process of longitudinal oscillations of an elastic homogeneous rod of uniform cross section. A rod is understood as a body, the length of which significantly exceeds its cross dimensions. The rod is on a moving cart, the right end of which is rigidly fixed, and the left end is not fixed. There is no friction between the rod and the cart surface in the problem under consideration. When the cart moves, the rod performs constrained longitudinal oscillations in a non-inertial frame of reference associated with the cart. The control is the acceleration of the cart, the magnitude of which is limited. The boundaries of its accepted values are set. The value of the combined external forces acting on the rod is not known exactly, but only its limits of variation are given. The purpose of the control process is to ensure that at a given moment in time, the average value of the stretch of the rod is within a given interval. This average is calculated using the specified function.

In order to solve the problem, the method of optimizing a guaranteed result is applied. A transition to a new one-dimensional variable is made, with the help of which the considered problem of control of the longitudinal oscillations of a rod is reduced to a similar control problem in the presence of noise. The necessary and sufficient conditions are found, under which it is possible to accomplish the set goal for any admissible external forces, the total value of which satisfies the given constraints. A corresponding algorithm for constructing the law of variation of the cart acceleration is proposed. An example that clearly shows how to build the cart control, which will guarantee the achievement of the set goal, has been analyzed.

Keywords: control; elastic rod; guaranteed result.

References

1. Osipov Yu.S., Okhezin S.P. К теории позиционного управления в гиперболических системах (On the Theory of Positional Control in Hyperbolic Systems). *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 1977, Vol. 233, no. 4, pp. 551–554. (in Russ.).

2. Lions Zh.-L. *Optimal'noe upravlenie sistemami, opisyvaemymi uravneniyami s chastnymi proizvodnymi* (The Optimal Control of Systems Described by Partial Differential Equations). Moscow, Mir Publ., 1972, 414 p. (in Russ.).
3. Vasil'ev F.P. *Metody resheniya ekstremal'nykh zadach* (Methods for Solving Extreme Problems). Moscow, Nauka Publ., 1981, 400 p. (in Russ.).
4. Egorov A.I. *Upravlenie uprugimi kolebaniyami* (Elastic Vibration Control). DAN USSR. Ser. Phys.-mat. and tech. sciences, 1986, no. 5, pp. 60–63. (in Russ.).
5. Osipov Yu.S., Korotkiy A.I. *Dinamicheskoe modelirovanie parametrov v giperbolicheskikh sistemakh* (Dynamic Modeling of Parameters in Hyperbolic Systems). *Izv. AN. SSSR. Tekhn. kibernetika*, 1991, no. 2, pp. 154–164. (in Russ.).
6. Krasovskiy N.N. *Upravlenie dinamicheskoy sistemoy* (Dynamic system control). Moscow, Nauka, Publ., 1985, 518 p. (in Russ.).
7. Krasovskiy N.N., Subbotin A.I. *Pozitsionnye differentsial'nye igry* (Positional differential games). Moscow, Nauka Publ., 1974, 456 p. (in Russ.).
8. Ukhobotov V.I. *Metod odnomernogo proektirovaniya v lineynykh differentsial'nykh igrakh s integral'nymi ogranicheniyami: ucheb. posobie* (One-Dimensional Design Method in Linear Differential Games with Integral Constraints: a Textbook). Chelyabinsk, Chelyabinskiy gosudarstvennyy universitet Publ., 2005, 123 p. (in Russ.).
9. Koshlyakov N.S., Gliner E.B., Smirnov M.M. *Osnovnye differentsial'nye uravneniya matematicheskoy fiziki* (Basic Differential Equations of Mathematical Physics). Moscow, Fizmatgiz Publ., 1962, 767 p. (in Russ.).
10. Kolmogorov A.N, Fomin S.V. *Elementy teorii funktsiy i funktsional'nogo analiza* (Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis). Moscow, Nauka Publ., 1972, 496 p. (in Russ.).

Received November 19, 2020

АНАЛИЗ СМЕШАННОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА

А.Л. Ушаков

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

E-mail: ushakoval@susu.ru

Смешанная краевая задача для уравнения Пуассона рассматривается в ограниченной плоской области. Проводится продолжение этой задачи в вариационном виде через границу с условием Дирихле до прямоугольной области. Для решения продолженной задачи формулируется модифицированный метод фиктивных компонент в вариационном виде. Продолженная задача в вариационном виде рассматривается на конечномерном пространстве. Для решения предыдущей задачи формулируется модифицированный метод фиктивных компонент на конечномерном пространстве. Для решения продолженной задачи в матричном виде рассматривается известный метод фиктивных компонент. Показывается, что в методе фиктивных компонент абсолютная ошибка в энергетической норме сходится со скоростью геометрической прогрессии. В качестве обобщения метода фиктивных компонент предлагается новый вариант метода итерационных расширений. Продолженная задача в матричном виде решается методом итерационных расширений. Показывается, что в предложенном варианте метода итерационных расширений относительная ошибка сходится в норме более сильной, чем энергетическая норма задачи со скоростью геометрической прогрессии. Итерационные параметры в указанном методе выбираются с помощью метода минимальных невязок. Указываются условия достаточные для сходимости применяемого итерационного процесса. Выписан алгоритм, реализующий предложенный вариант метода итерационных расширений. В данном алгоритме производится автоматический выбор итерационных параметров и указывается критерий остановки при достижении оценки требуемой точности. Приводится пример применения метода итерационных расширений для решения частной задачи. В расчетах ставится условие достижения оценки относительной ошибки в норме более сильной, чем энергетическая норма задачи. Но приводятся относительные ошибки полученного численного решения примера исходной задачи и другими способами. Например, вычисляется поточно относительная ошибка в узлах сетки. Для достижения относительной ошибки не более нескольких процентов требуются всего несколько итераций. Вычислительные эксперименты подтверждают асимптотическую оптимальность метода, полученную в теории.

Ключевые слова: уравнение Пуассона; метод фиктивных компонент; метод итерационных расширений.

Введение

Рассмотрим смешанную краевую задачу с однородными краевыми условиями Дирихле и Неймана для эллиптического уравнения Пуассона в ограниченной области. Основные проблемы при решении эллиптических задач обычно связаны со сложностью геометрии области, высотой порядка дифференциального уравнения и наличием краевого условия Дирихле [1–5]. Будем исходить из желаемых положений, что предлагаемые численные методы должны являться устойчивыми к вычислительным ошибкам округления, быть асимптотически оптимальными по вычислительным затратам в арифметических операциях, являться достаточно универсальными и при этом иметь не сложную реализацию при автоматизации вычислительного процесса. Для возможного преодоления указанных трудностей и реализации указанных положений при решении рассматриваемой задачи используем в разных вариантах методы типа фиктивных компонент с применением модернизации и обобщения указанных методов, что приведет к их усложнению, но не кардинального характера [4–7]. Отметим, что для решения задачи в прямоугольной области, к решению которой будет сводиться решение рассматриваемой задачи, можно использовать, например, известные маршевые методы оптимальные по вычислительным затратам [8–11].

1. Области

Пусть задана первая ограниченная плоская область и выбирается вторая ограниченная плоская область.

$$\Omega_\alpha \subset \mathbb{R}^2, \alpha \in \{I, II\}.$$

Требуется, чтобы пересечение этих областей было пусто, а объединение их замыканий было замыканием прямоугольной области.

$$\Omega_I \cap \Omega_{II} = \emptyset, \bar{\Omega}_I \cup \bar{\Omega}_{II} = \bar{\Pi}.$$

У каждой из этих трех областей граница состоит из замыкания объединения двух открытых непересекающихся частей.

$$\partial\Pi = \bar{s}, s = \Gamma_I \cup \Gamma_{II}, \Gamma_I \cap \Gamma_{II} = \emptyset.$$

$$\partial\Omega_\alpha = \bar{s}_\alpha, s_\alpha = \Gamma_{\alpha,1} \cup \Gamma_{\alpha,2}, \Gamma_{\alpha,1} \cap \Gamma_{\alpha,2} = \emptyset.$$

Полагаем, что пересечение границ первой и второй области является замыканием непустого пересечения первой части границы первой области со второй частью границы второй области.

$$\partial\Omega_I \cap \partial\Omega_{II} = \bar{S}, S = \Gamma_{I,1} \cap \Gamma_{II,2} \neq \emptyset.$$

Все рассматриваемые части границ у всех областей являются объединением конечного числа непересекающихся открытых дуг достаточно гладких кривых. Рассматриваются области границы, которых не имеют самопересечений и самокасаний.

2. Краевые задачи в операторном и вариационном видах

В первой области рассматриваем смешанную краевую задачу для уравнения Пуассона. Во второй области вводим смешанную краевую задачу для однородного экранированного уравнения Пуассона. На первых частях границ областей задаем однородное условие Дирихле. На вторых частях границ областей рассматриваем однородное условие Неймана. Задача на первой области является решаемой задачей. Задачу на второй области рассматриваем в качестве нулевого фиктивного продолжения решаемой задачи. Приведем решаемую и фиктивную задачу в операторном виде:

$$\begin{aligned} \Delta \check{u}_\alpha + \kappa_\alpha \check{u}_\alpha &= \check{f}_\alpha, \kappa_I = 0, \kappa_{II} \geq 0, \check{f}_{II} = 0, \\ \check{u}_\alpha|_{\Gamma_{\alpha,1}} &= 0, \frac{\partial \check{u}_\alpha}{\partial n}|_{\Gamma_{\alpha,2}} = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Рассмотрим решаемую и фиктивную задачи в вариационном виде как задачи представления линейных функционалов в виде скалярных произведений в функциональных пространствах.

$$\check{u}_\alpha \in \check{H}_\alpha: A_\alpha(\check{u}_\alpha, \check{v}_\alpha) = F_\alpha(\check{v}_\alpha) \quad \forall \check{v}_\alpha \in \check{H}_\alpha. \quad (2)$$

Пространства решений для таких задач будут следующие пространства функций Соболева

$$\check{H}_\alpha = \check{H}_\alpha(\Omega_\alpha) = \left\{ \check{v}_\alpha \in W_2^1(\Omega_\alpha) : \check{v}|_{\Gamma_{\alpha,1}} = 0 \right\}.$$

Правые части этих задач являются линейными функционалами

$$F_\alpha(\check{v}_\alpha) = (\check{f}_\alpha, \check{v}_\alpha), (\check{f}_\alpha, \check{v}_\alpha) = \int_{\Omega_\alpha} \check{f}_\alpha \check{v}_\alpha d\Omega_\alpha.$$

В левых частях этих задач стоят билинейные формы

$$A_\alpha(\check{u}_\alpha, \check{v}_\alpha) = \int_{\Omega_\alpha} (\check{u}_{\alpha x} \check{v}_{\alpha y} + \check{u}_{\alpha y} \check{v}_{\alpha x} + \kappa_\alpha \check{u}_\alpha \check{v}_\alpha) d\Omega_\alpha.$$

Полагаем, что билинейные формы задают в пространствах решений рассматриваемых задач нормировки эквивалентные нормировкам соответствующих пространств Соболева

$$\exists c_1, c_2 > 0: c_1 \|\check{v}_\alpha\|_{W_2^1(\Omega_\alpha)}^2 \leq A_\alpha(\check{v}_\alpha, \check{v}_\alpha) \leq c_2 \|\check{v}_\alpha\|_{W_2^1(\Omega_\alpha)}^2 \quad \forall \check{v}_\alpha \in \check{H}_\alpha.$$

Эти предположения обеспечивают существование и единственность решения у каждой из рассматриваемых задач, физических систем [1]. Заметим, что решение фиктивной задачи нулевое.

3. Продолженная задача в вариационном виде

Возможно совместное рассмотрение решаемой и фиктивной задач в вариационном виде. Таковую задачу будем называть продолженной задачей

$$\tilde{u} \in \tilde{V} : A_1(\tilde{u}, I_1 \tilde{v}) + A_{II}(\tilde{u}, \tilde{v}) = F_1(I_1 \tilde{v}) \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{V}. \quad (3)$$

Расширенное пространство решений для такой задачи будет следующее пространство функций Соболева.

$$\tilde{V} = \tilde{V}(\Pi) = \left\{ \tilde{v} \in W_2^1(\Pi) : \tilde{v}|_{\Gamma_1} = 0 \right\}.$$

В расширенном пространстве решений находится подпространство являющееся пространством решений продолженной задачи. Это пространство решений исходной задачи в первой области, проложенное нулем на остальную часть прямоугольной области

$$\tilde{V}_1 = \tilde{V}_1(\Pi) = \left\{ \tilde{v}_1 \in \tilde{V} : \tilde{v}_1|_{\Pi \setminus \Omega_1} = 0 \right\}.$$

В формулировке продолженной задачи используем оператор проектирования из расширенного пространства решений продолженной задачи на пространство ее решений

$$I_1 : \tilde{V} \mapsto \tilde{V}_1, \tilde{V}_1 = im I_1, I_1 = I_1^2.$$

Дополнительно введем подпространства в расширенном пространстве решений

$$\tilde{V}_3 = \tilde{V}_3(\Pi) = \left\{ \tilde{v}_3 \in \tilde{V} : \tilde{v}_3|_{\Pi \setminus \Omega_{II}} = 0 \right\},$$

$$\tilde{V}_2 = \tilde{V}_2(\Pi) = \left\{ \tilde{v}_2 \in \tilde{V} : A(\tilde{v}_2, \tilde{v}_1) = 0 \quad \forall \tilde{v}_1 \in \tilde{V}_1, A(\tilde{v}_2, \tilde{v}_3) = 0 \quad \forall \tilde{v}_3 \in \tilde{V}_3 \right\}, \tilde{V} = \tilde{V}_1 \oplus \tilde{V}_2 \oplus \tilde{V}_3.$$

Мы использовали билинейную форму являющуюся суммой билинейных форм

$$A(\tilde{u}, \tilde{v}) = A_1(\tilde{u}, \tilde{v}) + A_{II}(\tilde{u}, \tilde{v}) \quad \forall \tilde{u}, \tilde{v} \in \tilde{V}.$$

Полагаем, что билинейная форма задает в расширенном пространстве решений нормировку эквивалентную нормировке соответствующего пространства Соболева.

$$\exists c_1, c_2 > 0 : c_1 \|\tilde{v}\|_{W_2^1(\Pi)}^2 \leq A(\tilde{v}, \tilde{v}) \leq c_2 \|\tilde{v}\|_{W_2^1(\Pi)}^2 \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{V}.$$

Предполагаем, что используемые пространства Соболева таковы, что в них возможно продолжение функций с сохранением нормы. Обычное в таких случаях это положение будем использовать в указываемом виде

$$\exists \tilde{\beta}_1 \in (0; 1], \tilde{\beta}_2 \in [\tilde{\beta}_1; 1] : \tilde{\beta}_1 A(\tilde{v}_2, \tilde{v}_2) \leq A_{II}(\tilde{v}_2, \tilde{v}_2) \leq \tilde{\beta}_2 A(\tilde{v}_2, \tilde{v}_2) \quad \forall \tilde{v}_2 \in \tilde{V}_2.$$

В таком случае у продолженной задачи существует и единственное решение. Решение продолженной задачи – это решение исходной задачи в первой области, продолженное нулем на остальную часть прямоугольной области.

4. Модифицированный метод фиктивных компонент в вариационном виде

Рассмотрим итерационный процесс, на каждом шаге которого решаем расширенную задачу с билинейной формой из продолженной задачи, но без оператора проектирования. Решение этой задачи ищем в расширенном пространстве решений продолженной задачи, в пространстве решений расширенной задачи

$$\begin{aligned} \tilde{u}^k \in \tilde{V} : A(\tilde{u}^k - \tilde{u}^{k-1}, \tilde{v}) &= -\tau_{k-1} (A_1(\tilde{u}^{k-1}, I_1 \tilde{v}) + A_{II}(\tilde{u}^{k-1}, \tilde{v}) - F_1(I_1 \tilde{v})), \quad k \in \mathbb{N} \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{V}, \\ \forall \tilde{u}^0 \in \tilde{V}, \tau_0 &= 1, \tau_{k-1} = 2/(\tilde{\beta}_1 + \tilde{\beta}_2), \quad k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Этот итерационный процесс имеет оценки сходимости

$$\|\tilde{u}^k - \tilde{u}\|_{\tilde{V}} \leq \varepsilon \|\tilde{u}^0 - \tilde{u}\|_{\tilde{V}}, \quad \varepsilon = cq^{k-1}, \quad k \in \mathbb{N}, \quad c = \sqrt{\|I_1\|_{\tilde{V}}^2 - 1}, \quad 0 \leq q = (\tilde{\beta}_2 - \tilde{\beta}_1)/(\tilde{\beta}_1 + \tilde{\beta}_2) < 1.$$

Мы использовали энергетическую норму, порождаемую билинейной формой расширенной задачи

$$\|\tilde{v}\|_{\tilde{V}} = \sqrt{A(\tilde{v}, \tilde{v})} \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{V}.$$

5. Конечномерное подпространство

Зададим введенную ранее прямоугольную область и части ее границы в прямоугольной системе координат

$\Pi = (0; b_1) \times (0; b_2)$, $\Gamma_1 = \{b_1\} \times (0; b_2) \cup (0; b_1) \times \{b_2\}$, $\Gamma_2 = \{0\} \times (0; b_2) \cup (0; b_1) \times \{0\}$, $b_1, b_2 \in (0; +\infty)$.

В этой прямоугольной области, на второй части ее границы и в начале координат введем сетку

$$(x_i; y_j) = ((i-1)h_1; (j-1)h_2), \quad h_1 = b_1/m, \quad h_2 = b_2/n, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad m, n \in \mathbb{N}.$$

Рассмотрим сеточные функции со значениями в узлах введенной сетки

$$v_{i,j} = v(x_i; y_j) \in \mathbb{R}, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad m, n \in \mathbb{N}.$$

Для восполнения сеточных функций используем билинейные базисные функции

$$\Phi^{i,j}(x; y) = \Psi^{1,i}(x) \Psi^{2,j}(y), \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad m, n \in \mathbb{N},$$

$$\Psi^{1,i}(x) = \Psi(x/h_1 - i + 1), \quad \Psi^{2,i}(y) = \Psi(y/h_2 - j + 1),$$

$$\Psi(z) = \begin{cases} z, & z \in [0; 1], \\ 2 - z, & z \in [1; 2], \\ 0, & z \notin [0; 2]. \end{cases}$$

Дополнительно полагаем, что значения базисных функций вне заданной прямоугольной области равны нулю

$$\Phi^{i,j}(x; y) = 0, \quad (x; y) \notin \Pi, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad m, n \in \mathbb{N}.$$

Линейные комбинации базисных функций образуют конечномерное подпространство в пространстве решений расширенной задачи

$$\tilde{V} = \left\{ \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n v_{i,j} \Phi^{i,j}(x; y) \right\} \subset \tilde{V}.$$

6. Продолженная задача в вариационном виде на конечномерном подпространстве

Рассмотрим продолженную задачу в вариационном виде при замене пространства ее решений на введенное ранее его конечномерное пространство

$$\tilde{u} \in \tilde{V} : A_1(\tilde{u}, I_1 \tilde{v}) + A_{\Pi}(\tilde{u}, \tilde{v}) = F_1(I_1 \tilde{v}) \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{V}. \quad (5)$$

В используемом теперь конечномерном пространстве находится конечномерное подпространство решений для продолженной задачи. Это конечномерное пространство решений исходной задачи в первой области, проложенное нулем на остальную часть прямоугольной области

$$\tilde{V}_1 = \tilde{V}_1(\Pi) = \left\{ \tilde{v}_1 \in \tilde{V} : \tilde{v}_1|_{\Pi \setminus \Omega_1} = 0 \right\}.$$

Полагаем, что оператор проектирования действует аналогично на соответствующих конечномерных подпространствах

$$I_1 : \tilde{V} \mapsto \tilde{V}_1, \quad \tilde{V}_1 = im I_1, \quad I_1 = I_1^2.$$

Дополнительно введем соответствующие конечномерные подпространства

$$\tilde{V}_3 = \tilde{V}_3(\Pi) = \left\{ \tilde{v}_3 \in \tilde{V} : \tilde{v}_3|_{\Pi \setminus \Omega_{\Pi}} = 0 \right\},$$

$$\tilde{V}_2 = \tilde{V}_2(\Pi) = \left\{ \tilde{v}_2 \in \tilde{V} : A(\tilde{v}_2, \tilde{v}_1) = 0 \quad \forall \tilde{v}_1 \in \tilde{V}_1, \quad A(\tilde{v}_2, \tilde{v}_3) = 0 \quad \forall \tilde{v}_3 \in \tilde{V}_3 \right\}, \quad \tilde{V} = \tilde{V}_1 \oplus \tilde{V}_2 \oplus \tilde{V}_3.$$

Будем предполагать, что для конечномерных подпространств, аппроксимирующих соответствующие пространства, выполняются предположения о продолжении функций в прежнем виде.

$$\exists \tilde{\beta}_1 \in (0; 1], \quad \tilde{\beta}_2 \in [\tilde{\beta}_1; 1] : \tilde{\beta}_1 A(\tilde{v}_2, \tilde{v}_2) \leq A_{\Pi}(\tilde{v}_2, \tilde{v}_2) \leq \tilde{\beta}_2 A(\tilde{v}_2, \tilde{v}_2) \quad \forall \tilde{v}_2 \in \tilde{V}_2.$$

Также вместо билинейных базисных функций, например, можно использовать кусочно-линейные базисные функции.

7. Модифицированный метод фиктивных компонент в вариационном виде на конечномерном подпространстве

Рассмотрим модифицированный метод фиктивных компонент в вариационном виде на конечномерном подпространстве

$$\tilde{u}^k \in \tilde{V} : A(\tilde{u}^k - \tilde{u}^{k-1}, \tilde{v}) = -\tau_{k-1} (A_1(\tilde{u}^{k-1}, I_1 \tilde{v}) + A_{\Pi}(\tilde{u}^{k-1}, \tilde{v}) - F_1(I_1 \tilde{v})), \quad k \in \mathbb{N} \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{V},$$

$$\forall \tilde{u}^0 \in \tilde{V}_1, \tau_0 = 1. \tau_{k-1} = 2/(\tilde{\beta}_1 + \tilde{\beta}_2), k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}. \quad (6)$$

Этот итерационный процесс имеет оценки сходимости следующего вида

$$\|\tilde{u}^k - \tilde{u}\|_{\tilde{V}} \leq \varepsilon \|\tilde{u}^0 - \tilde{u}\|_{\tilde{V}}, \varepsilon = cq^{k-1}, k \in \mathbb{N}, c = \sqrt{\|I_1\|_{\tilde{V}}^2 - 1}, 0 \leq q = (\tilde{\beta}_2 - \tilde{\beta}_1)/(\tilde{\beta}_1 + \tilde{\beta}_2) < 1.$$

Здесь мы использовали энергетическую норму, порождаемую билинейной формой расширенной задачи на конечномерном подпространстве

$$\|\tilde{v}\|_{\tilde{V}} = \sqrt{A(\tilde{v}, \tilde{v})} \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{V}.$$

8. Продолженная задача в матричном виде

Аппроксимируя продолженную задачу с помощью конечномерного подпространства, получим линейную систему алгебраических уравнений

$$\bar{u} \in \mathbb{R}^N : B\bar{u} = \bar{f}, \bar{f} \in \mathbb{R}^N. \quad (7)$$

При этом считаем, что оператор проектирования на пространство решений продолженной задачи обнуляет все коэффициенты при базисных функциях, носители которых не лежат полностью в первой области. Получаем продолженную задачу в матричном виде, определив продолженную матрицу и продолженную правую часть системы

$$\langle B\bar{u}, \bar{v} \rangle = A_1(\bar{u}, I_1\bar{v}) + A_{II}(\bar{u}, \bar{v}) \quad \forall \bar{u}, \bar{v} \in \tilde{V}, \langle \bar{f}, \bar{v} \rangle = F_1(I_1\bar{v}) \quad \forall \bar{v} \in \tilde{V},$$

$$\langle \bar{f}, \bar{v} \rangle = (\bar{f}, \bar{v})h_1h_2 = \bar{f}\bar{v}h_1h_2, \bar{v} = (v_1, v_2, \dots, v_N)' \in \mathbb{R}^N, N = mn.$$

В качестве примера рассмотрим нумерацию узлов сетки, коэффициентов при базисных функциях и соответствующих базисных функций.

$$v_{n(i-1)+j} = v_{i,j}, \Phi_{n(i-1)+j} = \Phi^{i,j}(x_i; y_j), i = 1, 2, \dots, m, j = 1, 2, \dots, n,$$

$$\tilde{v} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n v_{i,j} \Phi^{i,j}(x; y) = \sum_{l=1}^N v_l \Phi_l.$$

Но нумеруем сначала базисные функции, носители которых полностью содержатся в первой области. Далее продолжаем нумеровать базисные функции, носители которых пересекают границу первой области и второй области одновременно. Завершаем нумерацию на базисных функциях носители, которых полностью содержатся во второй области. При такой нумерации возникающие векторы имеют следующий вид

$$\bar{v} = (\bar{v}_1', \bar{v}_2', \bar{v}_3')', \bar{u} = (\bar{u}_1', \bar{0}' \bar{0}')', \bar{f} = (\bar{f}_1', \bar{0}' \bar{0}')'.$$

Вычисляем элементы матрицы, компоненты вектора правой части, приведенной системы

$$b_{ij} = h_1^{-1}h_2^{-1}(A_1(\Phi_i, I_1\Phi_j) + A_{II}(\Phi_i, \Phi_j)), f_i = h_1^{-1}h_2^{-1}F_1(I_1\Phi_i), i, j = 1, 2, \dots, N.$$

9. Метод фиктивных компонент в матричном виде

Аппроксимируя модифицированный метод фиктивных компонент в вариационном виде с помощью конечномерного подпространства при указанном ранее операторе проектирования, получим известный метод фиктивных компонент в матричном виде

$$\bar{u}^k \in \mathbb{R}^N : A(\bar{u}^k - \bar{u}^{k-1}) = -\tau_{k-1}(B\bar{u}^{k-1} - \bar{f}), k \in \mathbb{N},$$

$$\forall \bar{u}^0 \in \bar{V}_1, \tau_0 = 1. \tau_{k-1} = 2/(\tilde{\beta}_1 + \tilde{\beta}_2), k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}. \quad (8)$$

На каждом шаге этого итерационного процесса получаем расширенную задачу в матричном виде с расширенной матрицей

$$\langle A\bar{u}, \bar{v} \rangle = A(\bar{u}, \bar{v}) \quad \forall \bar{u}, \bar{v} \in \tilde{V}.$$

Вычисляем элементы этой матрицы

$$a_{ij} = h_1^{-1}h_2^{-1}A(\Phi_i, \Phi_j), i, j = 1, 2, \dots, N.$$

Возникающие матрицы имеют известную структуру

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ 0 & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 \\ 0 & A_{02} & A_{23} \\ 0 & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}.$$

Используем подпространство векторов

$$\bar{V}_1 = \{ \bar{v} = (\bar{v}'_1, \bar{v}'_2, \bar{v}'_3)' \in \mathbb{R}^N : \bar{v}_2 = \bar{0}, \bar{v}_3 = \bar{0} \}.$$

Дополнительно введем подпространства векторов, как и предыдущие соответствующие конечномерным подпространствам введенным ранее

$$\bar{V}_3 = \{ \bar{v} = (\bar{v}'_1, \bar{v}'_2, \bar{v}'_3)' \in \mathbb{R}^N : \bar{v}_1 = \bar{0}, \bar{v}_2 = \bar{0} \},$$

$$\bar{V}_2 = \{ \bar{v} = (\bar{v}'_1, \bar{v}'_2, \bar{v}'_3)' \in \mathbb{R}^N : A_{11}\bar{v}_1 + A_{12}\bar{v}_2 = \bar{0}, A_{23}\bar{v}_2 + A_{33}\bar{v}_3 = \bar{0} \}, \mathbb{R}^N = \bar{V}_1 \oplus \bar{V}_2 \oplus \bar{V}_3.$$

Отметим, что в методе фиктивных компонент решается продолженная задача в матричном виде

$$B\bar{u} = \bar{f}, \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 \\ 0 & A_{02} & A_{23} \\ 0 & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{u}_1 \\ \bar{0} \\ \bar{0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{f}_1 \\ \bar{0} \\ \bar{0} \end{bmatrix},$$

По решению продолженной задачи в матричном виде получаются решения соответственно исходной задачи в матричном виде и нулевое решение фиктивной задачи в матричном виде

$$A_{11}\bar{u}_1 = \bar{f}_1, \begin{bmatrix} A_{02} & A_{23} \\ A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{u}_2 \\ \bar{u}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{0} \\ \bar{0} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \bar{u}_2 \\ \bar{u}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{0} \\ \bar{0} \end{bmatrix}.$$

Введем нормы, порождаемые единичной матрицей, расширенной матрицей и ее квадратом

$$\|\bar{v}\| = \sqrt{\langle \bar{v}, \bar{v} \rangle}, \|\bar{v}\|_A = \sqrt{\langle A\bar{v}, \bar{v} \rangle}, \|\bar{v}\|_{A^2} = \sqrt{\langle A^2\bar{v}, \bar{v} \rangle} \quad \forall \bar{v} \in \mathbb{R}^N.$$

Лемма 1. В итерационном процессе метода фиктивных компонент (8) выполняется оценка

$$\|\bar{u}^1 - \bar{u}\|_{A^2} \leq 2\|\bar{u}^0 - \bar{u}\|_{A^2}.$$

Доказательство. Введем обозначение ошибки в итерационном процессе (8)

$$\bar{\psi}^k = \bar{u}^k - \bar{u}, k \in \mathbb{N} \cup \{0\}.$$

Из итерационного процесса получаем равенства

$$(A(\bar{\psi}^1 - \bar{\psi}^0))^2 = (-A_{11}\bar{\psi}_1^0)^2, A\bar{\psi}^1 A\bar{\psi}^1 - 2A\bar{\psi}^1 A\bar{\psi}^0 + A\bar{\psi}^0 A\bar{\psi}^0 = A_{11}\bar{\psi}_1^0 A_{11}\bar{\psi}_1^0.$$

Заметим, что имеет место неравенство

$$A\bar{\psi}^0 A\bar{\psi}^0 \geq A_{11}\bar{\psi}_1^0 A_{11}\bar{\psi}_1^0.$$

Получаем неравенства

$$A\bar{\psi}^1 A\bar{\psi}^1 - 2A\bar{\psi}^1 A\bar{\psi}^0 \leq 0, (A\bar{\psi}^1 A\bar{\psi}^1)^2 \leq (2A\bar{\psi}^1 A\bar{\psi}^0)^2 \leq 4(A\bar{\psi}^1 A\bar{\psi}^1)(A\bar{\psi}^0 A\bar{\psi}^0).$$

После сокращения получаем следующие неравенства

$$A\bar{\psi}^1 A\bar{\psi}^1 \leq 4A\bar{\psi}^0 A\bar{\psi}^0, \|\bar{\psi}^1\|_{A^2} \leq 2\|\bar{\psi}^0\|_{A^2}, \|\bar{u}^1 - \bar{u}\|_{A^2} \leq 2\|\bar{u}^0 - \bar{u}\|_{A^2}.$$

Лемма 2. В итерационном процессе метода фиктивных компонент (8) выполняется оценка

$$\|\bar{u}^1 - \bar{u}\|_A \leq d\|\bar{u}^1 - \bar{u}\|_{A^2}, d \approx 2\pi^{-1}(b_1^{-2} + b_2^{-2})^{-1/2}, h_1, h_2 \rightarrow 0, \kappa_{II} = 0.$$

Доказательство. Заметим, что выполняется неравенство

$$\exists d > 0 : (A\bar{\psi}^1, \bar{\psi}^1) \leq d^2 (A\bar{\psi}^1, A\bar{\psi}^1),$$

$$\sum_{i=1}^{+\infty} \sum_{j=1}^{+\infty} \lambda_{i,j} c_{i,j}^2 = (-\Delta\bar{\psi}^1, \bar{\psi}^1) \leq d^2 (\Delta\bar{\psi}^1, \Delta\bar{\psi}^1) = d^2 \sum_{i=1}^{+\infty} \sum_{j=1}^{+\infty} \lambda_{i,j}^2 c_{i,j}^2.$$

Получаем асимптотическое равенство

$$d \approx \lambda_{1,1}^{-1/2} = 2\pi^{-1}(b_1^{-2} + b_2^{-2})^{-1/2}, h_1, h_2 \rightarrow 0.$$

Здесь использовали свойства решений спектральной задачи.

$$\bar{\psi}^1 = \sum_{i=1}^{+\infty} \sum_{j=1}^{+\infty} c_{i,j} \bar{\varphi}_{i,j}, (\bar{\varphi}_{i,j}, \bar{\varphi}_{i,j}) = 1, (\bar{\varphi}_{i,j}, \bar{\varphi}_{p,l}) = 0, (i,j) \neq (p,l), i, j, p, l \in \mathbb{N},$$

где

$$\bar{\varphi}_{i,j} \in V((0;b_1) \times (0;b_2)) : -\Delta \bar{\varphi}_{i,j} = \lambda_{i,j} \bar{\varphi}_{i,j}, \bar{\varphi}_{i,j} \neq 0, \lambda_{i,j} = 0,25\pi^2 \left((2i-1)b_1^{-2} + (2j-1)b_2^{-2} \right), i, j \in \mathbb{N}.$$

Мы рассматривали случай, когда константа экранирования в фиктивной задаче равна нулю, полагая, что иначе рассматриваемая в лемме 2 оценка все равно не должна зависеть от параметров дискретизации.

Теорема 1. В итерационном процессе метода фиктивных компонент (8) выполняются оценки сходимости

$$\begin{aligned} \|\bar{u}^k - \bar{u}\|_A &\leq \varepsilon \|\bar{u}^0 - \bar{u}\|_{A_2} = \varepsilon \|\bar{f}^0 - \bar{f}\|, \\ \varepsilon &= cq^{k-1}, c \in (0+\infty), k \in \mathbb{N}, \bar{f}^0 = A\bar{u}^0, 0 \leq q = (\tilde{\beta}_2 - \tilde{\beta}_1)/(\tilde{\beta}_1 + \tilde{\beta}_2) < 1, \\ c &\approx 4\pi^{-1}(b_1^{-2} + b_2^{-2})^{-1/2}, h_1, h_2 \rightarrow 0, \kappa_{II} = 0. \end{aligned}$$

В методе фиктивных компонент абсолютная ошибка в энергетической норме сходится со скоростью геометрической прогрессии.

10. Метод итерационных расширений

Для решения прежней задачи (7) применим новый метод. Определим матрицы, которые будем использовать в дальнейшем

$$\langle A_I \bar{u}, \bar{v} \rangle = A_I(\bar{u}, \bar{v}), \langle A_{II} \bar{u}, \bar{v} \rangle = A_{II}(\bar{u}, \bar{v}) \quad \forall \bar{u}, \bar{v} \in \tilde{V}.$$

Введенные две матрицы имеют определенную структуру

$$A_I = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 \\ A_{21} & A_{20} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, A_{II} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{02} & A_{23} \\ 0 & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}.$$

Определим теперь по-другому расширенную матрицу как сумму первой матрицы со второй матрицей, умноженной на дополнительный положительный параметр

$$C = A_I + \gamma A_{II}, \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & 0 \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ 0 & C_{32} & C_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 \\ A_{21} & A_{20} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \gamma \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{02} & A_{23} \\ 0 & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}, \gamma \in (0; +\infty).$$

Будем предполагать, что для конечномерных пространств, аппроксимирующих соответствующие пространства, выполняются предположения о продолжении функций, которые запишем в матричном виде.

$$\begin{aligned} \exists \beta_1 \in (0; +\infty), \beta_2 \in [\beta_1; +\infty) : \beta_1^2 \langle C\bar{v}_2, C\bar{v}_2 \rangle &\leq \langle A_{II}\bar{v}_2, A_{II}\bar{v}_2 \rangle \leq \beta_2^2 \langle C\bar{v}_2, C\bar{v}_2 \rangle \quad \forall \bar{v}_2 \in \bar{V}_2, \\ \exists \alpha \in (0; +\infty) : \langle A_I\bar{v}_2, A_I\bar{v}_2 \rangle &\leq \alpha^2 \langle A_{II}\bar{v}_2, A_{II}\bar{v}_2 \rangle \quad \forall \bar{v}_2 \in \bar{V}_2. \end{aligned}$$

Далее используем только последнее неравенство

$$\begin{aligned} \langle C\bar{v}_2, C\bar{v}_2 \rangle &= \langle A_I\bar{v}_2, A_I\bar{v}_2 \rangle + 2\gamma \langle A_I\bar{v}_2, A_{II}\bar{v}_2 \rangle + \gamma^2 \langle A_{II}\bar{v}_2, A_{II}\bar{v}_2 \rangle \leq 2 \langle A_I\bar{v}_2, A_I\bar{v}_2 \rangle + 2\gamma^2 \langle A_{II}\bar{v}_2, A_{II}\bar{v}_2 \rangle \leq \\ &\leq 2(\alpha^2 + \gamma^2) \langle A_{II}\bar{v}_2, A_{II}\bar{v}_2 \rangle. \end{aligned}$$

Получаем оценку снизу для константы первого неравенства

$$0,5(\alpha^2 + \gamma^2)^{-1} \leq \beta_1^2.$$

Предполагаем, что есть асимптотическое равенство

$$\langle C\bar{v}_2, C\bar{v}_2 \rangle \approx \langle A_I\bar{v}_2, A_I\bar{v}_2 \rangle + \gamma^2 \langle A_{II}\bar{v}_2, A_{II}\bar{v}_2 \rangle, h_1, h_2 \rightarrow 0,$$

Получаем асимптотические оценки констант первого и второго неравенств

$$\beta_1^2 \approx (\alpha^2 + \gamma^2)^{-1}, \beta_2^2 \approx \gamma^{-2}, h_1, h_2 \rightarrow 0.$$

Рассматриваем метод итерационных расширений, как обобщение метода фиктивных компонент, используя введение дополнительного параметра в расширенной матрице. Отметим, что метод фиктивных компонент при единичном значении этого дополнительного параметра получается из метода итерационных расширений только без учета выбора итерационных параметров

$$\bar{u}^k \in \mathbb{R}^N : C(\bar{u}^k - \bar{u}^{k-1}) = -\tau_{k-1}(B\bar{u}^{k-1} - \bar{f}), k \in \mathbb{N},$$

$$\forall \bar{u}^0 \in \bar{V}_1, \gamma > \alpha, \tau_0 = 1, \tau_{k-1} = \frac{\langle \bar{r}^{k-1}, \bar{\eta}^{k-1} \rangle}{\langle \bar{\eta}^{k-1}, \bar{\eta}^{k-1} \rangle}, k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}. \quad (9)$$

Для вычисления итерационных параметров необходимо вычислять невязки, поправки и эквивалентные невязки соответственно

$$\bar{r}^{k-1} = B\bar{u}^{k-1} - \bar{f}, \bar{w}^{k-1} = C^{-1}\bar{r}^{k-1}, \eta^{k-1} = B\bar{w}^{k-1}, k \in \mathbb{N}.$$

Лемма 3. В методе итерационных расширений (9) выполняется оценка

$$\|\bar{u}^1 - \bar{u}\|_{C^2} \leq 2\|\bar{u}^0 - \bar{u}\|_{C^2}.$$

Доказательство. Введем обозначение ошибки в итерационном процессе (9)

$$\bar{\psi}^k = \bar{u}^k - \bar{u}, k \in \mathbb{N} \cup \{0\}.$$

Из итерационного процесса получаем равенства

$$\begin{aligned} \langle C(\bar{\psi}^1 - \bar{\psi}^0), C(\bar{\psi}^1 - \bar{\psi}^0) \rangle &= \langle -A_{11}\bar{\psi}_1^0, -A_{11}\bar{\psi}_1^0 \rangle, \\ \langle C\bar{\psi}^1, C\bar{\psi}^1 \rangle - 2\langle C\bar{\psi}^1, A\bar{\psi}^0 \rangle + \langle C\bar{\psi}^0, A\bar{\psi}^0 \rangle &= \langle A_{11}\bar{\psi}_1^0, A_{11}\bar{\psi}_1^0 \rangle. \end{aligned}$$

Заметим, что имеет место неравенство

$$\langle C\bar{\psi}^0, C\bar{\psi}^0 \rangle \geq \langle A_{11}\bar{\psi}_1^0, A_{11}\bar{\psi}_1^0 \rangle.$$

Получаем неравенства

$$\langle C\bar{\psi}^1, C\bar{\psi}^1 \rangle - 2\langle C\bar{\psi}^1, C\bar{\psi}^0 \rangle \leq 0, \langle C\bar{\psi}^1, C\bar{\psi}^1 \rangle^2 \leq 4\langle C\bar{\psi}^1, C\bar{\psi}^0 \rangle^2 \leq 4\langle C\bar{\psi}^1, C\bar{\psi}^1 \rangle \langle C\bar{\psi}^0, C\bar{\psi}^0 \rangle.$$

После сокращения получаем следующие неравенства

$$\langle C\bar{\psi}^1, C\bar{\psi}^1 \rangle \leq 4\langle C\bar{\psi}^0, C\bar{\psi}^0 \rangle, \|\bar{\psi}^1\|_{C^2} \leq 2\|\bar{\psi}^0\|_{C^2}, \|\bar{u}^1 - \bar{u}\|_{C^2} \leq 2\|\bar{u}^0 - \bar{u}\|_{C^2}.$$

Теорема 2. В методе итерационных расширений (9) выполняются оценки сходимости.

$$\|\bar{u}^k - \bar{u}\|_{C^2} \leq \varepsilon \|\bar{u}^0 - \bar{u}\|_{C^2}, \varepsilon = 2(\beta_2/\beta_1)(\alpha/\gamma)^{k-1}, k \in \mathbb{N}.$$

В методе итерационных расширений относительная ошибка в норме более сильной, чем энергетическая норма, сходится со скоростью геометрической прогрессии.

Доказательство. Из итерационного процесса получаем равенства для ошибок и невязок

$$\bar{\psi}^k = \bar{\psi}^{k-1} - \tau_k C^{-1} A_{II} \bar{\psi}^{k-1}, \bar{r}^k = \bar{r}^{k-1} - \tau_k A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1}, k \in \mathbb{N} \setminus 1.$$

Будем минимизировать невязки

$$0 \leq \langle \bar{r}^k, \bar{r}^k \rangle = \tau_k^2 \langle A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1}, A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1} \rangle - 2\tau_k \langle A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1}, \bar{r}^{k-1} \rangle + \langle \bar{r}^{k-1}, \bar{r}^{k-1} \rangle.$$

Выбираем итерационные параметры из условия минимизации невязок

$$\tau_{k-1} = \frac{\langle A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1}, \bar{r}^{k-1} \rangle}{\langle A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1}, A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1} \rangle} = \frac{\langle \bar{r}^{k-1}, \bar{\eta}^{k-1} \rangle}{\langle \bar{\eta}^{k-1}, \bar{\eta}^{k-1} \rangle}.$$

Отметим наличие равенства

$$\tau_{k-1} = \frac{\langle A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1}, \bar{r}^{k-1} \rangle}{\langle A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1}, A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1} \rangle} = \frac{\langle A_{II} \bar{w}^{k-1}, C\bar{w}^{k-1} \rangle}{\langle A_{II} \bar{w}^{k-1}, A_{II} \bar{w}^{k-1} \rangle}.$$

Введем обозначения

$$A_I \bar{w}^{k-1} = \bar{a}, A_{II} \bar{w}^{k-1} = \bar{b}.$$

Устанавливаем положительность выбираемых итерационных параметров

$$\tau_k = \frac{\langle \bar{b}, \bar{a} + \gamma \bar{b} \rangle}{\langle \bar{b}, \bar{b} \rangle} = \gamma - \frac{\langle \bar{a}, \bar{b} \rangle}{\langle \bar{b}, \bar{b} \rangle} \geq \gamma - \frac{\langle \bar{a}, \bar{a} \rangle^{1/2} \langle \bar{b}, \bar{b} \rangle^{1/2}}{\langle \bar{b}, \bar{b} \rangle} \geq \gamma - \frac{\langle \bar{a}, \bar{a} \rangle^{1/2}}{\langle \bar{b}, \bar{b} \rangle^{1/2}} \geq \gamma - \alpha > 0.$$

Приводим скалярные произведения невязок при выбранных итерационных параметрах

$$\langle \bar{r}^k, \bar{r}^k \rangle = \langle \bar{r}^{k-1}, \bar{r}^{k-1} \rangle - \frac{\langle A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1}, \bar{r}^{k-1} \rangle^2}{\langle A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1}, A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1} \rangle}.$$

Выписываем отношение квадратов норм невязок на соседних итерациях

$$q_k^2 = \frac{\langle \bar{r}^k, \bar{r}^k \rangle}{\langle \bar{r}^{k-1}, \bar{r}^{k-1} \rangle} = 1 - \frac{\langle A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1}, \bar{r}^{k-1} \rangle^2}{\langle A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1}, A_{II} C^{-1} \bar{r}^{k-1} \rangle \langle \bar{r}^{k-1}, \bar{r}^{k-1} \rangle} = \\ = \frac{\langle A_{II} \bar{w}^{k-1}, A_{II} \bar{w}^{k-1} \rangle \langle C \bar{w}^{k-1}, C \bar{w}^{k-1} \rangle - \langle A_{II} \bar{w}^{k-1}, C \bar{w}^{k-1} \rangle^2}{\langle A_{II} \bar{w}^{k-1}, A_{II} \bar{w}^{k-1} \rangle \langle C \bar{w}^{k-1}, C \bar{w}^{k-1} \rangle} = \frac{\langle \bar{b}, \bar{b} \rangle \langle \bar{a} + \gamma \bar{b}, \bar{a} + \gamma \bar{b} \rangle - \langle \bar{b}, \bar{a} + \gamma \bar{b} \rangle^2}{\langle \bar{b}, \bar{b} \rangle \langle \bar{a} + \gamma \bar{b}, \bar{a} + \gamma \bar{b} \rangle}.$$

Вводим обозначения

$$\langle \bar{a}, \bar{a} \rangle = a, \langle \bar{b}, \bar{b} \rangle = b, \langle \bar{a}, \bar{b} \rangle = z,$$

тогда

$$q_k^2 = \frac{ab - z^2}{b(a + \gamma^2 b + 2\gamma z)} \leq \max_{|z| \leq \sqrt{ab}} q_k^2(z) = q_k^2\left(\frac{-a}{\gamma}\right) = \frac{a}{\gamma^2 b} \leq \frac{\alpha^2}{\gamma^2} = q^2,$$

учитывая, что

$$q_k^2 \geq 0, \left(q_k^2(z)\right)'_z = \frac{-2\gamma(z + a/\gamma)(z + \gamma b)}{b(a + \gamma^2 b + 2\gamma z)^2}, -\gamma b < \frac{a + \gamma^2 b}{2\gamma} < -\sqrt{ab} < -\frac{a}{\gamma} < \sqrt{ab}.$$

Так устанавливаем неравенства

$$\langle A_{II} \bar{\psi}^k, A_{II} \bar{\psi}^k \rangle \leq q^2 \langle A_{II} \bar{\psi}^{k-1}, A_{II} \bar{\psi}^{k-1} \rangle, \langle A_{II} \bar{\psi}^k, A_{II} \bar{\psi}^k \rangle \leq q^{2(k-1)} \langle A_{II} \bar{\psi}^1, A_{II} \bar{\psi}^1 \rangle, k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}.$$

Учитывая, что

$$\langle C \bar{\psi}^k, C \bar{\psi}^k \rangle \leq \beta_1^{-2} \langle A_{II} \bar{\psi}^k, A_{II} \bar{\psi}^k \rangle, \langle A_{II} \bar{\psi}^1, A_{II} \bar{\psi}^1 \rangle \leq \beta_2^2 \langle C \bar{\psi}^1, C \bar{\psi}^1 \rangle \leq 4\beta_2^2 \langle C \bar{\psi}^0, C \bar{\psi}^0 \rangle,$$

получаем неравенство, из которого следует оценка сходимости в методе итерационных расширений

$$\langle C \bar{\psi}^k, C \bar{\psi}^k \rangle \leq 4\beta_1^{-2} \beta_2^2 q^{2(k-1)} \langle C \bar{\psi}^0, C \bar{\psi}^0 \rangle.$$

11. Алгоритм, реализующий метод итерационных расширений

Используем для выбора итерационных параметров метод минимальных невязок.

1. Задаем нулевое приближение и итерационный параметр

$$\forall \bar{u}^0 \in \bar{V}_1, \tau_0 = 1.$$

2. Вычисляем невязку

$$\bar{r}^{k-1} = B\bar{u}^{k-1} - \bar{f}, k \in \mathbb{N}.$$

3. Определим квадратом нормы абсолютной ошибки

$$E_{k-1} = \langle \bar{r}^{k-1}, \bar{r}^{k-1} \rangle, k \in \mathbb{N}.$$

4. Ищем поправку

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

5. Вычисляем эквивалентную невязку

$$\eta^{k-1} = B\bar{w}^{k-1}, k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}.$$

6. Вычисляем итерационный параметр

$$\tau_{k-1} = \langle \bar{r}^{k-1}, \bar{\eta}^{k-1} \rangle / \langle \bar{\eta}^{k-1}, \bar{\eta}^{k-1} \rangle, k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}.$$

7. Вычисляем очередное приближение.

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

8. Проверяем условие остановки итераций по заранее задаваемой оценке относительной ошибки в более сильной норме, чем энергетическая норма в решаемой задаче

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

12. Пример применения метода итерационных расширений

Рассмотрим задачу, используя следующие области

$$\Pi = (0; 6) \times (0; 6), \Omega_1 = (0; 6) \times (1; 4), \Omega_{II} = (0; 6) \times (0; 1) \cup (0; 6) \times (4; 6).$$

Полагаем, что области имеют границы

$$\Gamma_1 = (0; 6) \times \{6\} \cup (0; b_1) \times \{b_2\}, \Gamma_2 = \{0, 6\} \times (0; 6) \cup (0; 6) \times \{0\}, \Gamma_{1,1} = (0; 6) \times \{1, 4\}, \Gamma_{1,2} = \{0, 6\} \times (1; 4), \\ \Gamma_{II,1} = (0; 6) \times \{6\}, \Gamma_{II,2} = (0; 6) \times \{0, 1, 4\} \cup \{0, 6\} \times (0; 1) \cup \{0, 6\} \times (4; 6).$$

Выбираем правую часть и коэффициент в уравнении

$$\tilde{f}_1(x; y) = 2, (x; y) \in (0; 6) \times (1; 4), \kappa_{II}(x; y) = 2, (x; y) \in (0; 6) \times (0; 1), \kappa_{II}(x; y) = 0, (x; y) \in (0; 6) \times (4; 6).$$

Приведем решение задачи

$$\tilde{u}_1(x; y) = (y - 1)(4 - y), (x; y) \in (0; 6) \times (1; 4).$$

При дискретизации выбираем шаги сетки.

$$h_1 = h_2 = 6/n, n = 6, 12, \dots, 102.$$

В вычислениях по методу итерационных расширений при нулевом начальном приближении устанавливается постоянное количество итераций при заранее задаваемой оценке относительной ошибки

$$k = k(E; n) = 6, E = 0,001.$$

Отметим, что на последней шестой итерации, на самой мелкой из используемых сеток, выполняются неравенства характеризующие точность численного решения в рассматриваемом примере

$$\max_{(x_i; y_j) \in \Omega_1} \frac{|u_{i,j}^6 - u_{i,j}|}{|u_{i,j}|} < 0,0024, \frac{\max_{(x_i; y_j) \in \Omega_1} |u_{i,j}^6 - u_{i,j}|}{\max_{(x_i; y_j) \in \Omega_1} |u_{i,j}|} < 0,0002.$$

Литература

1. Aubin, J.-P. Approximation of Elliptic Boundary-Value Problems / J.-P. Aubin // New York: Wiley-Interscience, 1972. – 360 p.
2. Sorokin, S.B. An economical Algorithm for Numerical Solution of the Problem of Identifying the Right-Hand Side of the Poisson Equation / S.B. Sorokin // Journal of Applied and Industrial Mathematics. – 2018. – Vol. 12, no. 2. – P. 362–368.
3. Sorokin, S.B. An Efficient Direct Method for the Numerical Solution to the Cauchy Problem for the Laplace Equation / S.B. Sorokin // Numerical Analysis and Applications. – 2019. – Vol. 12, no. 12. – P. 87–103.
4. Ushakov, A.L. Investigation of a Mixed Boundary Value Problem for the Poisson Equation / A.L. Ushakov // 2020 International Russian Automation Conference (RusAutoCon), Sochi, Russia. – 2020. – P. 273–278.
5. Ушаков, А.Л. О моделировании деформаций пластин / А.Л. Ушаков // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2015. – Т. 8, № 2. – С. 138–142.
6. Мацокин, А.М. Метод фиктивного пространства и явные операторы продолжения / А.М. Мацокин, С.В. Непомнящих // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1993. – Т. 33, № 1. – С. 52–68.
7. Marchuk, G.I. Fictitious Domain and Domain Decomposition Methods / G.I. Marchuk, Yu.A. Kuznetsov, A.M. Matsokin // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modeling. – 1986. – Vol. 1, Iss. 1. – P. 3–35.
8. Bank, R.E. Marching Algorithms for Elliptic Boundary Value Problems / R.E. Bank, D.J. Rose // SIAM J. on Numer. Anal. – 1977. – Vol. 14, no. 5. – P. 792–829.
9. Manteuffel, T. An Incomplete Factorization Technique for Positive Definite Linear Systems / T. Manteuffel // Math. Comput. – 1980. – Vol. 38, no. 1. – P. 114–123.

10. Swarztrauber, P.N. A Direct Method for Discrete Solution of Separable Elliptic Equations / P.N. Swarztrauber // SIAM Journal on Numerical Analysis. – 1974. – Vol. 11, Iss. 6. – P. 1136–1150.

11. Swarztrauber, P.N. The Method of Cyclic Reduction, Fourier analysis and FACR Algorithms for the Discrete Solution of Poisson's Equations on a Rectangle / P.N. Swarztrauber // SIAM Review. – 1977. – Vol. 19, no. 3. – P. 490–501.

Поступила в редакцию 12 декабря 2020 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 1, pp. 29–40*

DOI: 10.14529/mmph210104

ANALYSIS OF THE MIXED BOUNDARY VALUE PROBLEM FOR THE POISSON'S EQUATION

A.L. Ushakov

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: ushakoal@susu.ru

The mixed boundary value problem for the Poisson's equation is examined in a bounded flat domain. The problem is continued in a variational form through the boundary with the Dirichlet condition to a rectangular domain. To solve the continued problem, a modified method of fictitious components in a variational form is formulated. The continued problem in a variational form is considered on a finite-dimensional space. To solve the previous problem, a modified method of fictitious components on a finite-dimensional space is formulated. To solve the continued problem in matrix form, the known method of fictitious components is considered. It is shown that in the method of fictitious components the absolute error in the energy norm converges with the speed of a geometric progression. To generalize the method of fictitious components, a new version of the method of iterative extensions is proposed. The continued problem in matrix form is solved using the method of iterative extensions. It is shown that in the proposed version of the method of iterative extensions, the relative error converges in a norm that is stronger than the energy norm of the problem with a geometric progression rate. The iterative parameters in the specified method are selected using the minimum residual method. The conditions which are sufficient for the convergence of the applied iterative process are indicated. An algorithm which implements the proposed version of the method of iterative extensions is written. In this algorithm, an automated selection of iterative parameters is conducted, and the stopping criterion is established when achieving an estimate of the required accuracy. An example of the application of the method of iterative extensions for solving a particular problem is given. In the calculations, the condition for achieving an estimate of the relative error in the norm that is stronger than the energy norm of the problem is set. However, the relative errors of the obtained numerical solution of the example of the original problem are shown in other ways. For example, the relative error in grid nodes is calculated pointwise. To achieve a relative error of no more than a few percent, just a few iterations are required. Computational experiments confirm the asymptotic optimality of the method obtained in theory.

Keywords: Poisson's equation; method of fictitious components; method of iterative extensions.

References

1. Aubin J.-P. *Approximation of Elliptic Boundary-Value Problems*. New York: Wiley-Interscience, 1972, 360 p.

2. Sorokin S.B. An economical Algorithm for Numerical Solution of the Problem of Identifying the Right-Hand Side of the Poisson Equation. *Journal of Applied and Industrial Mathematics*, 2018, Vol. 12, no. 2, pp. 362–368. DOI: 10.1134/S1990478918020163

3. Sorokin S.B. An Efficient Direct Method for the Numerical Solution to the Cauchy Problem for the Laplace Equation. *Numerical Analysis and Applications*, 2019, Vol. 12, no. 12, pp. 87–103. DOI: 10.1134/S1995423919010075

4. Ushakov A.L. Investigation of a Mixed Boundary Value Problem for the Poisson Equation. *2020 International Russian Automation Conference (RusAutoCon), Sochi, Russia, 2020*, pp. 273–278. DOI: 10.1109/RusAutoCon49822.2020.9208198
5. Ushakov A.L. About Modelling of Deformations Plates. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software*, 2015, Vol. 8, no. 2, pp. 138–142. (in Russ.). DOI: 10.14529/mmp150213
6. Matsokin A.M., Nepomnyaschikh S.V. The Fictitious-Domain Method and Explicit Continuation operators. *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.*, 1993, Vol. 33, no. 1, pp. 52–68. (in Russ.).
7. Marchuk G.I., Kuznetsov Yu.A., A.M. Matsokin A.M. Fictitious Domain and Domain Decomposition Methods. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 1986, Vol. 1, Iss. 1, pp. 3–35. DOI:10.1515/rnam.1986.1.1.3
8. Bank R.E., Rose D.J. Marching Algorithms for Elliptic Boundary Value Problems. *SIAM J. on Numer. Anal.*, 1977, Vol. 14, no. 5, pp. 792–829. DOI: 10.1137/0714055
9. Manteuffel T. An Incomplete Factorization Technique for Positive Definite Linear Systems. *Math. Comput.*, 1980, Vol. 38, no. 1, pp. 114–123.
10. Swarztrauber P.N. A direct Method for Discrete Solution of Separable Elliptic Equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1974, Vol. 11, no. 6, pp. 1136–1150. DOI: 10.1137/0711086
11. Swarztrauber P.N. The Method of Cyclic Reduction, Fourier Analysis and FACR Algorithms for the Discrete Solution of Poisson's Equations on a Rectangle. *SIAM Review*, 1977, Vol. 19, no. 3, pp. 490–501. DOI: 10.1137/1019071

Received December 12, 2021

СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ 3-12 ФТОРОГРАФЕНА

М.Е. Беленков, В.М. Чернов, А.В. Бутаков, Е.А. Беленков

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: belenkov@csu.ru

Трехмерная структура кристаллов, сформированных из слоев 3-12 фторированного графена, упакованных в стопки была найдена методом атом-атомного потенциала. Расчеты электронных свойств CF-L₃₋₁₂ кристаллов были выполнены методом теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении. В результате расчетов было установлено, что расстояние между слоями в кристаллах, соответствующее минимуму энергии межслоевых связей, составляет 5,7578 Å, абсолютное значение вектора сдвига соседних слоев составляет 1,4656 Å. Электронная структура трехмерных кристаллов отличается от электронной структуры изолированных слоев 3-12 фторографена. Найденное значение ширины запрещенной зоны в объемных кристаллах составляет 3,03 эВ, что примерно на 12 % меньше, чем в отдельном слое CF-L₃₋₁₂ (3,43 эВ). Рассчитанное значение удельной энергии сублимации кристалла 3-12 фторографена составляет 13,83 эВ/(CF), что на 0,06 эВ больше энергии сублимации изолированного фторографенового слоя.

Ключевые слова: графен; фторированный графен; кристаллическая структура; зонная структура; компьютерное моделирование.

Введение

Двумерные соединения со слоевой структурой являются наноструктурированными материалами и поэтому их свойства отличаются от свойств трехмерных кристаллов [1]. Типичным представителем двумерных кристаллов является графен, который благодаря своим уникальным электронным свойствам может найти широкое применение в наноэлектронике [2]. Препятствием для этого является то, что монослои графена обладают металлической проводимостью. Для использования в электронных устройствах необходимо функционализировать графен так, чтобы его свойства стали полупроводниковыми [3]. Изменить электронные свойства графена возможно путем получения узких графеновых лент, пористого графена, полиморфных разновидностей графена и функционализации графена в результате химической адсорбции на его поверхности неуглеродных атомов [4–10]. Функционализировать графен возможно водородом, кислородом, хлором, фтором и другими атомами и молекулярными группами [7–10]. Наиболее перспективным является функционализация графена фтором, так как фторографеновые соединения обладают высокой термической устойчивостью [11, 12]. Диапазон изменения свойств графена при функционализации может быть существенно расширен в результате формирования различных полиморфных разновидностей соединений, отличающихся порядком присоединения неуглеродных атомов к слоям графена [13–19]. Кроме того, электронные свойства функционализованного графена могут сильно варьироваться при функционализации полиморфных разновидностей графена. Теоретически предсказана возможность существования множества полиморфов графена, таких как 4-8, 3-12, 4-6-12, 5-7 графен [13, 20, 21]. На основе этих структурных разновидностей графена возможно формирование множества полиморфов фторографена. Одним из наиболее интересных структурных типов фторографена является 3-12 фторографен, так как его свойства значительно отличаются от свойств фторографена, формирующегося в результате фторирования обычного гексагонального графена. Ранее структура и электронные свойства монослоев 3-12 фторографена были исследованы методами теории функционала плотности [17]. Однако в природе слоевые соединения обычно существуют в виде трехмерных кристаллов, состоящих из монослоев, упакованных в стопки. Так, кристаллы графита состоят из графеновых слоев, и получить отдельные

слои графена удалось только в 2004 году [22]. Вероятно, при синтезе новых полиморфов графена фторографеновые соединения могут быть получены не в виде отдельных монослоев, а в виде трехмерных кристаллов, подобных кристаллам графита. Поэтому необходимы теоретические расчеты возможной структуры таких кристаллов и их свойств. В данной работе были выполнены теоретические исследования структуры и электронных свойств кристаллов 3-12 фторографена.

Методика расчетов

В качестве структурной модели для расчетов было принято, что кристаллы фторографена состоят из монослоев, в которых атомы углерода и фтора связаны между собой сильными ковалентными связями, а между слоями связи осуществляются силами Ван-дер-Ваальса. Расчеты трехмерной структуры кристаллов были выполнены при помощи специально написанной программы. В качестве метода расчета трехмерной структуры кристалла 3-12 фторографена был выбран метод атом-атомного потенциала, так как в отличие от других методов расчетов, он дает наиболее корректные результаты для описания ван-дер-ваальсовских взаимодействий, хорошо соответствующие экспериментальным данным [23]. Межатомные взаимодействия в методе атом-атомного потенциала описываются потенциалами, значения констант в которых определяется по эмпирическим данным. Для описания взаимодействий между парами углеродных атомов использовался потенциал Букингема, значения коэффициентов в котором были взяты из монографии А.И. Китайгородского [24]. Парные взаимодействия атомов фтора и атомов фтора и углерода рассчитывали при помощи потенциалов Леннарда-Джонса, численные значения коэффициентов для которых были найдены по экспериментальным данным о длинах межатомных связей и энергиях связей в различных C-F соединениях [25, 26]. При расчетах вычисляли полную энергию межатомных связей в кристаллах фторографена с варьируемыми параметрами структуры, в результате чего находили такую структурную конфигурацию, которая соответствует минимуму полной энергии межатомных связей. Так как энергия ван-дер-ваальсовых связей быстро уменьшается с увеличением расстояния между атомами ($1/R^6$), то рассматривалось относительное расположение только пары соседних слоев в кристаллах фторографена. Вклад в полную энергию связи взаимодействия со слоями, расположенными на больших расстояниях относительно соседнего слоя, пренебрежимо мал. Так как слои имеют совершенную кристаллическую структуру, то расчеты выполняли для одной элементарной ячейки первого слоя, взаимодействующей с соседним слоем большого размера. В качестве величины, характеризующей энергию связи, вычисляли удельную энергию связи, приходящуюся на один атом. Размер соседнего слоя, хорошо описывающего слой бесконечного размера, был найден в результате предварительных расчетов, в ходе которых задавали различные размеры второго слоя: 0,4, 2, 4, 6, 8, 10, 20 и 30 нм. При слоях различного размера рассчитывали энергию межслоевых связей, в результате чего было установлено, что начиная с диаметра 10 нм, полная энергия связей практически не изменялась, поэтому в дальнейших расчетах диаметр слоя, с которым взаимодействовала элементарная ячейка, был принят равным 10 нм.

Примитивная элементарная ячейка 3-12 фторографенового слоя является гексагональной, однако для расчетов трехмерной структуры кристаллов в качестве элементарной ячейки была выбрана прямоугольная элементарная ячейка (рис. 1, а), содержащая 24 атома (12 атомов фтора, 12 атомов углерода). При расчетах методом атом-атомного потенциала было принято допущение, что структура слоев в кристаллах остается неизменной и возможно только изменение относительного расположения слоев. Координаты атомов в слоях были приняты равными соответствующим координатам, рассчитанным ранее для монослоев CF-L₃₋₁₂ [17]. Расчеты методом атом-атомного потенциала были выполнены в 3 этапа. На первом этапе находили межслоевое расстояние, соответствующее минимуму энергии связи при нулевом относительном сдвиге соседних слоев. На втором этапе межслоевое расстояние оставалось постоянным, при этом относительный сдвиг слоев варьировался (рис. 1, б). Относительный сдвиг задавался вектором **S**, проекции которого на оси X и Y задавали в долях от векторов элементарных трансляций. Шаг изменения составлял 1/20 от вектора трансляции. Поэтому энергию связей вычисляли при 441 различном значении векторов сдвига. По полученным данным строили трехмерные и двумерные графики изменения энергии связи в зависимости от сдвига. Для нахождения значения вектора сдвига, соответствующего минимуму энергии связей, проводили ряд последовательных расчетов (4 шага) при

уменьшающихся в 10 раз на каждом шаге изменениях вектора сдвига. На третьем этапе при найденном значении вектора сдвига, соответствующем минимуму энергии связи, варьировалось межслоевое расстояние, в результате чего была вычислена окончательная структура трехмерных кристаллов.

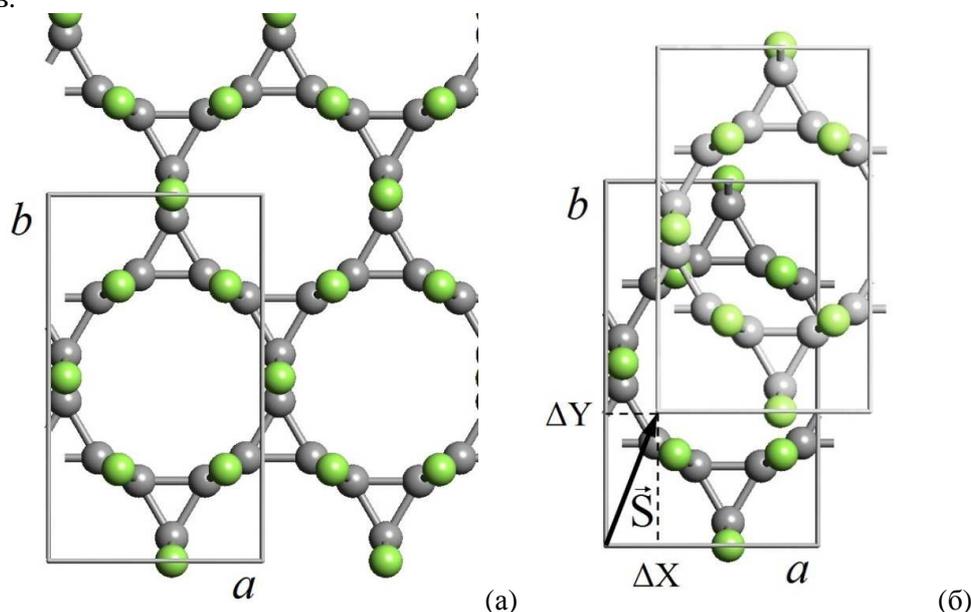


Рис. 1. Элементарная ячейка 3-12 фторографенового слоя (а) и схема задания относительного сдвига соседних слоев в кристаллах 3-12 фторографена (a , b – векторы элементарных трансляций; S – вектор сдвига; ΔX , ΔY – проекции вектора S на координатные оси X и Y соответственно; атомы углерода темно-серого цвета, атомы фтора светло-серого цвета)

Расчет электронной структуры и окончательные расчеты геометрически оптимизированной структуры кристаллов 3-12 фторографена были выполнены при помощи программного пакета Quantum ESPRESSO методом теории функционала плотности (DFT) в обобщенном градиентном приближении (GGA) [27–29]. В качестве исходной структуры брали орторомбическую элементарную ячейку 3-12 фторографенового слоя, координаты атомов в которой были найдены по итогам расчетов методом атом-атомного потенциала. При оптимизации структуры методом DFT-GGA межслоевое расстояние и параметр c были приняты постоянными. Варьировались только координаты атомов в элементарной ячейке и вектора трансляций a и b . При расчетах использовался набор из k -точек $12 \times 12 \times 12$. Для разложения волновых функций использовался усеченный базисный набор плоских волн. Размерность набора базисных функций было ограничено значением равным 70 Ридберг.

Результаты и обсуждение

В результате расчетов методом атом-атомного потенциала было найдено значение межплоскостного расстояния при нулевом относительном сдвиге соседних слоев CF. Численное значение этого параметра составило 6,1411 Å. Удельная энергия ван-дер-ваальсовых связей, приходящаяся на одну молекулярную группу CF, составила –1613,94 Дж/моль. При найденном значении межплоскостного расстояния были рассчитаны энергии связей при различных значениях вектора относительного сдвига S соседних слоев. Графики изменения энергии межслоевых связей в зависимости от вектора сдвига приведены на рис. 2. Анализ рисунка показывает, что при сдвиге слоев энергия связи изменяется в широком диапазоне от –1613,80 до –1788,62 Дж/моль. Поиск относительного сдвига, соответствующего минимуму энергии связей, показал, что численное значение длины вектора сдвига составляет 1,4656 Å. Проекция вектора сдвига на ось X равна 1,2690 Å, а проекция на ось Y равна 0,7332 Å. Эти значения вектора сдвига были найдены при последовательном поиске с уменьшающимся шагом варьирования вектора сдвига, этапы которого изображены на рис. 2, в.

Структура кристаллов 3-12 фторографена была подвергнута дополнительной оптимизации методом DFT-GGA. Результаты выполненных расчетов приведены на рис. 3. Кристаллическая решетка кристалла относится к орторомбической сингонии. Расчетные значения длин векторов элементарных трансляций составляют: $a = 5,046$ Å, $b = 8,739$ Å, $c = 11,516$ Å. В элементарной

ячейке содержится 48 атомов (см. рис. 3, а). Координаты атомов в элементарной ячейке приведены в табл. 1. Порядок нумерации атомов задан на изображении элементарной ячейки слоя (см. рис. 3, а). В элементарной ячейке кристалла содержится 2 монослоя CF-L₃₋₁₂. Структура этих слоев остается подобной структуре изолированного слоя фторографена, и межслойные взаимодействия ее не деформируют.

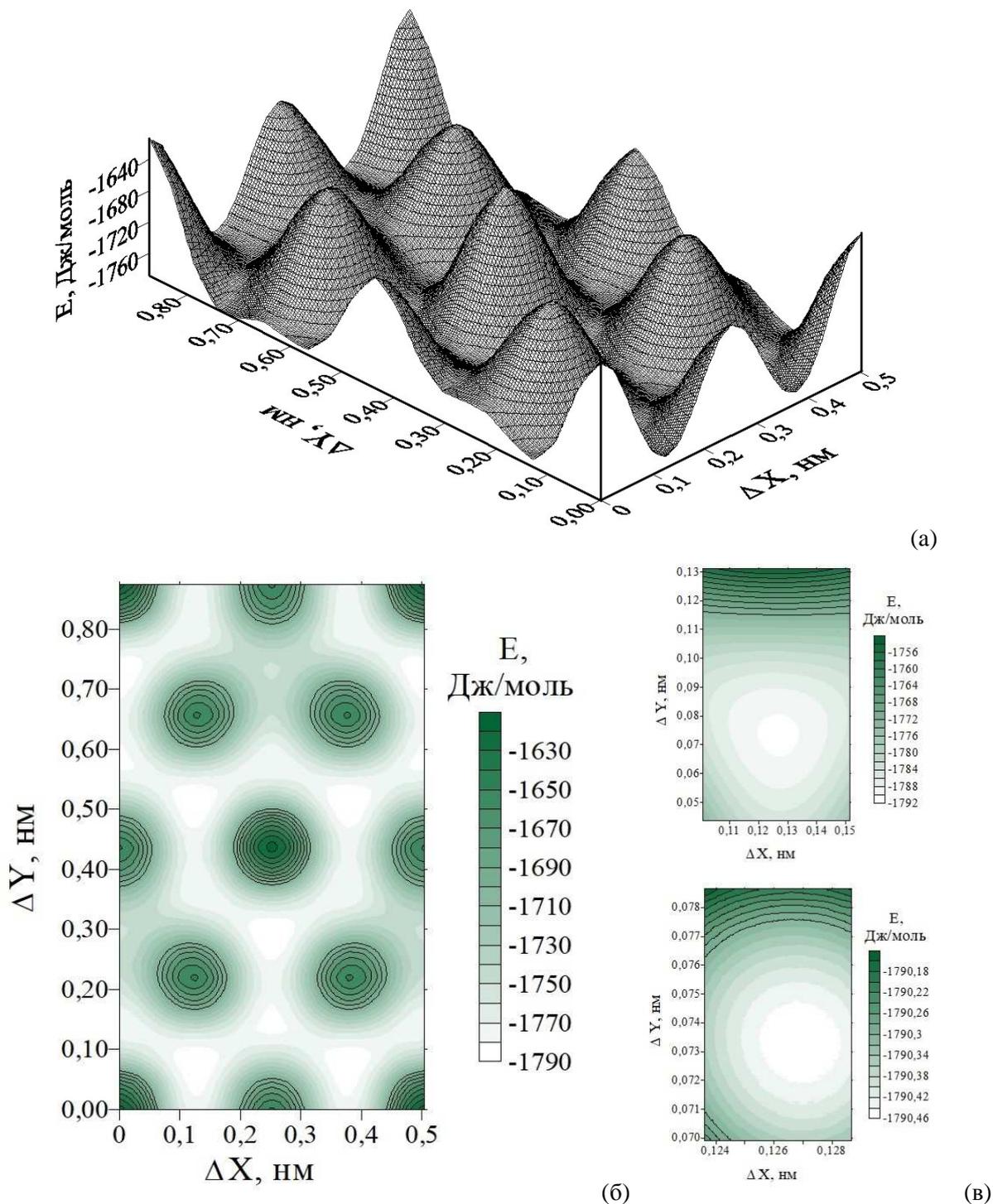


Рис. 2. Изменение удельной энергии E межслойной связи, приходящейся на молекулярную группу CF при различных векторах относительного сдвига $S(\Delta X, \Delta Y)$ соседних слоев в кристаллах 3-12 фторографена: (а) трехмерный график поверхности $E = f(\Delta X, \Delta Y)$; (б) двумерный график изоэнергетических линий поверхности E спроецированных на плоскость сдвига (вектор сдвига изменяется в пределах элементарной ячейки)

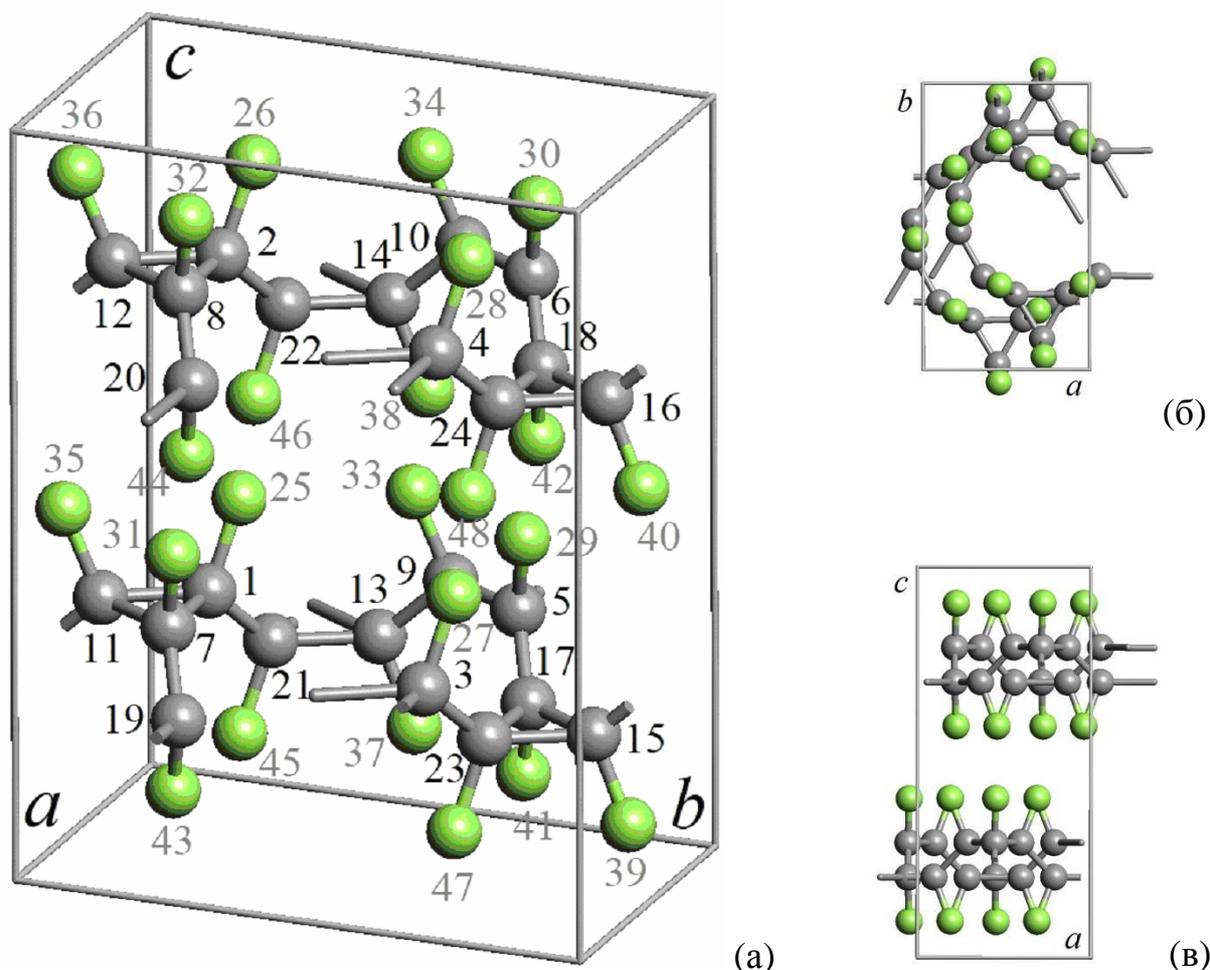


Рис. 3. Геометрически оптимизированная методом DFT-GGA структура элементарной ячейки кристалла 3-12 фторографена: (а) – нумерация атомов в элементарной ячейке; (б) – проекция на плоскость XY; (в) – проекция на плоскость XZ (атомы углерода темно-серого цвета, атомы фтора светло-серого цвета)

Соседние слои фторографена в элементарной ячейке кристалла сдвинуты друг относительно друга – рис. 3, б иллюстрирует относительный сдвиг слоев в плоскости XY. Слои сдвинуты так, что атомы фтора одного слоя располагаются напротив центра треугольной структуры из углеродных атомов. На рис. 3, в, изображающем сдвиг слоев в плоскости XZ видно, что атомы фтора соседних слоев располагаются достаточно далеко и между слоями нет зацепления, поэтому, вероятно, соседние слои в кристаллах фторографена должны свободно скользить друг относительно друга.

Структурные позиции атомов углерода и фтора в кристалле эквивалентные, поэтому структура кристалла характеризуется ограниченным числом различных длин межатомных связей и углов между ними. Эти параметры структуры приведены в табл. 2. Длины ковалентных связей L_{C-F} между атомами углерода и фтора изменяются в диапазоне от 1,4083 до 1,4111 Å. Углерод-углеродные связи формируются двух типов: между атомами углерода в треугольных структурных группах L_{C-C-1} и межатомные связи, формирующиеся между треугольными группами L_{C-C-2} . Углерод-углеродные связи первого типа варьируются от 1,5591 до 1,5630 Å, а второго типа – от 1,5094 до 1,5108 Å. Углы между C-F связями и соседними C-C связями близки к 109° (табл. 2). Углы между углерод-углеродными связями в треугольных структурных группах примерно равны 60° . Углы между C-C связями в треугольных структурных группах и связями соединяющими эти группы приблизительно равны 130° .

Координаты атомов в элементарной ячейке кристалла 3-12 фторографена (нумерация атомов приведена на рис. 2, а).

Атомы углерода				Атомы фтора			
№	X, Å	Y, Å	Z, Å	№	X, Å	Y, Å	Z, Å
1	1,4465	1,5055	3,3963	25	0,9535	1,7781	4,6884
2	2,7989	2,2861	9,1494	26	2,3110	2,5739	10,4419
3	3,9693	5,8752	3,3963	27	3,4764	6,1478	4,6884
4	5,3217	6,6558	9,1494	28	4,8338	6,9436	10,4419
5	0,4849	5,8958	3,3917	29	0,9596	6,1674	4,6893
6	1,8369	6,6772	9,1385	30	2,3133	6,9585	10,4337
7	3,0077	1,5261	3,3917	31	3,4825	1,7977	4,6893
8	4,3597	2,3076	9,1385	32	4,8362	2,5889	10,4337
9	-0,2756	4,5347	3,3887	33	-0,2388	3,9763	4,6833
10	1,0785	5,3145	9,1487	34	1,1273	4,7606	10,4446
11	2,2473	0,1650	3,3887	35	2,2840	-0,3934	4,6833
12	3,6014	0,9448	9,1487	36	3,6502	0,3910	10,4446
13	-0,2761	3,4213	2,3674	37	-0,2396	3,9751	1,0713
14	1,0770	4,2032	8,1253	38	1,1219	4,7631	6,8316
15	2,2468	7,7910	2,3674	39	2,2833	8,3447	1,0713
16	3,5998	8,5729	8,1253	40	3,6447	9,1328	6,8316
17	1,4460	6,4507	2,3694	41	0,9529	6,1643	1,0817
18	2,7988	7,2321	8,1163	42	2,3088	6,9552	6,8253
19	3,9689	2,0810	2,3694	43	3,4758	1,7946	1,0817
20	5,3216	2,8624	8,1163	44	4,8317	2,5855	6,8253
21	0,4848	2,0595	2,3725	45	0,9558	1,7749	1,0733
22	1,8370	2,8410	8,1252	46	2,3131	2,5722	6,8265
23	3,0077	6,4292	2,3725	47	3,4786	6,1446	1,0733
24	4,3598	7,2107	8,1252	48	4,8359	6,9419	6,8265

Таблица 2

Рассчитанные (DFT-GGA) значения длин векторов элементарных трансляций (a, b, c), длин межатомных связей (L_i) и углов между ними (φ_{ij}) (* – минимальные значения, ** – максимальные значения)

a, Å	b, Å	c, Å	L _{C-F} , Å	L _{C-C-1} , Å	L _{C-C-2} , Å
5,046	8,739	11,516	1,40833*	1,55914*	1,50935*
			1,4111**	1,56304**	1,51075**
φ _{F-C-C-1} , °		φ _{F-C-C-2} , °	φ _{C-C-C-1} , °		φ _{C-C-C-2} , °
109,335*		109,141*	59,895**		128,926*
110,757**		109,791**	60,1171**		130,21**

Зонная структура кристаллов 3-12 фторографена изображена на рис. 4. На уровне энергии Ферми наблюдается прямая запрещенная зона. Минимальное значение ширины запрещенной зоны наблюдается в точке Г, то есть в центре зоны Бриллюэна. Для отдельного слоя фторографена 3-12 наблюдалась аналогичная картина, то есть минимальная ширина запрещенной зоны наблюдалась также в точке Г. Однако ширина запрещенной зоны для кристалла и отдельного слоя существенно отличаются. В кристалле ширина запрещенной зоны составляет 3,03 эВ, что меньше примерно на 12 % чем в отдельном слое [18]. Кроме того, методом DFT-GGA была рассчитана полная энергия связей элементарной ячейки фторографенового слоя равная -19 203,58 эВ. На основе этой энергии была рассчитана удельная энергия сублимации как разница удельной энергии фторографенового слоя и энергий изолированных атомов углерода и фтора. Численное значение этой энергии составляет 13,83 эВ/(CF), что на 0,04 эВ больше энергии сублимации для отдельного слоя 3-12 фторографена [18].

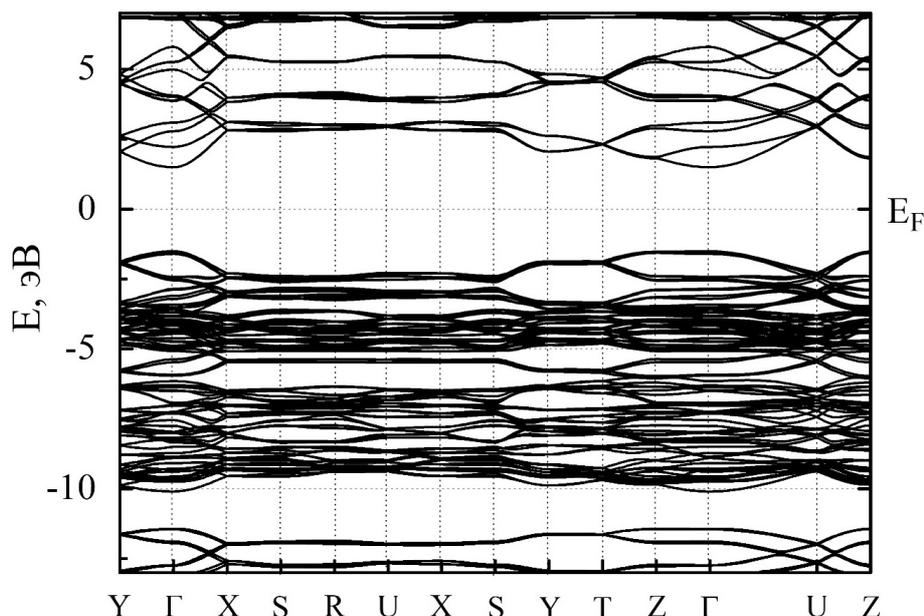


Рис. 4. Зонная структура кристалла 3-12 фторографена (за начало отсчета на оси энергий E принята энергия Ферми E_F , ее расчетное абсолютное значение составляет $-4,91$ эВ)

Заключение

Таким образом, в работе методом атом-атомного потенциала рассчитана трехмерная кристаллическая структура кристаллов фторографена, сформированных из 3-12 фторографеновых слоев. Окончательная оптимизация структуры кристаллов $CF-L_{3-12}$ и расчеты их электронной структуры были выполнены методом DFT-GGA. В результате расчетов установлено, что соседние слои в кристаллах фторографена должны быть сдвинуты на вектор S , компоненты которого равны $\Delta X = 1,2690 \text{ \AA}$ и $\Delta Y = 0,7332 \text{ \AA}$. Межслоевое расстояние, при котором наблюдается минимум энергии межатомных связей, составляет $6,1411 \text{ \AA}$. Величина удельной энергии ван-дер-ваальсовых межслоевых взаимодействий, приходящейся на одной CF молекулярную группу, составляет $-1613,94$ Дж/моль. Энергия сублимации кристаллов 3-13 фторографена $13,83$ эВ/(CF), а ширина запрещенной зоны $3,03$ эВ. Численные значения этих параметров на несколько процентов отличаются от значений аналогичных характеристик для изолированных слоев $CF-L_{3-12}$. Изменения свойств графеновых слоев функционализированных фтором при формировании трехмерных молекулярных кристаллов необходимо учитывать при создании многослойных гетероструктур, используемых в качестве элементной базы нанoeлектронных устройств.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Челябинской области в рамках научного проекта № 20-43-740015.

Литература

1. Theory of 2D crystals: Graphene and Beyond / R. Roldan, L. Chirrolli, E. Prada, *et al.* // Chemical Society Reviews. – 2017. – Vol. 46. – P. 4387–4399.
2. Graphene and beyond-Graphene 2D Crystals for Next-Generation Green Electronics / J. Kang, W. Cao, X. Xie *et al.* // Proc. SPIE 9083, Micro- and Nanotechnology Sensors, Systems, and Applications VI. – 2014. – P. 908305.
3. Chapter 12 – Electronic Applications of Functionalized Graphene Nanocomposites / G. Omar, M.A. Salim, B.R. Mizah *et al.* // Functionalized Graphene Nanocomposites and their Derivatives. Synthesis, Processing and Applications Micro and Nano Technologies. – Amsterdam: Elsevier, 2019. – P. 245–263.
4. Kawai, S. Atomically Controlled Substitutional Boron-Doping of Graphene Nanoribbons / S. Kawai, S. Saito, S. Osumi *et al.* // Nature Communications. – 2015. – Vol. 6, Iss. 1. – P. 8098.
5. Semiconducting Graphene: Converting Graphene from Semimetal to Semiconductor / G. Lu, K. Yu, Z. Wena, J. Chen // Nanoscale. – 2013. – Vol. 5, Iss. 4. – P. 1353–1368.

6. Graphene Polymorphs / M.E. Belenkov, A.E. Kochengin, V.M. Chernov, E.A. Belenkov // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2019. – Vol. 1399, Iss. 2. – P. 022024 (1–5).
7. Control of Graphene's Properties by Reversible Hydrogenation: Evidence for Graphane / D.C. Elias, R.R. Nair, T.M.G. Mohiuddin *et al.* // *Science*. – 2009. – Vol. 323, Iss. 5914. – P. 610–613.
8. Properties of Fluorinated Graphene Films / J.T. Robinson, J.S. Burgess, C.E. Junkermeier *et al.* // *Nano Letters*. – 2010. – Vol. 10. – P. 3001–3005.
9. Photochemical Chlorination of graphene / B. Li, L. Zhou, D. Wu *et al.* // *ACS Nano*. – 2011. – Vol. 5. – P. 5957–5961.
10. Chen, D. Graphene Oxide: Preparation, Functionalization, and Electrochemical Applications / D. Chen, H. Feng, J. Li // *Chem. Rev.* – 2012. – Vol. 112, no. 11. – P. 6027–6053.
11. Fluorographene: a Two-Dimensional Counterpart of Teflon / R.R. Nair, W. Ren, R. Jalil *et al.* // *Small*. – 2010. – Vol. 6, Iss. 24. – P. 2877–2884.
12. Bulusheva, L.G. 8 – Electronic Structure of Fluorinated Graphene / L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub // *New fluorinated carbons: fundamentals and applications*. – 2017. – P.177–213.
13. Belenkov, M.E. Structure of Fluorographene and its Polymorphous Varieties / M.E. Belenkov, V.M. Chernov, E.A. Belenkov // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2018. – Vol. 1124, Iss. 2. – P. 022010 (1–6).
14. Belenkov, M.E. Simulation of the Structure and Electronic Properties of Fluorographene Polymorphs Formed on the Basis of 4-8 Graphene / M.E. Belenkov, V.M. Chernov, E.A. Belenkov // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – 2019. – Vol. 537, Iss. 2. – P. 022058 (1–5).
15. Relative Stabilities of Various fully Functionalized Graphene Polymorphs under Mechanical Strain and Electric Field / K.S. Grishakov, K.P. Katin, V.S. Prudkovskiy, M.M. Maslov // *Applied Surface Science*. – 2019. – Vol. 463. – P. 1051–1057.
16. Belenkov, M.E. Martensitic Structural Transformations of Fluorographene Polymorphic Varieties / M.E. Belenkov, V.M. Chernov, E.A. Belenkov // *Materials Research Proceedings*. – 2018. – Vol. 9. – P. 148–151.
17. Беленков, М.Е. Кристаллическая и электронная структура 3-12 графена, функционализированного фтором / М.Е. Беленков, В.М. Чернов // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2019. – Вып. 11. – С. 406–413.
18. Беленков, М.Е. *Ab initio* расчеты кристаллической и электронной структуры полиморфов 5-7 фторографена / М.Е. Беленков, В.М. Чернов // *Письма о материалах*. – 2020. – Т. 10, № 3. – С. 254–259.
19. Беленков, М.Е. *Ab initio* расчеты кристаллической и электронной структуры полиморфов 5-7 фторографена / М.Е. Беленков, В.М. Чернов // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2020. – Вып. 12. – С. 326–337.
20. Belenkov, M.E. Structure and Electronic Properties of 5-7 Graphene / M.E. Belenkov, V.M. Chernov, E.A. Belenkov, V.M. Morilova // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – 2018. – Vol. 447. – P. 012005 (1–4).
21. Беленков, Е.А. Структура и электронные свойства кристаллов, состоящих из графеновых слоев L_6 , L_{4-8} , L_{3-12} и L_{4-6-12} / Е.А. Беленков, А.Е. Коченгин // *Физика твердого тела*. – 2015. – Т. 57. – Вып. 10. – С. 2071–2078.
22. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films / K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov *et al.* // *Science*. – 2004. – Vol. 306, Iss. 5696. – P. 666–669.
23. Беленков, Е.А. Формирование структуры графита в мелкокристаллическом углероде / Е.А. Беленков // *Неорганические материалы*. – 2001. – Т. 37, № 9. – С. 1094–1101.
24. Китайгородский, А.И. Молекулярные кристаллы / А.И. Китайгородский. – М.: Наука, 1971. – 424 с.
25. Alvarez, S. A Cartography of the van der Waals Territories / S. Alvarez // *Dalton Transactions*. – 2013. – Vol. 42, Iss. 24. – P. 8617–8636.
26. Varadwaj, A. Is the Fluorine in Molecules Dispersive? Is Molecular Electrostatic Potential a valid Property to Explore Fluorine-Centered non-Covalent Interactions? / A. Varadwaj, H.M. Marques, P.R. Varadwaj // *Molecules*. – 2019. – Vol. 24. – P. 379 (1–29).

27. Koch, W. A Chemist's Guide to Density Functional Theory / W. Koch, M.C. Holthausen. – Weinheim–New York–Chichester–Brisbane–Singapore–Totonto: Wiley VCH Verlag GmbH, 2001. – 313 p.

28. Langreth, D.C. Beyond the Local-Density Approximation in Calculations of Ground-State Electronic Properties / D.C. Langreth, M.J. Mehl // *Physical Review B*. – 1983. – Vol. 28, Iss. 4. – P. 1809–1834.

29. QUANTUM ESPRESSO: a Modular and Open-Source Software Project for Quantum Simulations of Materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini *et al.* // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2009. – Vol. 21, № 39. – P. 395502 (1–19).

Поступила в редакцию 18 января 2021 г.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 1, pp. 41–51

DOI: 10.14529/mmph210105

STRUCTURE AND ELECTRONIC PROPERTIES OF 3-12 FLUOROGRAPHENE CRYSTALS

M.E. Belenkov, V.M. Chernov, V.A. Butakov, E.A. Belenkov
Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: belenkov@csu.ru

The three-dimensional structure of crystals formed from 3-12 fluorinated graphene layers packed in stacks was found using the atom-atom potential method. Calculations of the electronic properties of CF-L₃₋₁₂ crystals were conducted using the method of density functional theory in the generalized gradient approximation. As a result of the calculations, it was established that the distance between the layers in crystals corresponding to the minimum energy of interlayer bonds is 5,7578 Å, and the absolute value of the shift vector of the adjacent layers is 1,4656 Å. The electronic structure of three-dimensional crystals differs from the electronic structure of 3-12 isolated fluorographene layers. The obtained value of the band gap in bulk crystals is 3,03 eV, which is about 12 % less than in a separated CF-L₃₋₁₂ layer (3,43 eV). The calculated value of the specific sublimation energy of 3-12 fluorographene crystal is 13,83 eV / (CF), which is 0,06 eV higher than the sublimation energy of the isolated fluorographene layer.

Keywords: graphene; fluorinated graphene; crystal structure; band structure; computer modeling.

References

1. Roldan R., Chirulli L., Prada E., Silva-Guillien J.A., San-Jose P., Guinea F. Theory of 2D Crystals: Graphene and beyond. *Chemical Society Reviews*, 2017, Vol. 46, p. 4387–4399. DOI: 10.1039/C7CS00210F

2. Kang J., Cao W., Xie X., Sarkar D., Liu W., Banerjee K. Graphene and beyond-Graphene 2D Crystals for Next-Generation Green Electronics. *Proc. SPIE 9083, Micro- and Nanotechnology Sensors, Systems, and Applications VI*, 2014, p. 908305. DOI: 10.1117/12.2051198

3. Omar G., Salim M.A., Mizah B.R., Kamarolzaman A.A., Nadlene R. Chapter 12 – Electronic Applications of Functionalized Graphene Nanocomposites. *Functionalized Graphene Nanocomposites and their Derivatives. Synthesis, Processing and Applications Micro and Nano Technologies*, 2019, pp. 245–263. DOI: 10.1016/b978-0-12-814548-7.00012-x

4. Kawai S., Saito S., Osumi S., Yamaguchi S., Foster A.S., Spijker P., Meyer E. Atomically Controlled Substitutional Boron-Doping of Graphene Nanoribbons. *Nature Communications*, 2015, Vol. 6, Iss. 1, p. 8098. DOI: 10.1038/ncomms9098

5. Lu G, Yu K., Wen Z, Chen J. Semiconducting Graphene: Converting Graphene from Semimetal to Semiconductor. *Nanoscale*, 2013, Vol. 5, Iss. 4, p. 1353–1368. DOI: 10.1039/C2NR32453A

6. Belenkov M.E., Kochengin A.E., Chernov V.M., Belenkov E.A. Graphene Polymorphs. *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, Vol. 1399, Iss. 2, p. 022024 (1–5). DOI: 10.1088/1742-6596/1399/2/022024
7. Elias D.C., Nair R.R., Mohiuddin T.M.G., Morozov S.V., Blake P., Halsall M.P., Ferrari A.C., Boukhvalov D.W., Katsnelson M.I., Geim A.K., Novoselov K.S. Control of Graphene's Properties by Reversible Hydrogenation: Evidence for Graphane. *Science*, 2009, Vol. 323, Iss. 5914, pp. 610–613. DOI: 10.1126/science.1167130
8. Robinson J.T., Burgess J.S., Junkermeier C.E., Badescu S.C., Reinecke T.L., Keith Perkins F., Zalalutdniov M.K., Baldwin J.W., Culbertson J.C., Sheehan P.E., Snow E.S. Properties of Fluorinated Graphene Films. *Nano Letters*, 2010, Vol. 10, pp. 3001–3005. DOI: 10.1021/nl101437p
9. Li B., Zhou L., Wu D., Peng H., Yan K., Zhou Y., Liu Z. Photochemical Chlorination of Graphene. *ACS Nano*, 2011, Vol. 5, pp. 5957–5961. DOI: 10.1021/nn201731t
10. Chen D., Feng H., Li J. Graphene Oxide: Preparation, Functionalization, and Electrochemical Applications. *Chem. Rev.*, 2012, Vol. 112, no. 11, pp. 6027–6053. DOI: 10.1021/cr300115g
11. Nair R.R., Ren W., Jalil R., Riaz I., Kravets V.G., Britnell L., Blake P., Schedin F., Mayorov A.S., Yuan S., Katsnelson M.I., Cheng H.M., Strupinski W., Bulusheva L.G., Okotrub A.V., Grigorieva I.V., Grigorenko A.N., Novoselov K.S., Geim A.K. Fluorographene: a Two-Dimensional Counterpart of Teflon. *Small*, 2010, Vol. 6, Iss. 24, pp. 2877–2884. DOI: 10.1002/sml.201001555
12. Bulusheva L.G., Okotrub A.V. 8 – Electronic Structure of Fluorinated Graphene. *New fluorinated carbons: fundamentals and applications*, 2017, pp. 177–213. DOI: 10.1016/B978-0-12-803479-8.00008-5
13. Belenkov M.E., Chernov V.M., Belenkov E.A. Structure of Fluorographene and its Polymorphous Varieties. *Journal of Physics: Conference Series*, 2018, Vol. 1124, Iss. 2, p. 022010 (1–6). DOI: 10.1088/1742-6596/1124/2/022010
14. Belenkov M.E., Chernov V.M., Belenkov E.A. Simulation of the Structure and Electronic Properties of Fluorographene Polymorphs Formed on the Basis of 4-8 Graphene. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2019, Vol. 537, Iss. 2, p. 022058 (1–5). DOI: 10.1088/1757-899X/537/2/022058
15. Grishakov K.S., Katin K.P., Prudkovskiy V.S., Maslov M.M. Relative Stabilities of Various fully Functionalized Graphene Polymorphs under Mechanical Strain and Electric Field. *Applied Surface Science*, 2019, Vol. 463, pp. 1051–1057. DOI: 10.1016/j.apsusc.2018.09.044
16. Belenkov M.E., Chernov V.M., Belenkov E.A. Martensitic Structural Transformations of Fluorographene Polymorphic Varieties. *Materials Research Proceedings*, 2018, Vol. 9, p. 148–151. DOI: 10.21741/9781644900017-28
17. Belenkov M.E., Chernov V.M. Crystal and Electronic Structure of 3-12 Graphene Functionalized by Fluorine. *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*, 2019, Iss. 11, pp. 406–413. (in Russ.). DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.406
18. Belenkov M.E., Chernov V.M. Structure and Electronic Properties of 4-6-12 Graphene Layers Functionalized by Fluorine. *Letters on Materials*, 2020, Vol. 10, no. 3, pp. 254–259. (in Russ.). DOI: 10.22226/2410-3535-2020-3-254-259
19. Belenkov M.E., Chernov V.M. Ab initio Calculations of the Crystalline and Electronic Structure of 5-7 Fluorographene Varieties. *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*, 2020, Iss. 12, pp. 326–337. (in Russ.). DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.326
20. Belenkov M.E., Chernov V.M., Belenkov E.A., Morilova V.M. Structure and Electronic Properties of 5-7 Graphene. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2018, Vol. 447, p. 012005 (1–4). DOI: 10.1088/1757-899X/447/1/012005
21. Belenkov E.A., Kochengin A.E. Structure and electronic properties of crystals consisting of graphene layers L_6 , L_{4-8} , L_{3-12} and L_{4-6-12} . *Physics of the Solid State*, 2015, Vol. 57, Iss. 10, pp. 2126–2133. DOI: 10.1134/S1063783415100030
22. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 2004, Vol. 306, Iss. 5696, P. 666–669. DOI: 10.1126/science.1102896
23. Belenkov E.A. Formation of Graphite Structure in Carbon Crystallites. *Inorganic Materials*, 2001, Vol. 37, no. 9, pp. 928–934. DOI: 10.1023/A:1011601915600

24. Kitaigorodskii A.I. *Molekulyarnye kristally* (Molecular Crystals) Moscow, Nauka Publ., 1971, 424 p. (in Russ.).

25. Alvarez, S. A Cartography of the van der Waals Territories. *Dalton Transactions*, 2013, Vol. 42, Iss. 24, pp. 8617–8636. DOI: 10.1039/C3DT50599E

26. Varadwaj A., Marques H.M., Varadwaj P.R. Is the Fluorine in Molecules Dispersive? Is Molecular Electrostatic Potential a Valid Property to Explore Fluorine-Centered non-Covalent Interactions? *Molecules*, 2019, Vol. 24, no. 3, p. 379 (1–29). DOI: 10.3390/molecules24030379

27. Koch W., Holthausen M.C. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*. Weinheim–New York–Chichester–Brisbane–Singapore–Totonto: Wiley VCH Verlag GmbH, 2001, 313 p. DOI: 10.1002/3527600043

28. Langreth D.C., Mehl M.J. Beyond the Local-Density Approximation in Calculations of Ground-state Electronic Properties. *Physical Review B*, 1983, Vol. 28, Iss. 4, pp. 1809–1834. DOI: 10.1103/PhysRevB.28.1809

29. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Chiarotti G.L., Cococcioni M., Dabo I., Dal Corso A., de Gironcoli S., Fabris S., Fratesi G., Gebauer R., Gerstmann U., Gougoussis C., Kokalj A., Lazzeri M., Martin-Samos L., Marzari N., Mauri F., Mazzarello R., Paolini S., Pasquarello A., Paulatto L., Sbraccia C., Scandolo S., Sclauzero G., Seitsonen A.P., Smogunov A., Umari P., Wentzcovitch R.M. QUANTUM ESPRESSO: a Modular and Open-Source Software Project for Quantum Simulations of Materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, Vol. 21, no. 39, p. 395502 (1–19). DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502

Received January 18, 2021

FIRST-PRINCIPLES STUDIES OF THE PHASE TRANSITIONS IN Fe-Si ALLOYS

A.B. Koshkin¹, M.A. Zagrebin^{1,2}, V.V. Sokolovskiy¹, V.D. Buchelnikov¹

¹Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation

²South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: miczag@mail.ru

In this paper, the structural and magnetic properties of $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ alloys ($10 \leq x \leq 25,0$ at. %) were calculated. The structural phase transition temperatures for the crystal structures A2, B2, and D03 were estimated from the geometry optimization. The Curie temperatures were calculated in a molecular-field approximation using the constants of magnetic exchange interaction calculated *ab initio*. For all the considered concentrations, with the temperature increase, we observed the structural transitions from the ordered cubic phase to a disordered structure, with the intermediate stage of a partially disordered state. The ferromagnet–paramagnet transition was observed for all the compositions, though in various crystal phases.

Keywords: Fe-Si; phase diagram; first-principles calculations; molecular-field approximation.

1. Introduction

Fe-Si alloys are drawing the interest of both experimentalists and theoreticians due to their possible applications in spintronic, optoelectronic, and thermionic devices [1–4]. For example, Fe_3Si is a promising material for a ferromagnetic electrode in spintronic devices, which use magnetic tunnel junctions [1]. Also, Fe_3Si is a ferromagnet with a Curie point of around 800 K, and, as a thin film, it has a spin polarization of 45 % [2]. Fe_5Si_3 is a metallic ferromagnet at room temperature, so it is also a promising material for spintronics [3]. $\beta\text{-FeSi}_2$, a narrow gap ($\sim 0,85$ eV) semiconductor, was used to create a light-emitting diode [4].

With the increasing concentration of Si in Fe-Si alloys, its spontaneous magnetization gradually decreases [5]. For small Si concentration, this decrease is proportional to Si concentration. However, the Mossbauer spectroscopy [6] found the strong dependency of Fe magnetic moments on the nearest-neighbors' atomic environment for larger Si concentrations. Moreover, Si substitution results in a considerable decrease of the magnetic anisotropy, which makes Fe-Si alloys magnetically soft materials with potential application in the electric energy industry [5, 7].

In this work, we investigated the structural and magnetic phase transitions of $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ alloys ($10 \leq x \leq 25,0$ at.%) using *ab initio* calculations.

2. Simulation details

For investigating the structural and magnetic properties of $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ alloys ($10 \leq x \leq 25,0$ at. %), we used SPR-KKR (a spin-polarized relativistic Korringa–Kohn–Rostoker) code [8], which is based on the Korringa–Kohn–Rostoker Greens function method. Geometry optimization was performed for experimentally observed Fe-Si structures: the ordered phase D0₃ (symmetry group $Fm\bar{3}m$ no. 225, BiF₃-type structure), the partially disordered phase B2 (symmetry group $Pm\bar{3}m$ no. 221, CsCl-type structure), and the disordered phase A2 (symmetry group $Im\bar{3}m$ no. 229, α -Fe-type structure). The equilibrium lattice parameters a_0 were obtained from the dependency of total energy E_0 on the cell volume with a fitting to the Birch–Murnaghan equation of states. For the exchange–correlation potential, we used the general gradient approximation in the form of Perdew–Burke–Ernzerhof functional [9]. The obtained equilibrium lattice parameters were used to calculate the exchange interaction parameters J_{ij} via SPR-KKR code. The disorder (both structural and chemical) in phases D0₃, B2, and A2 was created by the coherent potential approximation [8]. Magnetic exchange interaction parameters were calculated by using the spin-polarized scalar-relativistic Dirac Hamiltonian in the local density approximation (Vosko–Wilk–

Nusair functional [10]). The obtained magnetic exchange interaction parameters were used to estimate the Curie point T_C in the mean field approximation [11].

3. Results and Discussion

The geometry optimization showed that the most energetically favorable structure is $D0_3$ for all considered concentrations $Fe_{100-x}Si_x$. Table 1 presents the results of a_0 calculations for different Si concentrations, obtained via SPR-KKR code. The calculated lattice parameters were obtained for A2, B2, and $D0_3$ phases. The values calculated via VASP package, a_0^{th} , [12] and experimentally observed ones, a_0^{exp} , [13–15] are also present. SPR-KKR results are slightly larger than the VASP-calculated and experimental lattice parameters. Also, Table 1 shows that for B2 and $D0_3$ phases, the lattice parameter decreases with the increase of Si concentration since Si atomic radius (1,18 Å) is smaller than Fe one (1,26 Å). A2 phase has similar a_0 values for all the considered Si concentrations due to the disordered structure. The discrepancy between a_0^{exp} and a_0 can be explained by the different temperature regimes: the experiments were conducted at room temperature, while the calculations obtained the ground states ($T = 0$ K).

Table 1
The equilibrium lattice parameters a_0 (Å) for A2, B2, and $D0_3$ phases.
 a_0^{th} is taken from [12], a_0^{exp} – from [13–15]

x	Phase	a_0	a_0^{th}	a_0^{exp}
10	A2	2,870	–	2,86031 ¹
	B2	2,865	–	–
	$D0_3$	5,727	–	–
15	A2	2,870	2,840 ⁴	–
	B2	2,855	2,826 ⁴	2,84844 ²
	$D0_3$	5,708	5,65 ⁴	–
20	A2	2,871	–	2,85591 ¹
	B2	2,842	–	2,83748 ²
	$D0_3$	5,680	–	–
22	A2	2,874	2,833 ⁵	–
	B2	2,836	2,807 ⁶	2,83319 ²
	$D0_3$	5,671	5,63 ⁵	–
23	A2	2,871	–	–
	B2	2,832	–	–
	$D0_3$	5,665	–	–
24	A2	2,872	–	–
	B2	2,829	–	–
	$D0_3$	5,659	–	–
25	A2	2,872	2,814 ⁶	2,8551 ¹
	B2	2,826	2,797 ⁶	2,82725 ²
	$D0_3$	5,650	5,61 ⁶	5,66 ³

¹[14], ²[15], ³[13], ⁴ $x = 15,625$ at. %; ⁵ $x = 21,875$ at. %; ⁶ $x = 25$ at. %

Fig. 1 shows the dependence of the difference between the structure total energy and the total energy corresponding to the most energetically favorable phase ($D0_3$) on Si concentration, calculated with the SPR-KKR code. For all considered concentrations, the transition from the ordered $D0_3$ phase to the disordered A2 phase through the partially disordered B2 phase was observed. This result is consistent with the calculations with the projector-augmented wave method and periodic boundary conditions implemented in VASP. The discrepancies between a_0 and a_0^{th} could be explained by the difference in structure formation: in this work, we used the coherent potential approach, which gives some averaged structure, while in [12] only one configuration was considered.

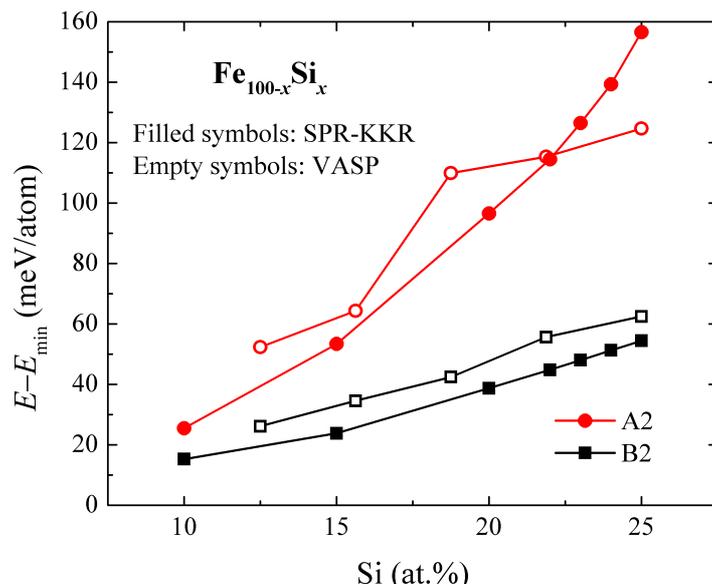


Fig. 1. Dependence of the structure total energy (in relation to the most energetically favorable phase $D0_3$) for A2 and B2 phases on Si concentration. Empty symbols present the results from [12]

By using the energy difference, we roughly estimated the temperature of a structural phase transition, T^tr , from the expression, $\Delta E = k_B T^tr$, where k_B is the Boltzmann constant, $\Delta E = E_0 - E_{min}$. We used the proportion of $1 \text{ meV} = 11,60 \text{ K}$.

Fig. 2 presents the dependence of the total magnetic moment (per atom) on Si concentration in $Fe_{100-x}Si_x$ alloys. For all structures, the total magnetic moment per atom decreases with Si concentration increase, which could be explained by the smaller magnetic moment of Si in comparison with Fe. Fig. 2 also shows the experimental results from [13, 16], which are in quantitative agreement with the calculated values. The closest to the experiment are phases B2 and $D0_3$. Further, the obtained equilibrium lattice parameters were used to estimate the exchange interaction parameters J_{ij} , which allowed us to calculate the Curie point T_C in the molecular field approximation.

Fig. 3 shows the dependence of the Curie point T_C for phases A2, B2, and $D0_3$ of $Fe_{100-x}Si_x$ alloys on Si concentration. With the rise of Si concentration, T_C decreases for each considered phase. Similar results were obtained in the experiments [13, 17]. The qualitative agreement between the calculated and experimental T_C could also be noted.

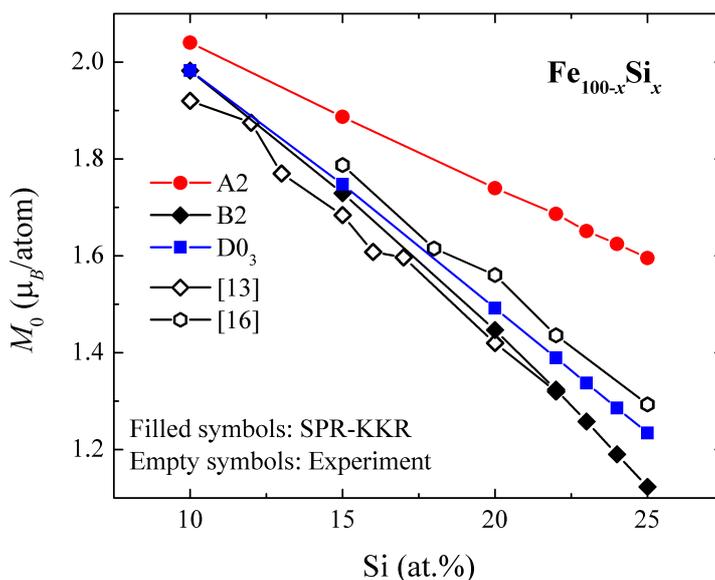


Fig. 2. Dependence of the total magnetic moment (per atom) on Si concentration in $Fe_{100-x}Si_x$ alloys. Empty symbols present the experimental results from [13, 16]

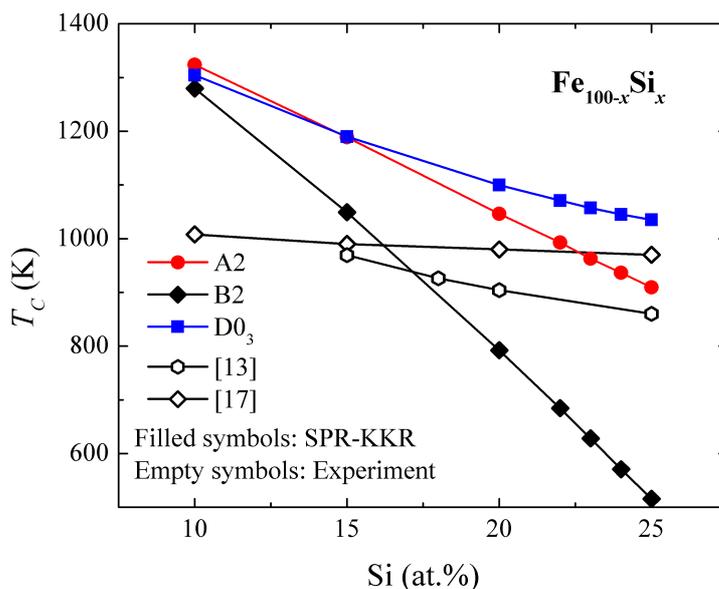


Fig. 3. Dependence of the Curie point T_C of $Fe_{100-x}Si_x$ alloys on Si concentration. Empty symbols present the experimental results from [13, 17]

Fig. 4 presents temperatures of $Fe_{100-x}Si_x$ magnetic and structural phase transitions depending on Si concentration. Dashed lines correspond to the Curie points T_C of the considered phases. A bold line with pentagons presents the temperature of a transition “paramagnet-ferromagnet” in the energetically favorable structural phase. With the temperature rise, the transition from $D0_3$ (FM) phase to B2 (FM) and then to A2 (FM) happens at Si concentrations lower than 18 at. %. The same transitions were observed experimentally for $Fe_{90}Si_{10}$ alloy [18].

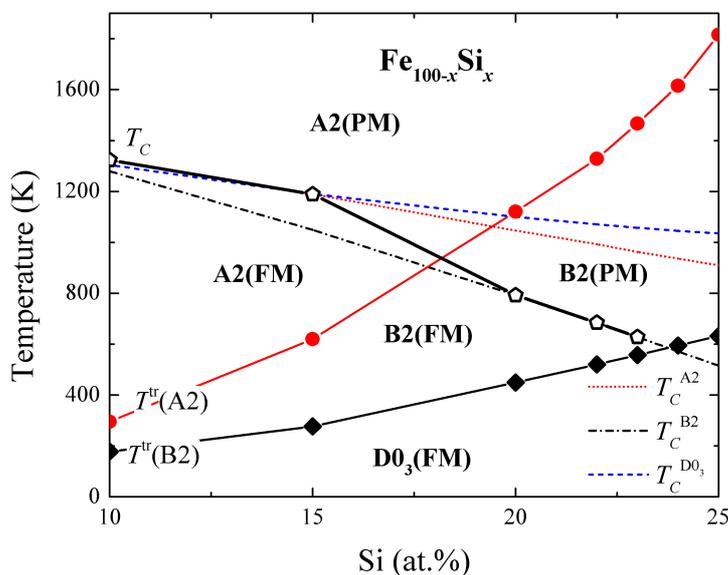


Fig. 4. T - x phase diagram of structural and magnetic transitions in $Fe_{100-x}Si_x$ alloys

4. Conclusions

Using *ab initio* calculations, we investigated the structural and magnetic phase transitions in $Fe_{100-x}Si_x$ ($10 \leq x \leq 25$ at. %) alloys. The structural phases A2, B2, and $D0_3$ were modeled. We found that all these phases are stable, and $D0_3$ is the most energetically favorable one for the considered Si concentrations.

Both the equilibrium lattice parameter and the total magnetic moment (per atom) decrease with the Si concentration increase because of the smaller atomic radius and magnetic moment of Si in comparison with Fe. The obtained results for lattice parameters and magnetic moments agree with the available experimental and theoretical data.

We estimated the temperature of structural phase transitions and showed that these temperatures decrease with the rise of Si concentration, which qualitatively agrees with the experimental data. After calculating the temperatures of the structural and magnetic transitions, we plotted the phase diagram for $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ ($10 \leq x \leq 25$ at. %), which agrees with the available experimental results for Fe-Si alloys.

This work was performed with the support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the Russian State Assignment under contract No. 075-00250-20-03 (sections 2 and 3). A. Koshkin gratefully acknowledges the Advanced science research foundation of the Chelyabinsk State University.

References

1. Mantovan R., Georgieva M., Fanciulli M., Goikhman A., Barantsev N., Lebedinskii Y., and Zenkevich A. Synthesis and Characterization of $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{SiO}_2$ Structures for Spintronics. *Phys. Status Solidi (A)*, 2008, Vol. 205, Iss. 8, pp. 1753–1757. DOI: 10.1002/pssa.200723464.
2. Ionescu A., Vaz C.A.F., Trypiniotis T., Gürtler C.M., Garcia-Miquel H., Bland J.A.C., Vickers M.E., Dalgliesh R.M., Langridge S., Bugoslavsky Y., Miyoshi Y., Cohen L.F., Ziebeck K.R.A. Structural, Magnetic, Electronic, and Spin Transport Properties of Epitaxial $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(001)$. *Phys. Rev. B*, 2005, Vol. 71, Iss. 9, pp. 094401. DOI: 10.1103/PhysRevB.71.094401
3. Seo K., Lee S., Jo Y., Jung M.H., Kim J., Churchill D.G., Kim B. Room Temperature Ferromagnetism in Single-Crystalline Fe_3Si_3 Nanowires. *J. Phys. Chem. C*, 2009, Vol. 113, Iss. 17, pp. 6902–6905. DOI: 10.1021/jp902010j
4. Leong D., Harry M., Reeson K.J., Homewood K.P. A Silicon/Iron-Disilicide Light-Emitting Diode Operating at a Wavelength of 1.5 μm . *Nature*, 1997, Vol. 387, pp. 686–688. DOI: 10.1038/42667
5. Wijn H.P.J. (ed.) *Soft Magnetic Alloys, Invar and Elinvar Alloys*. Berlin, Springer, Landolt-Börnstein–Group III Condensed Matter, 1994, Vol. 19, no. 1, pp. 33–143. DOI: 10.1007/b91565
6. Stearns B.M. Internal Magnetic Fields, Isomer Shifts, and Relative Abundances of the Various Fe sites in FeSi alloys. *Phys. Rev.*, 1963, Vol. 129, Iss. 3, pp. 1136–1144. DOI: 10.1103/PhysRev.129.1136
7. Shin J.S., Bae J.S., Kim H.J., Lee H.M., Lee T.D., Lavernia E. J., Lee Z.H. Ordering–Disordering Phenomena and Micro-Hardness Characteristics of B2 Phase in Fe–(5–6.5%)Si Alloys. *Mater. Sci. Eng. A*, 2005, Vol. 407, Iss. 1-2, pp. 282–290. DOI: 10.1016/j.msea.2005.07.012
8. Ebert H., Ködderitzsch D., Minár J. Calculating Condensed Matter Properties Using the KKR-Green's Function Method-recent Developments and Applications. *Reports on Progress in Physics*, 2011, Vol. 74, no. 9, pp. 096501. DOI: 10.1088/0034-4885/74/9/096501
9. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, Vol. 77, Iss. 18, pp. 3865–3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865
10. Vosko S.H., Wilk L., Nusair M. Accurate Spin-Dependent Electron Liquid Correlation Energies for Local Spin Density Calculations: a Critical Analysis. *Canad. J. Phys.*, 1980, Vol. 58, no. 8, pp. 1200–1211. DOI: 10.1139/p80-159
11. Anderson P.W. Theory of Magnetic Exchange Interactions: Exchange in Insulators and Semiconductors. *Solid State Phys.*, 1963, Vol. 14, pp. 99–214. DOI: 10.1016/S0081-1947(08)60260-X
12. Zagrebina M.A., Matyunina M.V., Koshkin A.B., Buchel'nikov V.D., Sokolovskii V.V. Ab initio Studies of Phase Transformations in $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$. *Physics of the Solid State*, 2020, Vol. 62, no. 5, pp. 739–743. DOI: 10.1134/S1063783420050327
13. Varga L.K., Mazaleyrat F., Kovac J., Greneche J. M. Structural and Magnetic Properties of Metastable $\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($0.15 < x < 0.34$) Alloys Prepared by a Rapid-Quenching Technique. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002, Vol. 14, no. 8, pp. 1985–2000. DOI: 10.1088/0953-8984/14/8/326
14. Miraghaei S., Abachi P., Madaah-Hosseini H.R., Bahrami A. Characterization of Mechanically Alloyed $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ and $\text{Fe}_{83.5}\text{Si}_{13.5}\text{Nb}_3$ Nanocrystalline Powders. *J. Mater. Proc. Tech.*, 2008, Vol. 203, Iss. 1-3, pp. 554–560. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2007.11.064
15. Farquhar M.C.M., Lipson H., Weill A.R. An X-ray Study of Iron-Rich Iron-Silicon Alloys. *Journal of the Iron and Steel Institute*, 1945, Vol. 152, pp. 457–472.

16. Fallot M. Ferromagnetisme des Alliages de Fer. *Ann. Phys.*, 1936, Vol. 11, no. 6, pp. 305–387.
DOI: 10.1051/anphys/193611060305

17. Shyni P.C., Perumal A. Structural and Magnetic Properties of Fe_{100-x}Si_x (0 ≤ x ≤ 40) Nanocrystalline Alloy Powders. *IEEE Transactions on Magnetics*, 2014, Vol. 50, no. 1, pp. 1-4, Art no. 2101904.
DOI: 10.1109/TMAG.2013.2278555

18. Kubaschewski O. *Iron-binary Phase Diagrams*. Berlin, Springer, 1982, 185 p.
DOI: 10.1007/978-3-662-08024-5

Received January 21, 2021

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 1, pp. 52–58

УДК 537.9

DOI: 10.14529/mmph210106

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВАХ Fe-Si

А.Б. Кошкин¹, М.А. Загребин^{1,2}, В.В. Соколовский¹, В.Д. Бучельников¹,

¹Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

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

E-mail: miczag@mail.ru

В работе представлены результаты расчетов структурных и магнитных свойств сплавов Fe_{100-x}Si_x (10 ≤ x ≤ 25,0 ат. %). Из геометрической оптимизации для кристаллических структур A2, B2 и D0₃ оценены температуры структурных фазовых переходов. Температуры Кюри оценивались в приближении молекулярного поля с использованием параметров магнитного обменного взаимодействия, рассчитанных *ab initio*. Во всем рассматриваемом интервале концентраций с ростом температуры происходят структурные переходы из упорядоченной кубической фазы в частично упорядоченную, а после и в полностью разупорядоченную. Переход ферромагнетик–парамагнетик наблюдается для всех составов, однако в разных кристаллических фазах.

Ключевые слова: Fe-Si; фазовая диаграмма; первопринципные вычисления; приближение молекулярного поля.

Литература

1. Synthesis and Characterization of Fe₃Si/SiO₂ Structures for Spintronics / R. Mantovan, M. Georgieva, M. Fanciulli, A. Goikhman *et al.* // *Phys. Stat. Sol. (A)*. – 2008. – Vol. 205, Iss. 8. – P. 1753–1757.

2. Structural, Magnetic, Electronic, and Spin Transport Properties of Epitaxial Fe₃Si/GaAs(001) / A. Ionescu, C.A.F. Vaz, T. Trypiniotis *et al.* // *Phys. Rev. B*. – 2005. – Vol. 71, Iss. 9. – P. 094401.

3. Room Temperature Ferromagnetism in Single-Crystalline Fe₅Si₃ Nanowires / K. Seo, S. Lee, Y. Jo *et al.* // *J. Phys. Chem. C*. – 2009. – Vol. 113, Iss. 17. – P. 6902–6905.

4. A Silicon/Iron-Disilicide Light-Emitting Diode Operating at a Wavelength of 1.5 μm / D. Leong, M. Harry, K.J. Reeson, K.P. Homewood // *Nature*. – 1997. – Vol. 387. – P. 686–688.

5. Wijn, H.P.J. (ed.) *Soft Magnetic Alloys, Invar and Elinvar Alloys* / H.P.J. Wijn (ed.). – Berlin, Springer, Landolt–Börnstein – Group III Condensed Matter, 1994. – Vol. 19, no. 1. – P. 33–143.

6. Stearns, B.M. Internal Magnetic Fields, Isomer Shifts, and Relative Abundances of the Various Fe Sites in FeSi Alloys / B.M. Stearns // *Phys. Rev.* – 1963. – Vol. 129, Iss. 3. – P. 1136–1144.

7. Ordering–Disordering Phenomena and Micro-Hardness Characteristics of B2 Phase in Fe–(5–6.5%)Si alloys / J.S. Shin, J.S. Bae *et al.* // *Mater. Sci. Eng. A*. – 2005. – Vol. 407, Iss. 1-2. – P. 282–290.

8. Ebert, H. Calculating Condensed Matter Properties using the KKR-Green's Function Method – Recent Developments and Applications / H. Ebert, D. Ködderitzsch, J. Minár // *Reports on Progress in Physics*. – 2011. – Vol. 74, no. 9. – P. 096501.

9. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77, Iss. 18. – P. 3865–3868.
10. Vosko, S.H. Accurate Spin-Dependent Electron Liquid Correlation Energies for Local Spin Density Calculations: a Critical Analysis / S.H. Vosko, L. Wilk, M. Nusair // *Canad. J. Phys.* – 1980. – Vol. 58, no. 8. – P. 1200–1211.
11. Anderson, P.W. Theory of Magnetic Exchange Interactions: Exchange in Insulators and Semiconductors / P.W. Anderson // *Solid State Phys.* – 1963. – Vol. 14. – P. 99–214.
12. Ab initio Studies of Phase Transformations in $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ / M.A. Zagrebin, M.V. Matyunina, A.B. Koshkin *et al.* // *Physics of the Solid State.* – 2020. – Vol. 62, no. 5. – P. 739–743.
13. Structural and Magnetic Properties of Metastable $\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($0.15 < x < 0.34$) alloys prepared by a rapid-quenching technique / L.K. Varga, F. Mazaleyrat, J. Kovac, J.M. Greneche // *Journal of Physics: Condensed Matter.* – 2002. – Vol. 14, no. 8. – P. 1985–2000.
14. Characterization of Mechanically Alloyed $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ and $\text{Fe}_{83.5}\text{Si}_{13.5}\text{Nb}_3$ Nanocrystalline Powders / S. Miraghaei, P. Abachi, H.R. Madaah-Hosseini, A. Bahrami // *J. Mater. Proc. Tech.* – 2008. – Vol. 203, Iss. 1-3. – P. 554–560.
15. Farquhar, M.C.M. An X-ray study of iron-rich iron-silicon alloys / M.C.M. Farquhar, H. Lipson, A.R. Weill // *Journal of the Iron and Steel Institute.* – 1945. – Vol. 152. – P. 457–472.
16. Fallot, M. Ferromagnetisme des Alliages de Fer / M. Fallot // *Ann. Phys.* – 1936. – Vol. 11, no. 6. – P. 305–387.
17. Shyni, P.C. Structural and Magnetic Properties of $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ ($0 \leq x \leq 40$) Nanocrystalline Alloy powders / P.C. Shyni, A. Perumal // *IEEE Transactions on Magnetics.* – 2014. – Vol. 50, no. 1. – pp. 1–4, Art no. 2101904.
18. Kubaschewski, O. Iron-Binary Phase Diagrams / O. Kubaschewski. – Berlin, Springer, 1982. – 185 p.

Поступила в редакцию 21 января 2021 г.

ЗАДАЧА О РАСПРОСТРАНЕНИИ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ, НАСЫЩЕННОЙ ПУЗЫРЬКОВОЙ ЖИДКОСТЬЮ

Л.Ф. Ситдикова, И.К. Гималтдинов

Уфимский государственный нефтяной технический университет, г. Уфа,

Российская Федерация

E-mail: sitdikovalf@yandex.ru

В пластовых жидкостях во многих случаях присутствует газ. Например, газожидкостная смесь в пористой среде образуется при кислотных работах низкопроницаемых зон, при водогазовом воздействии на пласты и т. д. Поэтому представляется актуальным учитывать присутствие пузырьков газа при изучении волновых процессов в пористых средах, насыщенных жидкостью.

В настоящей работе теоретически исследуется распространение акустических волн в пористой среде, насыщенной газожидкостной смесью, с учетом межфазных сил взаимодействия между жидкостью и скелетом и теплообмена между газом и жидкостью. Записана общая система уравнений и физических соотношений, описывающая распространение волн в пористой среде, заполненной пузырьковой жидкостью. Получено дисперсионное соотношение, описывающее зависимость комплексного волнового вектора от частоты, на основе которого исследована зависимость фазовой скорости и коэффициента затухания от частоты для «быстрой» и «медленной» волн.

Результаты расчетов позволяют оценить влияние пузырьков газа на распространение звуковых волн в пористой среде, насыщенной пузырьковой жидкостью. Кроме этого, результаты работы могут быть использованы при интерпретации данных акустического зондирования пористых сред.

Ключевые слова: пористая среда; акустическая волна; пузырьковая жидкость; «быстрая» волна; «медленная» волна.

Введение

Исследование процессов распространения волн давления в насыщенных пористых средах связано не только с решением практических задач сейсмоки, защиты объектов, неразрушающего контроля и т. д., но и с пониманием фундаментальных основ волновых процессов в таких средах.

Отметим работы посвященные исследованию динамики волн давления в насыщенной пузырьковой жидкостью пористой среде.

В ряде работ В.Е. Донцова [1–3] на установке «ударная труба» экспериментально изучена эволюция и структура волн давления в пористой среде, насыщенной жидкостью с пузырьками газа. Насыщающей жидкостью была вода, газом – воздух или углекислый газ. В качестве рабочей среды использовалась хаотическая упаковка из спеченных шариков оргстекла диаметром около 2 мм, запекаемых непосредственно в рабочем участке. Выявлено, что затухание «медленной» волны в пористой среде, насыщенной жидкостью с пузырьками углекислого газа, меньше, чем в той же среде, но с пузырьками воздуха. Показано, что именно колебания пузырьков обуславливают осциллирующую структуру переднего фронта «медленной» волны давления.

Шмельдерс с соавторами [4–5] экспериментально и теоретически исследовали эволюцию волн давления в пористой среде, насыщенной пузырьковой жидкостью. В качестве пористой среды использовались склеенные частицы песка или природный песчаник. Далее пористый образец насыщался пузырьковой жидкостью, которая готовилась в отдельной емкости. Показано, что, как и в работе [3], волна имеет осцилляционную структуру, связанную с наличием пузырьков. Обнаружены две продольные волны Био. Получено, что незначительное содержание газа в пузырьковой жидкости существенно влияет на динамику волн давления.

Динамика ударных волн в пористой среде, состоящей из частиц песка, склеенных эпоксидной смолой, экспериментально и теоретически исследовано в работе [6]. Рассмотрены три случая: поры, полностью насыщенные водой, поры заполнены воздухом и поры содержат смесь воды и пузырьков воздуха. Показано, что ударную трубу можно использовать для изучения отра-

жения высокочастотных компонент ударной волны от пористой среды. Получено хорошее соответствие между линейной теорией и экспериментальными данными для случая, когда пористая среда насыщена водой. Когда среда насыщена частично, выявлено удовлетворительное соответствие.

В [7] численно исследовалось распространение волн давления в заполненной жидкостью цилиндрической полости в пористой среде, содержащей пузырьковую жидкость, с использованием двухскоростной, с двумя напряжениями модели пористой среды. Полученное авторами решение позволяет оценить, как влияют пузырьки газа в пористой среде на затухание и распространение сигнала в цилиндрическом волноводе.

Однако остается мало изученным вопрос распространения акустических волн в пористой среде, насыщенной газожидкостной смесью, с учетом теплообмена между газом и жидкостью. Что и сделано в данном исследовании в рамках двухфазной системы.

Основные уравнения

Примем общепринятые допущения в волновой динамике для пористых сред, заполненных пузырьковой жидкостью, и запишем систему линеаризованных уравнений [8–15]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \rho_{l0} \frac{\partial v_l}{\partial x} &= 0, \quad \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \rho_{g0} \frac{\partial v_l}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \rho_{s0} \frac{\partial v_s}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial n_b}{\partial t} + n_{b0} \frac{\partial v_l}{\partial x} &= 0, \quad \alpha_{g0} = \frac{4}{3} \pi a^3 n_b, \quad \rho_j = \rho_j^0 \alpha_j, \quad \alpha_{g0} + \alpha_{l0} + \alpha_{s0} = 1, \\ (\alpha_{l0} \rho_{l0}^0 + \alpha_{g0} \rho_{g0}^0) \frac{\partial v_l}{\partial t} &= -(\alpha_{g0} + \alpha_{l0}) \frac{\partial p_l}{\partial x} - F, \quad F = F_m + F_\mu + F_B, \\ F_m &= \frac{1}{2} \eta_m \alpha_{s0} (\alpha_{l0} \rho_{l0}^0 + \alpha_{g0} \rho_{g0}^0) \left(\frac{\partial v_l}{\partial t} - \frac{\partial v_s}{\partial t} \right), \quad F_\mu = \frac{9}{2} \eta_\mu (\alpha_{l0} + \alpha_{g0}) \alpha_{s0} \mu_l (v_l - v_s) a_0^{-2}, \\ F_B &= 6 \eta_B (\alpha_{l0} + \alpha_{g0}) \alpha_{s0} a_0 \sqrt{\pi \rho_l^0 \mu_l} \int_{-\infty}^t \frac{\partial}{\partial \tau} (v_l - v_s) \frac{d\tau}{\sqrt{t - \tau}}, \\ (\alpha_{l0} \rho_{l0}^0 + \alpha_{g0} \rho_{g0}^0) \frac{\partial v_l}{\partial t} + \alpha_{s0} \rho_{s0}^0 \frac{\partial v_s}{\partial t} &= \frac{\partial \sigma_s^*}{\partial x} - \frac{\partial p_l}{\partial x}, \quad \frac{\partial p_g}{\partial t} = -\frac{3\gamma p_g}{b_0} w - \frac{3(\gamma - 1)}{b_0} q, \quad w = \frac{\partial b}{\partial t}, \\ \frac{\rho_{l0}^0}{\rho_{l0}} &= 1 + \beta_l (p_l - p_{l0}), \quad \frac{\rho_{s0}^0}{\rho_{s0}} = 1 + \beta_s (p_s - p_{s0}), \quad p_s = p_l - \frac{\sigma_s^*}{\alpha_{s0}}, \\ \alpha_{s0} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} &= \frac{1}{E_s} \frac{\partial \sigma_s^*}{\partial t} + \frac{\partial \sigma_s^*}{\mu_s}, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\partial v_s}{\partial t}, \\ w &= w_R + w_a, \quad \rho_{l0} \left(b \frac{\partial w_R}{\partial t} + \frac{3}{2} w_R^2 \right) = p_g - p_l - 4 \mu_l \frac{w_R}{b} \left(1 + \frac{1}{4} \eta_\mu \left(\frac{b}{a_0} \right)^2 \right), \quad w_a = \frac{p_g - p_l}{\rho_{l0}^0 C_l \varphi_{g0}^{1/3}}. \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь n_b – число пузырьков в единице объема в j фазе; a_0 , b_0 , w – средний радиус пор, размер пузырьков газа и радиальная скорость пузырьков, q – интенсивность теплообмена, β_j – сжимаемость j фазы, η_μ – эмпирический параметр, φ_{g0} – объемная доля газа в пузырьковой жидкости. Нижний индекс $j = l, s$ относится к пузырьковой жидкости и скелету пористой среды. Остальные обозначения соответствуют обозначениям в работе [13].

Запишем уравнение теплопроводности и граничные условия в линейном приближении [16]

$$\rho_{g0}^0 c_g \frac{\partial T_g'}{\partial t} = r^{-2} \left(\lambda_g r^2 \frac{\partial T_g'}{\partial r} \right) + \frac{\partial p_g}{\partial t}, \quad (r < b_0), \tag{2}$$

$$T_g' = T_l', \quad q = -\lambda_g \left(\frac{\partial T_g'}{\partial r} \right)_{b_0}, \quad \frac{\partial T_g'}{\partial r} = 0, \quad (r = 0). \tag{3}$$

Решение системы уравнений ищем в виде [8]:

$$\rho_j^0, v_j, p_j, a_j, T_g' \cong A_j \exp[i(Kx - \omega t)], \quad K = k + i\delta. \quad (4)$$

После решения уравнений (1)–(3) получено дисперсионное соотношение. Ввиду его громоздкости оно не приводится. На основе полученного решения вычислены фазовая скорость и декремент затухания линейных волн.

Результаты расчета

В расчетах взяты следующие параметры при $T_0 = 300$ К и $p_0 = 10^5$ Па. Для воздуха: $p_{g0} = 10^5$ Па, $\gamma = 1,4$, $\rho_{g0}^0 = 1,17$ кг/м³, $\mu_g = 1,86 \cdot 10^{-5}$ Па×с, $\lambda_g = 0,027$ Дж/(м×с×К), $c_g = 1006$ Дж/(кг×К). Для песчаника: $\rho_{s0}^0 = 2560$ кг/м³, $\mu_s = 10^8$ Па×с, $E_s = 3,7 \cdot 10^{10}$ Па×с. Для воды: $\rho_{l0}^0 = 1000$ кг/м³, $\mu_l = 10^3$ Па×с, $C_l = 1500$ м/с.

Как известно пузырьковая жидкость является средой с уникальными акустическими свойствами [16]. Добавление в жидкость пузырьков газа, объемное содержание которых порядка 1–2 % кардинально меняет его акустические свойства. Из-за аномальной сжимаемости, связанной с сжимаемостью пузырьков, скорость распространения звуковых волн может уменьшиться до значения 100 м/с. Кроме этого из-за неравновесного теплообмена и акустической разгрузки импульсные сигналы в пузырьковой жидкости затухают [16]. В [16] получен закон дисперсии:

$$\frac{K^2}{\omega^2} = \frac{(1 - \alpha_{g0})^2}{C_l^2} + \frac{1}{C_M^2 \Psi}, \quad \Psi = \frac{1}{Q} - \frac{\omega^2}{\chi \omega_R^2}, \quad Q = \frac{1 + 3(\gamma - 1)(z \cdot \text{cth } z - 1)}{z^2}, \quad z = \sqrt{\frac{-i\omega b_0^2}{v_g^{(T)}}}, \quad (5)$$

$$C_M = \sqrt{\frac{\gamma p_0}{\rho_{l0}^0 \alpha_{g0} (1 - \alpha_{g0})}}, \quad \omega_R = \frac{1}{b_0} \sqrt{\frac{3\gamma p_0}{\rho_{l0}^0}}, \quad v_g^{(T)} = \frac{\lambda_g}{c_g \rho_{g0}^0}, \quad \chi = 1 - i\omega t_A, \quad t_A = b_0 \alpha_{g0}^{-1/3} C_l^{-1}.$$

На рис. 1 показаны декремент затухания δ и фазовая скорость C_p для случая воды с пузырьками воздуха при $b_0 = 10^{-3}$ м, $\alpha_{l0} = 0,99$, $\alpha_{g0} = 0,01$.

На графиках видно существование трех характерных частотных отрезков, в которых существенно различается количественная и качественная картина дисперсионных кривых. Из анализа выражения (5) следует, что эффект дисперсии звука в низкочастотной области $\omega \leq \omega_R$ (ω_R – частота собственных колебаний пузырьков, частота Миннаерта [8]) определяется межфазной температурной неравновесностью. Промежуток $\omega_R < \omega < \omega_C$ ($\omega_C = \omega_R \sqrt{1 + \alpha_{g0} \rho_{l0}^0 C_l^2 / \gamma p_0}$) соответствует полосе непропускания, в нем декремент затухания и фазовая скорость принимают аномально высокие значения. Величина, обратная декременту затухания, соответствует расстоянию, на котором амплитуда волн уменьшается в e раз, где e – основание натурального логарифма. Из рис. 1 видно, что при частоте, равной частоте собственных колебаний пузырьков, фазовая скорость звука минимальна и составляет приблизительно 60 м/с, а значение логарифмического декремента затухания максимально.

В работе [17] получено дисперсионное соотношение для пористой среды, полностью насыщенной жидкостью, следующего вида:

$$\frac{K}{\omega} = \pm \frac{1}{C_l \sqrt{2}} \sqrt{B_1 + B_2 \tilde{C}^2 \pm \sqrt{(B_1 + B_2 \tilde{C}^2)^2 - 4B_3 \tilde{C}^2}},$$

$$B_1 = 1 + i\chi_V \alpha_{s0}, \quad B_2 = \chi_\mu (1 + i\beta \chi_V), \quad \beta = \frac{\rho_{l0}^0}{\rho_{s0}^0}, \quad \tilde{C} = \frac{C_l}{C_s}, \quad C_s = \sqrt{\frac{E_s}{\rho_{s0}^0}}, \quad B_3 = \chi_\mu (1 + i\chi_V (\alpha_{s0} + \beta \alpha_{l0})),$$

$$\chi_V = \frac{1}{\omega \tau^*}, \quad \chi_\mu = 1 + \frac{iE_s}{\mu_s \omega}, \quad \tau^{*-1} = \frac{1}{2} \left(-i\omega \eta_m + 9\eta_\mu \nu_l a_0^{-2} + \frac{9}{2} \eta_B (1 - i) a_0^{-1} \sqrt{2\nu_l \omega} \right), \quad \nu_l = \frac{\mu_l}{\rho_{l0}^0}, \quad (6)$$

где C_l, C_s – фазовые скорости волны в жидкости и в скелете пористой среды соответственно.

На основе выражения (6) построены зависимости декремента затухания δ и фазовой скорости C_p «быстрой» и «медленной» волн от частоты ω на рис. 2.

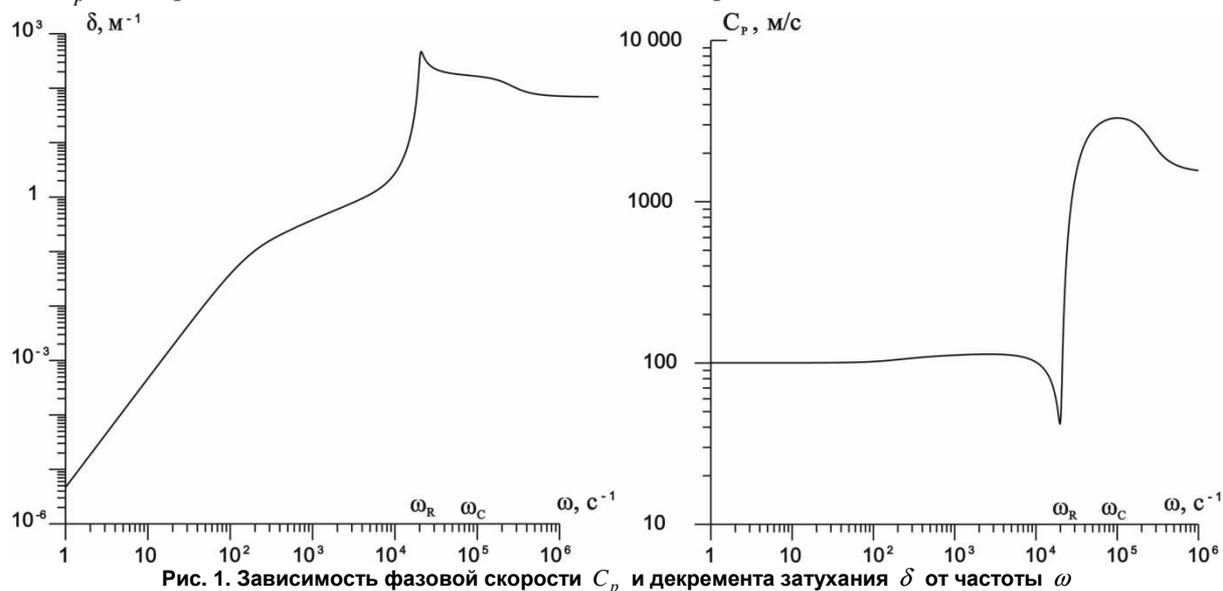


Рис. 1. Зависимость фазовой скорости C_p и декремента затухания δ от частоты ω

для случая воды с пузырьками воздуха при $b_0 = 10^{-3}$ м, $\alpha_{l0} = 0,99$

Из графиков видно, что декремент затухания для обоих типов волн увеличивается с увеличением частоты, кроме этого, коэффициент затухания «быстрой» волны для частот $\omega < 2 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$ больше, чем декремент затухания «медленной» волны. Также следует, что для частот $\omega < 2 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$ гармоническая волна затухает на расстоянии порядка 100 м. Из графика зависимости фазовой скорости от частоты следует, что для обоих типов волн с увеличением частоты скорости возрастают. Для частот $\omega > 10^3 \text{ с}^{-1}$ оба типа волн и «медленная», и «быстрая» скорости волн стремятся к постоянным значениям. Скорость «быстрой» волны стремится к скорости звука в песчанике, а скорость «медленной» – к скорости звука в воде.

На рис. 3 показано влияние теплообмена на декремент затухания δ и фазовую скорость C_p для пористой среды, заполненной газожидкостной смесью. Линии 1 построены без учета теплообмена, линии 2 – с учетом теплообмена. Характерные параметры системы $a_0 = 10^{-3}$ м, $b_0 = 5 \cdot 10^{-3}$ м, $\alpha_{l0} = 0,6$, $\alpha_{s0} = 0,39$, $\alpha_{g0} = 0,01$.

Отметим, что в работе [7] показано, что при частоте собственных колебаний пузырьков и более низких частотах скорость «быстрой» и «медленной» волн в пористой среде, насыщенной пузырьковой жидкостью, ниже, а затухание выше, чем в пористой среде, насыщенной жидкостью при отсутствии газовых пузырьков. С ростом частоты скорости волн достигают тех же значений, что и в пористой среде полностью насыщенной жидкостью. Из рис. 3 также следует, что в диапазоне частот $0 < \omega < \omega_R$ скорости волн ниже, а коэффициент затухания выше для обоих типов волн, для частот $\omega > \omega_R$ скорости достигают значений, соответствующих значениям заполнения пористой среды «чистой» жидкостью. Характер зависимости для «медленной» волны для пористой среды заполненной пузырьковой смесью такой же, как для «свободной» пузырьковой жидкости, полученной в работе [16], характерные диапазоны частот также разделяют «поведение» кривых коэффициента затухания и фазовой скорости. Отметим, что наиболее отчетливо теплообмен влияет на затухание «медленной» волны в диапазоне $0 < \omega < \omega^{(T)}$, где $\omega^{(T)} = v_g^{(T)} / a_0^2$ ($v_g^{(T)} = \lambda_g / c_g \rho_{g0}^0$). На рис. 3 данные величины соответствуют значениям $\omega^{(T)} = 10 \text{ с}^{-1}$, $\omega_R = 4 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1}$, $\omega_C = 480 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1}$.

Коэффициент затухания «быстрой» волны до частоты ω_C имеет вид такой же, как для случая пористой среды, насыщенной «чистой» жидкостью, а при частоте $\omega \approx \omega_C$ происходит резкое

уменьшение коэффициента затухания, что соответствует неустойчивому состоянию системы. На коэффициент затухания «быстрой» волны влияние теплообмена практически не влияет.

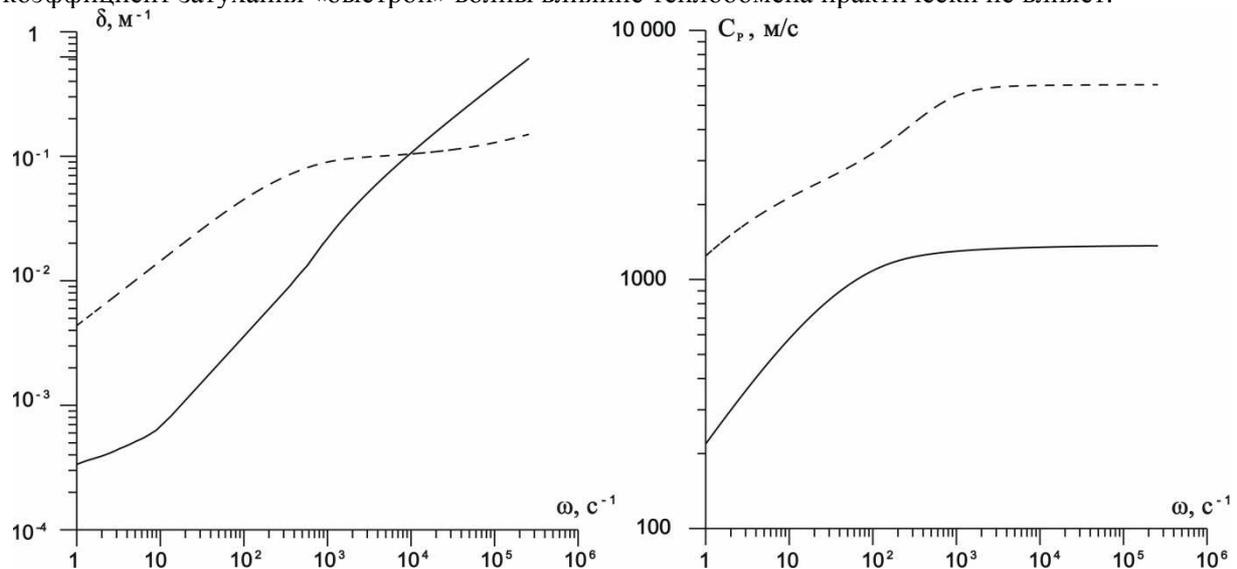


Рис. 2. Зависимости декремента затухания δ и фазовой скорости C_p «быстрой» (пунктирные линии) и «медленной» (сплошные линии) волн от частоты ω для системы песок-вода.

Параметры: $a_0 = 10^{-3}$ м, $\alpha_{l0} = 0,6$, $\alpha_{s0} = 0,4$

Скорость «быстрой» волны для пористой среды, заполненной пузырьковой смесью, увеличивается в диапазоне частот $0 < \omega < 10^3$ с⁻¹ до значения скорости звука в песчанике. Скорость «медленной» волны в диапазоне частот $0 < \omega < \omega_R$ не изменяется и составляет около 60 м/с, это значение меньше скорости звука для «свободной» пузырьковой жидкости в этом диапазоне частот. Дополнительное уменьшение скорости звука происходит из-за межфазного трения между жидкостью и скелетом пористой среды. Для диапазона частот $\omega_R < \omega < \omega_C$ (полоса непрозрачности) скорость «медленной» волны повышается до значения скорости в «чистой» жидкости ($C_l = 1500$ м/с), при этом учет теплообмена приводит к более высоким значениям скорости для этого диапазона.

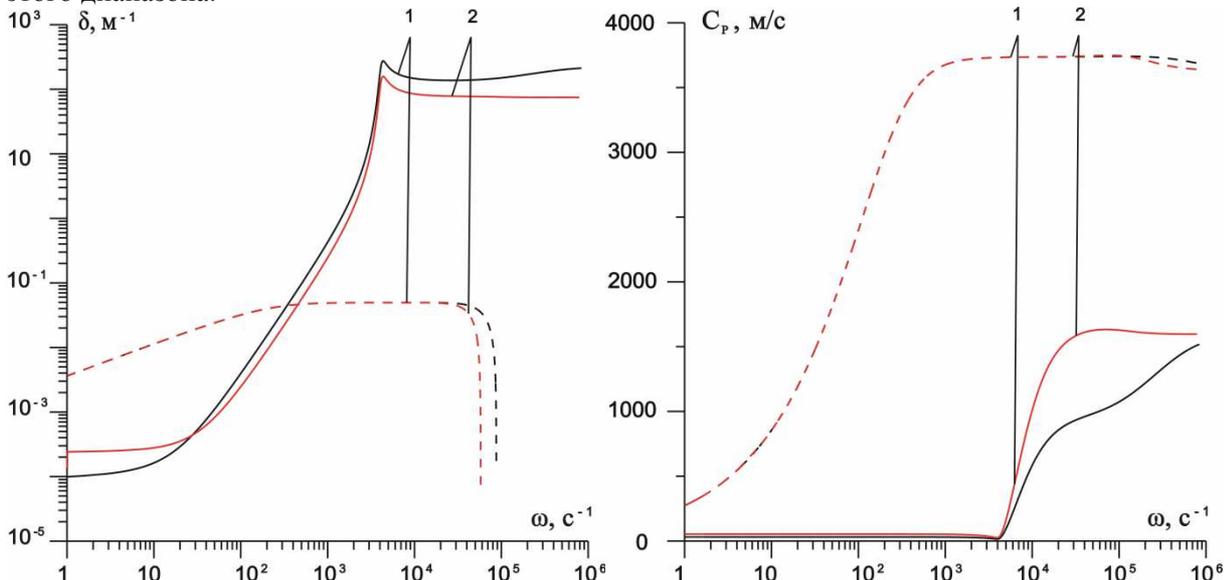


Рис. 3. Зависимости декремента затухания δ и фазовой скорости C_p «быстрой» (пунктирные линии 1,2) и «медленной» (сплошные линии 1,2) волн от частоты ω для системы «песчаник – пузырьковая жидкость». Линия 1 построена без учета теплообмена, линия 2 – с учетом теплообмена. Характерные параметры системы (пористая среда+пузырьковая смесь) $a_0 = 10^{-3}$ м, $b_0 = 5 \cdot 10^{-3}$ м, $\alpha_{l0} = 0,6$, $\alpha_{s0} = 0,39$, $\alpha_{g0} = 0,01$

Заключение

Теоретически исследовано распространение акустических волн в пористой среде, заполненной газожидкостной смесью, с учетом теплообмена между пузырьком и жидкостью. Установлено, что в таких средах для обеих волн характер зависимости декремента затухания и фазовой скорости такой же, как для «свободной» пузырьковой жидкости, полученный в работе [2]. Показано, что учет теплообмена влияет на декремент затухания «медленной» волны в основном для низких частот, а для «быстрой» волны учет теплообмена не влияет на процесс затухания. Стоит отметить, что во всем диапазоне частот на скорость «быстрой» волны межфазный теплообмен между жидкостью и газом влияет незначительно. Для частот $0 < \omega < \omega_R$ скорость «медленной» волны не зависит от учета теплообмена, а в области полосы непропускания учет теплообмена приводит к более высоким значениям скорости звука.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-31-60015.

Литература

1. Донцов В.Е. Волны давления в пористой среде, насыщенной жидкостью с пузырьками газа / В.Е. Донцов, В.В. Кузнецов, В.Е. Накоряков // Изв. АН СССР. МЖГ. – 1987. – № 4. – С. 85–92.
2. Донцов, В.Е. Структура и динамика возмущений давления конечной амплитуды в пористой среде, насыщенной жидкостью с пузырьками газа / В.Е. Донцов // Изв. АН СССР. МЖГ. – 1992. – № 1. – С. 80–85.
3. Донцов, В.Е. Структура и динамика «медленной» волны давления в пористой среде, насыщенной жидкостью с пузырьками газа / В.Е. Донцов, В.А. Маслов // Прикладная механика и техническая физика. – 1994. – № 1. – С. 95–98.
4. Smeulders, D.M.J. Waves in Partially Saturated Porous Media / D.M.J Smeulders, J.P.M. De La Rosette, M.E.H. Vandongen // Transport in Porous Media. – 1992. – Vol. 9, Iss. 1. – P. 25–37.
5. Smeulders, D.M.J. On Wave Propagation in Saturated and Partially Saturated Porous Media / D.M.J. Smeulders. – Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven, 1992. – 131 p.
6. Van der Grinten, J.G.M. An Experimental Study of Shock-Induced Wave Propagation in Dry, Water-Saturated, and Partially Saturated Porous Media / J.G.M. Van der Grinten. – Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven, 1987. – 111 p.
7. Губайдуллин, А.А. Распространение импульсных возмущений в цилиндрическом волноводе в насыщенной пузырьковой жидкостью пористой среде / А.А. Губайдуллин, О.Ю. Болдырева, Д.Н. Дудко // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. – 2019. – Т. 5, № 1. – С. 111–122.
8. Нигматулин, Р.И. Динамика многофазных сред / Р.И. Нигматулин. – М.: Наука, 1987. – Ч. 1. – 464 с.
9. Губайдуллин, Д.А. Динамика смесей жидкости с пузырьками нерастворимого газа. Сравнение теории с экспериментом / Д.А. Губайдуллин, А.А. Никифоров // Известия вузов. Проблемы энергетика. – 2007. – Т. 1-2. – С. 3–7.
10. Губайдуллин, Д.А. Акустические возмущения разной геометрии в смеси жидкости с пузырьками нерастворимого газа / Д.А. Губайдуллин, А.А. Никифоров // Известия вузов. Проблемы энергетика. – 2005. – Т. 1-2. – С. 3–10.
11. Pressure Wave Propagation in Porous Structure Saturated with Water and Methane Bubbles / A.A. Gubaidullin, O.Yu. Boldyreva, D.N. Hai *et al.* // Proceedings of the 1st International Conference on Fluid Machinery and Automation Systems. Hanoi, Vietnam. – 2018. – P. 574–577.
12. Gubaidullin, A.A. Waves in Porous Media Saturated with Bubbly Liquid / A.A. Gubaidullin, O.Yu. Boldyreva, D.N. Dudko // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – Vol. 899, no. 3. – P. 032011.
13. Гималтдинов, И.К. Динамика звуковых волн при наклонном падении на границу «пористая среда – газ» / И.К. Гималтдинов, Л.Ф. Ситдикова // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. – 2015. – Т. 1, № 2(2). – С. 112–123.

14. Гималтдинов, И.К. Динамика звуковых волн в насыщенных парогазовой смесью пористых средах / И.К. Гималтдинов, В.Л. Дмитриев, Л.Ф. Ситдикова // Теплофизика высоких температур. – 2014. – Т. 52, № 4. – С. 572–580.

15. Ситдикова, Л.Ф. Об эволюции линейных волн в пористой среде, насыщенной пузырьковой жидкостью / Л.Ф. Ситдикова // Проблема сбора, подготовки и транспорта нефти и нефтепродуктов. – 2020. – Вып. 5. – С. 9–20.

16. Нигматулин, Р.И. Проявление сжимаемости несущей фазы при распространении волн в пузырьковой среде / Р.И. Нигматулин, В.Ш. Шагапов, Н.К. Вахитова // ДАН СССР. – 1989. – Т. 304, № 5. – С. 1077–1081.

17. Дмитриев, В.Л. Распространение линейных волн в насыщенных пористых средах с учетом межфазного теплообмена: дис. ... канд. физ.-мат. наук / В.Л. Дмитриев. – Уфа: Башкир. гос. ун-т, 2005. – 134 с.

Поступила в редакцию 14 мая 2020 г.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 1, pp. 59–66

DOI: 10.14529/mmph210107

THE PROBLEM OF THE PROPAGATION OF ACOUSTIC WAVES IN A POROUS ENVIRONMENT SATURATED WITH BUBBLE LIQUID

L.F. Sitdikova, I.K. Gimaltidinov

Ufa State Petroleum Technological University, Ufa, Russian Federation

E-mail: sitdikovalf@yandex.ru

In many cases, formation fluids contain gas. For example, a gas-liquid mixture in a porous medium is formed during acid treatment of low-permeability zones, during water-gas stimulation of reservoirs, etc. Therefore, it seems relevant to take into account the presence of gas bubbles when studying wave processes in porous media saturated with liquid.

In this work, the propagation of acoustic waves in a porous medium saturated with a gas-liquid mixture is theoretically investigated taking into account the interfacial forces of interaction between the liquid and the matrix, and heat transfer between the gas and the liquid. A general system of equations and physical relations is written, which describes the propagation of waves in a porous medium filled with bubble liquid. A dispersion relation is obtained that describes the dependence of the complex wave vector on the frequency, on the basis of which the dependence of the phase velocity and attenuation coefficient on the frequency for "fast" and "slow" waves is investigated.

The calculation results make it possible to evaluate the effect of gas bubbles on the propagation of sound waves in a porous medium saturated with bubble liquid. In addition, the results of the work can be used to interpret the data of acoustic sounding of porous media.

Funding: The reported study was funded by RFBR, project number № 19-31-60015.

Keywords: porous medium; acoustic wave; bubble liquid; "fast" wave; "slow" wave.

References

1. Dontsov V.E., Kuznetsov V.V., Nakoryakov V.E. Pressure Waves in a Porous Medium Saturated with a Gassy Fluid. *Fluid Dynamics*, 1987, Vol. 22, pp. 564–570. DOI: 10.1007/BF01051421

2. Dontsov V.E. Structure and Dynamics of Finite-Amplitude Pressure Perturbations in a Porous Medium Saturated with Gassy Fluid. *Fluid Dynamics*, 1992, Vol. 27, pp. 60–63. DOI: 10.1007/BF01054174

3. Dontsov V.E., Maslov V.A. Struktura i dinamika "medlennoy" volny davleniya v poristoy srede, nasyshchennoy zhidkost'yu s puzyr'kami gaza (Structure and Dynamics of a "Slow" Pressure Wave in a Porous Medium Saturated with a Liquid with Gas Bubbles). *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika*, 1994, no. 1, pp. 95–98. (in Russ.).

4. Smeulders D.M.J., De la Rosette J.P.M. Vandongen M.E.H. Waves in Partially Saturated Porous Media. *Transport in Porous Media*, 1992, Vol. 9, Iss. 1, pp. 25–37. DOI: 10.1007/BF01039623
5. Smeulders D.M.J. *On Wave Propagation in Saturated and Partially Saturated Porous Media*. Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven, 1992, 131 p. DOI: 10.6100/IR375910.
6. Van der Grinten J.G.M. *An Experimental Study of Shock-Induced Wave Propagation in Dry, Water-Saturated, and Partially Saturated Porous Media*. Technische Universiteit Eindhoven, 1987, 111 p. DOI: 10.6100/IR274910
7. Gubaidullin A.A., Boldyreva O.Yu., Dudko D.N. Propagation of Pulse Perturbations in a Cylindrical Waveguide in a Porous Medium Saturated with Bubbly Liquid. *Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy*, 2019, Vol. 5, no. 1, pp. 111–122. DOI: 10.21684/2411-7978-2019-5-1-111-122
8. Nigmatulin R.I. *Dinamika mnogofaznykh sred. Chast' 1* (The Dynamics of Multiphase Media. Part 1). Moscow, Nauka Publ., 1987, 464 p. (in Russ.).
9. Gubaidullin D.A., Nikiforov A.A. Dynamics of Mixtures of a Liquid with Bubbles of Insoluble Gas. Comparison between Theory and Experiment. *Power engineering: research, equipment, technology*, 2007, Vol. 1-2, pp. 3–7. (in Russ.).
10. Gubaidullin D.A., Nikiforov A.A. Acoustic Waves of Different Geometry in the Mixtures of a Liquid with Insoluble Gas Bubbles. *Power engineering: research, equipment, technology*, 2005, Vol. 1-2, pp. 3–10. (in Russ.).
11. Gubaidullin A.A., Boldyreva O.Yu., Hai D.N., Dudko D.N., Musakaev N.G., Thang N.T., Thai N.Q. Pressure Wave Propagation in Porous Structure Saturated with Water and Methane Bubbles. *Proc. 1st International Conference on Fluid Machinery and Automation Systems, Hanoi, Vietnam*, 2018, pp. 574–577.
12. Gubaidullin A.A., Boldyreva O.Yu., Dudko D.N. Waves in Porous Media Saturated with Bubbly Liquid. *Journal of Physics: Conference Serie*, 2017, Vol. 899, no. 3, pp. 032011. DOI: 10.1088/1742-6596/899/3/032011
13. Gimaltdinov I.K., Sitdikova L.F. The Dynamics of the Sound Waves at Oblique Incidence on the Border “Porous Medium–Gas”. *Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy*, 2015, Vol. 1, no. 2(2), pp. 112–123. (in Russ.).
14. Gimaltdinov I.K., Dmitriev V.L., Sitdikova L.F. Dinamika zvukovykh voln v nasyshchennykh parogazovoy smes'yu poristyykh sredakh (Dynamics of Sound Waves in Porous Media Saturated with a Vapor–Gas mixture). *High Temperature*, 2014, Vol. 52, no. 4, pp. 545–553. (in Russ.). DOI: 10.1134/S0018151X14030134
15. Sitdikova L.F. Evolution of Linear Waves in a Porous Medium Saturated with a Bubble Liquid. *Problems of Gathering, Treatment and Transportation of oil and oil products*, 2020, Iss. 5, pp. 9–20. (in Russ.). DOI: 10.17122/ntj-oil-2020-5-9-20
16. Nigmatulin R.I., Shagapov V. Sh., Vakhitova N.K. Effect of the Compressibility of the Carrier Phase in Wave Propagation in a Bubble Medium. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 1989, Vol. 304, no. 5, 1077–1081. (in Russ.).
17. Dmitriev V.L. *Rasprostraneniye lineynykh voln v nasyshchennykh poristyykh sredakh s uchetom mezhfaznogo teploobmena: dis. ... kand. fiz.-mat. nauk* (Linear Wave Propagation in Saturated Porous Media, Taking into Account Interfacial Heat Transfer. Cand. phys. and math. sci. diss.). Ufa, Bashkir. gos. un-t Publ., 2005, 134 p. (in Russ.).

Received May 14, 2020

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).

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Рецензируемые научные издания, входящие в международные реферативные базы данных и системы цитирования и включенные в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук» по следующим отраслям и группам специальностей: 01.01.00 – Математика, 01.02.00 – Механика, 01.04.00 – Физика, 05.13.00 – Информатика, вычислительная техника и управление.

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

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

Периодичность выхода – 4 номера в год.

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

ВЕСТНИК
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
Серия
«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»
Том 13, № 1
2021

16+

Редактор: *Н.Н. Егорьева*
Техн. редактор *А.В. Миних*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 29.01.2021. Дата выхода в свет 05.02.2021.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 7,90.

Тираж 500 экз. Заказ 11/32. Цена свободная.

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