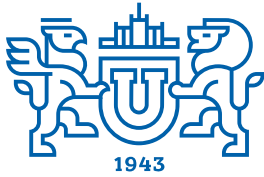


ВЕСТНИК



**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

**2021
Т. 13, № 4**

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

СЕРИЯ

**«МАТЕМАТИКА.
МЕХАНИКА.
ФИЗИКА»**

Решением ВАК России включен в Перечень рецензируемых научных изданий

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

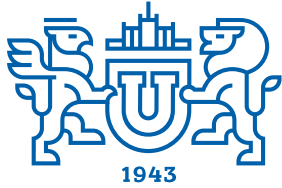
Основной целью серии «Математика. Механика. Физика» является публикация и распространение оригинальных результатов научных исследований в области математики, механики и физики, а также их приложений в естественных, технических и экономических науках.

Редакционная коллегия

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

Редакционный совет

д.т.н., профессор **Богомолов А.В.** (Государственный научный центр Российской Федерации – Федеральный медицинский биофизический центр имени А.И. Бурназяна, г. Москва)
д.ф.-м.н. **Бржезинская М.М.** (Берлинский центр материалов и энергии им. Гельмгольца, г. Берлин, Германия)
д.ф.-м.н., профессор **Бровко Г.Л.** (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** (ИНХА-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. **Ферпугт 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. 4

“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**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E.V. Golubev, Candidate of Physics and Mathematics, Associated Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
V.P. Beskachko, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
V.I. Zalyapin, Candidate of Physics and Mathematics, Associated Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
Yu.M. Kovalev, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

Editorial Council

- A.V. Bogomolov**, Doctor of Engineering, Professor, 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, Doctor of Physics and Mathematics, Helmholtz-Zentrum Berlin for Materials and Energy, Berlin, Germany
G.L. Brovko, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow State University, Moscow, Russian Federation
V.D. Buchelnikov, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation
D. Guidetti, Full Professor of Mathematical Analysis, University of Bologna, Bologna, Italy
V.I. Zhukovsky, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow State University, Moscow, Russian Federation
I.V. Zalyapin, Candidate of Physics and Mathematics, Ph. D., Professor, University of Nevada, Reno, United States of America
S.V. Zelik, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, University of Surrey, Guildford, United Kingdom
A.I. Korotkii, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation
Jaewan Kim, Ph. D., Professor, Korea Institute for Advanced Study KIAS, Seoul, South Korea
Kisik Kim, Ph. D., Professor, INHA-University, Incheon, South Korea
N.D. Kundikova, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Institute of Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation
V.V. Menshikh, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Voronezh Institute of Russian Ministry of Internal Affairs, Voronezh, Russian Federation
S.I. Pinchuk, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Indiana University, Bloomington, United States of America
Y.S. Puzyrev, Ph. D., Assistant Professor, Vanderbilt University, Nashville, United States of America
N.K. Ravshanov, Doctor of Engineering, Professor, Tashkent University of Information Technologies, Tashkent, Uzbekistan
L.V. Utkin, Doctor of Engineering, Professor, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation
I. Verpoest, Dr. ir., Professor, Catholic University, Leuven, Belgium
V.A. Strauss, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, University of Simon Bolivar, Caracas, Venezuela

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

- KARAHAN D., MAMEDOV K.R. On a q -Boundary Value Problem with Discontinuity Conditions..... 5
- ДИЛЬМАН В.Л., КОМИССАРОВА Д.А. Условия существования и единственности решений линейных функциональных уравнений в классах первообразных от лебеговских функций на простой гладкой кривой..... 13
- МОКНОВ V.G., СЕВОТАРЕВА G.S. Making Investment Decisions in an Industrial Enterprise under Uncertainty..... 24
- СОЛДАТОВА Е.А., КЕЛЛЕР А.В. Алгоритмы и обработка информации в численном исследовании стохастической модели Баренблатта–Желтова–Кочиной..... 29

Механика

- БУРКИН В.В., ДЬЯЧКОВСКИЙ А.С., ИЩЕНКО А.Н., КАСИМОВ В.З., САМОРОКОВА Н.М., СИДОРОВ А.Д., СТЕПАНОВ Е.Ю. Исследование возможностей повышения скорости поршня в условиях электротермохимической технологии воспламенения применительно к установке среднего калибра..... 37
- ШАБЛОВСКИЙ О.Н. Волновое уравнение с кубической нелинейностью и возбуждение колебаний в системе «среда–источник» 44

Физика

- VERKHOVYKH A.V., MIRZOEV A.A., DYURYAGINA N.S. Ab initio Modeling of Interactions of P, H, C, S with Grain Boundaries in α -Iron..... 57
- КОНОВАЛОВ Д.А., РЯЖСКИХ А.В., ХВОСТОВ А.А., СОБОЛЕВА Е.А. Диффузионный перенос в шарообразной грануле с идеальным контактом двух последовательных разнопроportionируемых осесимметричных областей при граничных условиях первого рода..... 69

Краткие сообщения

- РАЗУМОВСКИЙ П.В., АБРОСИМОВ М.Б. Минимальные вершинные расширения цветных полных графов..... 77

Информация

- Евгений Анатольевич Беленков (21.01.1964 – 28.10.2021)..... 90
- Наталья Борисовна Медведева (24.10.1960 – 2.08.2021) 91

CONTENTS

Mathematics

- KARAHAN D., MAMEDOV K.R. On a q -Boundary Value Problem with Discontinuity Conditions..... 5
- DILMAN V.L., KOMISSAROVA D.A. Existence and Uniqueness Conditions for Solutions of Linear Functional Equations in the Classes of Lebesgue Functions Antiderivatives on a Simple Smooth Curve 13
- MOKHOV V.G., CHEBOTAREVA G.S. Making Investment Decisions in an Industrial Enterprise under Uncertainty 24
- SOLDATOVA E.A., KELLER A.V. Algorithms and Information Processing in Numerical Research of the Barenblatt–Zhel'tov–Kochina Stochastic Model..... 29

Mechanics

- BURKIN V.V., D'YACHKOVSKIY A.S., ISHCENKO A.N., KASIMOV V.Z., SAMOROKOVA N.M., SIDOROV A.D., STEPANOV E.Yu. Investigation of the Possibilities of Increasing the Projectile Velocity under the Conditions of Electrothermal-Chemical Ignition Technology as Applied to a Medium-Caliber Installation..... 37
- SHABLOVSKII O.N. Wave Equation with Cubic Nonlinearity and Excitation of Oscillations in the “Medium–Source” System..... 44

Physics

- VERKHOVYKH A.V., MIRZOEV A.A., DYURYAGINA N.S. Ab initio Modeling of Interactions of P, H, C, S with Grain Boundaries in α -Iron..... 57
- KONOVALOV D.A., RYAZHSHIKH A.V., KHVOSTOV A.A., SOBOLEVA E.A. Diffusion Transfer in a Spherical Granule with Ideal Contact of Two Consecutive Multi-Permeable Axisymmetric Areas under Boundary Conditions of the First Kind 69

Short communications

- RAZUMOVSKY P.V., ABROSIMOV M.B. The Minimal Vertex Extensions for Colored Complete Graphs 77

Information

- Evgeniy Anatol'evich Belenkov (21.01.1964 – 28.10.2021) 90
- Nataliya Borisovna Medvedeva (24.10.1960 – 2.08.2021) 91

ON A q -BOUNDARY VALUE PROBLEM WITH DISCONTINUITY CONDITIONS

D. Karahan¹, K.R. Mamedov²

¹ Harran University, Sanlurfa, Turkey

E-mail: dkarahan@harran.edu.tr

² Mersin University, Mersin, Turkey

E-mail: hanlar@mersin.edu.tr

In this paper, we studied q -analogue of Sturm–Liouville boundary value problem on a finite interval having a discontinuity in an interior point. We proved that the q -Sturm–Liouville problem is self-adjoint in a modified Hilbert space. We investigated spectral properties of the eigenvalues and the eigenfunctions of q -Sturm–Liouville boundary value problem. We shown that eigenfunctions of q -Sturm–Liouville boundary value problem are in the form of a complete system. Finally, we proved a sampling theorem for integral transforms whose kernels are basic functions and the integral is of Jackson’s type.

Keywords: q -Sturm–Liouville operator; self-adjoint operator; completeness of eigenfunctions; sampling theory.

Introduction

Boundary value problems with discontinuity conditions on the interval often appear in mathematics and other branches of sciences. Quantum calculus was initiated at the beginning of the 19th century and in recent years, many papers subject to the boundary value problems consisting a q -Jackson derivative in the classical Sturm–Liouville problem have occurred [1]. In [2, 3], q -Sturm–Liouville problems are investigated and a space of boundary values of the minimal operator and describe all maximal dissipative, self-adjoint, maximal accretive and other extensions of q -Sturm–Liouville operators in terms of boundary conditions are raised. A theorem on completeness of the system of eigenfunctions and associated functions of dissipative operators are proved by using the Lidskii’s theorem.

Also, there are a lot of physical models involving q -difference and their related problems in [4, 5]. In [6], the construction of expansions in q -Fourier series was followed by the derivation of the q -sampling theorems. In [7], a q -version of the sampling theorem was derived using the q -Hankel transform. The sampling theory associated with q -type of Sturm–Liouville equations is conceived (see [8, 9]).

In [10], it is proved that the regular symmetric q -Sturm–Liouville operator is semi-bounded and investigated the continuous spectrum of this operator. In [11], authors established a Parseval equality and an expansion formula in eigenfunctions for a singular q -Sturm–Liouville operator.

In this paper, q -analogue of Sturm–Liouville boundary value problems with discontinuity conditions in an interior point ([12]) are discussed.

Let us consider the boundary value problem \mathbf{L} for the equation:

$$\mathbf{I}(y) := -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q y(x) + v(x)y(x) = \nu y(x), \quad (1)$$

on the interval $x \in (0, T)$ with the boundary conditions

$$U(y) := D_{q^{-1}} y(0) - \gamma y(0) = 0, \quad V(y) := D_{q^{-1}} y(T) + \Gamma y(T) = 0, \quad (2)$$

together with the jump conditions at a point $a \in (0, T)$

$$y(a+0) = \alpha_1 y(a-0), \quad D_{q^{-1}} y(a+0) = \alpha_1^{-1} D_{q^{-1}} y(a-0) + \alpha_2 y(a-0). \quad (3)$$

Here $v(x) \in L_q^2(0, T)$ is a real-valued function, $\alpha_1, \alpha_2, \gamma$ and Γ are real numbers; $\alpha_1 > 0$.

1. Preliminaries on q -calculus

In this section, we give some of the q -notations and we will use these q -notations throughout the paper. These standard notations are founded in [13].

Let q be a positive number with $0 < q < 1$. Let h be a real or complex valued function on A (A is q -geometric set (see [2])). The q -difference operator D_q (the Jackson q -derivative) is defined as

$$D_q h(x) = \frac{h(x) - h(qx)}{x(1-q)}, \quad x \neq 0.$$

When required we will replace q by q^{-1} . We can demonstrate the correctness of the following facts using the definition and will use often

$$D_{q^{-1}} h(x) = (D_q h)(q^{-1}x), \quad D_q^2 h(q^{-1}x) = q D_q [D_q h(q^{-1}x)] = D_{q^{-1}} D_q h(x).$$

Let h and g be defined on a q -geometric set A such that the q -derivatives of h and g exist for all $x \in A$. Then, there is a non-symmetric formula for the q -differentiation of a product

$$D_q [h(x)g(x)] = h(qx)D_q g(x) + g(x)D_q h(x). \quad (4)$$

The q -integral usually associated with the name of Jackson is defined in the interval $(0, T)$, as

$$\int_0^T h(x) d_q x = (1-q) \sum_{n=0}^{\infty} h(Tq^n) Tq^n.$$

Let $L_q^2(0, T)$ be the space of all complex-valued functions defined on $(0, T)$, such that

$$\|h\| = \left(\int_0^T |h(x)|^2 d_q x \right)^{\frac{1}{2}} < \infty.$$

The space $L_q^2(0, T)$ is a separable Hilbert space (see [6]) with the inner product

$$\langle h, g \rangle = \int_0^T h(x) \overline{g(x)} d_q x.$$

If h and g are both q -regular at zero, there is a rule of q -integration by parts given by

$$\int_0^T g(x) D_q h(x) d_q x = (hg)(T) - (hg)(0) - \int_0^T D_q g(x) h(qx) d_q x. \quad (5)$$

The q appearing in the argument of h in the right-hand side integrand is another manifestation of the symmetry that is everywhere present in q -calculus. As an important special case, we have

$$\int_0^T D_q h(x) d_q x = (h)(T) - (h)(0). \quad (6)$$

Lemma 1. (see [2]) Let $h(\cdot)$, $g(\cdot)$ in $L_q^2(0, T)$ be defined on $[0, q^{-1}T]$. Then, for $x \in (0, T)$ we have

$$(D_q h)(xq^{-1}) = D_{q^{-1}} h(x), \quad (7)$$

$$\langle D_q h, g \rangle = h(T) \overline{g(Tq^{-1})} - \lim_{n \rightarrow \infty} h(Tq^n) \overline{g(Tq^{n-1})} + \langle h, -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} g \rangle, \quad (8)$$

$$\langle -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} h, g \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} h(Tq^{n-1}) \overline{g(Tq^n)} - h(Tq^{-1}) \overline{g(T)} + \langle h, D_q g \rangle. \quad (9)$$

2. Properties of the spectral characteristics

Let $h(x)$ and $g(x)$ be continuously differentiable functions on $[0, a]$ and $[a, T]$. Denote

$$W_q(h, g)(x) = \langle h, g \rangle := h(x)D_q g(x) - g(x)D_q h(x).$$

Here $W_q(h, g)$ is defined as the q -Wronskian of two function h and g . If $h(x)$ and $g(x)$ satisfy the jump conditions (3), then

$$\langle h, g \rangle_{|x=a+0} = \langle h, g \rangle_{|x=a-0}, \quad (10)$$

i. e. the function $\langle h, g \rangle$ is continuous on $[0, T]$. Applying formula (4), we obtain

$$D_q W_q(h, g)(x) = D_q (h(x)D_q g(x) - g(x)D_q h(x)) = h(qx)D_q^2 g(x) - g(qx)D_q^2 h(x). \quad (11)$$

On the other hand,

$$\begin{aligned} D_q W_q(h, g)(q^{-1}x) &= h(x)D_q^2 g(q^{-1}x) - g(x)D_q^2 h(q^{-1}x) \\ &= qh(x)[v(x)g(x) - v g(x)] - qg(x)[v(x)h(x) - v h(x)] = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

As a result,

$$0 = D_q W_q(h, g)(q^{-1}x) = \frac{W_q(h, g)(q^{-1}x) - W_q(h, g)(x)}{q^{-1}x(1-q)}, \quad (13)$$

so, for $x \neq 0$,

$$W_q(h, g)(x) = W_q(h, g)(q^{-1}x), \quad (14)$$

i. e. the q -Wronskian $W_q(h, g)(x)$ does not depend on x .

Let $\eta(x, \nu)$ and $\xi(x, \nu)$ be the solution of equation (1) under the boundary conditions

$$\eta(0, \nu) = \xi(T, \nu) = 1, \quad D_{q^{-1}}\eta(0, \nu) = \gamma, \quad D_{q^{-1}}\xi(T, \nu) = -\Gamma. \quad (15)$$

and under the jump conditions (3). Then

$$U(\eta) = V(\xi) = 0. \quad (16)$$

Since the q -Wronskian is independent of x , we can evaluate

$$W_q(\eta, \xi)(\nu) := W_q(\nu) = -V(\eta) = U(\xi). \quad (17)$$

$W_q(\nu)$ is called the characteristic function of \mathbf{L} .

Lemma 2. The eigenvalues $\{\nu_n\}_{n \geq 0}$ of the boundary value problem \mathbf{L} coincide with zeros of the characteristic function. The functions $\eta(x, \nu_n)$ and $\xi(x, \nu_n)$ are eigenfunctions and

$$\xi(x, \nu_n) = \beta_n \eta(x, \nu_n), \quad \beta_n \neq 0. \quad (18)$$

Denote

$$\alpha_n = \int_0^T \eta^2(x, \nu_n) d_q x. \quad (19)$$

The set $\{\nu_n, \alpha_n\}_{n \geq 0}$ is called the spectral date of \mathbf{L} .

Lemma 3. The following relation holds

$$\beta_n \alpha_n = \dot{W}_q(\nu_n), \quad (20)$$

where $\dot{W}_q(\nu) = D_q W_q(\nu)$ (respect to ν).

The proof of Lemma 2 and Lemma 3 can be done similar to [12].

Theorem 1. The q -Sturm–Liouville eigenvalue problem (1)–(3) is self-adjoint on $C_q^2(0) \cap L_q^2(0, T)$.

Proof. We first prove that $h(\cdot), g(\cdot)$ in $L_q^2(0, T)$, we have the following q -Lagrange's identity

$$\int_0^T (\mathbf{l}(h(x))\overline{g(x)} - h(x)\overline{\mathbf{l}(g(x))}) d_q x = [h, g](T) - \lim_{n \rightarrow \infty} [h, g](Tq^n), \quad (21)$$

where

$$[h, g](x) := h(x)\overline{D_{q^{-1}}g(x)} - D_{q^{-1}}h(x)\overline{g(x)}. \quad (22)$$

Applying (9) with $h(x) = D_q h(x)$ and $g(x) = g(x)$, we obtain

$$\begin{aligned} &< -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q h(x), g(x) > \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} (D_q h)(Tq^{n-1})\overline{g(Tq^n)} - (D_q h)(Tq^{-1})\overline{g(T)} + \langle D_q h, D_q g \rangle \end{aligned}$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} D_{q^{-1}} h(Tq^n) \overline{g(Tq^n)} - D_{q^{-1}} h(T) \overline{g(T)} + \langle D_q h, D_q g \rangle. \quad (23)$$

Applying (8) with $h(x) = h(x)$, $g(x) = D_q g(x)$, we obtain

$$\begin{aligned} \langle D_q h, D_q g \rangle &= h(T) D_q g(Tq^{-1}) - \lim_{n \rightarrow \infty} h(Tq^n) D_q g(Tq^{n-1}) + \langle h, -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q g \rangle \\ &= h(T) \overline{D_{q^{-1}} g(T)} - \lim_{n \rightarrow \infty} h(Tq^n) \overline{D_{q^{-1}} g(Tq^n)} + \langle h, -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q g \rangle. \end{aligned} \quad (24)$$

Therefore,

$$\langle -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q h(x), g(x) \rangle = [h, g](T) - \lim_{n \rightarrow \infty} [h, g](Tq^n) + \langle h, -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q g \rangle. \quad (25)$$

Lagrange's identity (21) results from (25) and the reality of $v(x)$. Letting $h(\cdot), g(\cdot)$ in $C_q^2(0)$ and assuming the that they satisfy (2)–(3), we obtain

$$D_{q^{-1}} h(0) - \mathcal{I}h(0) = 0, \quad D_{q^{-1}} g(0) - \mathcal{I}g(0) = 0. \quad (26)$$

The continuity of $h(\cdot), g(\cdot)$ at zero implies that $\lim_{n \rightarrow \infty} [h, g](Tq^n) = [h, g](0)$. Then (25) will be

$$\langle -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q h, g \rangle = [h, g](T) - [h, g](0) + \langle h, -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q g \rangle.$$

From (26), we have

$$[h, g](0) = h(0) \overline{D_{q^{-1}} g(0)} - D_{q^{-1}} h(0) \overline{g(0)} = 0.$$

Similarly, from (2) we obtain

$$[h, g](T) = h(T) \overline{D_{q^{-1}} g(T)} - D_{q^{-1}} h(T) \overline{g(T)} = 0.$$

Since $v(x)$ is real-valued function, then

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{l}(h), g \rangle &= \langle -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q h(x) + v(x)h(x), g(x) \rangle = \langle -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q h(x), g(x) \rangle + \langle v(x)h(x), g(x) \rangle \\ &= \langle h, -\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q g \rangle + \langle h(x), v(x)g(x) \rangle = \langle h, \mathbf{l}(g) \rangle, \end{aligned}$$

i.e. \mathbf{l} is a self-adjoint operator.

Lemma 4. The eigenvalues $\{v_n\}$ of the boundary value problem (1)–(3) are real. Eigenfunctions related to different eigenvalues are orthogonal in $L_q^2(0, T)$. All zeros of $W_q(v)$ are simple, i. e. $\dot{W}_q(v_n) \neq 0$.

Proof. Let v_0 be an eigenvalue with an eigenfunction $\eta_0(\cdot)$. Then,

$$\langle \mathbf{l}(\eta_0), \eta_0 \rangle = \langle \eta_0, \mathbf{l}(\eta_0) \rangle. \quad (27)$$

Since $\mathbf{l}(\eta_0) = v_0 \eta_0$, then

$$(v_0 - \overline{v_0}) \int_0^T |\eta_0(x)|^2 d_q x. \quad (28)$$

Since $\eta_0(\cdot)$ is non-trivial then $v_0 = \overline{v_0}$. So the eigenvalues are real.

Let v, μ be two distinct eigenvalues with corresponding eigenfunctions $\eta(\cdot), \xi(\cdot)$, respectively. Then,

$$(v - \mu) \int_0^T \eta(x) \overline{\xi(x)} d_q x = 0.$$

Since $v \neq \mu$, then $\eta(\cdot)$ and $\xi(\cdot)$ are orthogonal.

Since $\eta(x, v_n)$ and $\xi(x, v)$ are solutions of the boundary value problem (1)–(3), we obtain

$$D_q \langle \eta(x, v_n), \xi(x, v) \rangle = (v_n - v) \eta(x, v_n) \xi(x, v). \quad (29)$$

Integrating equation (29) from 0 to T and using the conditions (2), we obtain

$$\int_0^T \eta(x, \nu_n), \xi(x, \nu) d_q x = \frac{W_q(\nu_n) - W_q(\nu)}{\nu_n - \nu}.$$

Since $\xi(x, \nu_n) = \beta_n \eta(x, \nu_n)$ as $\nu \rightarrow \nu_n$, we obtain

$$\dot{W}_q(\nu_n) = \beta_n \alpha_n.$$

Thus it follows that $\dot{W}_q(\nu_n) \neq 0$.

3. Completeness of Eigenfunctions

Theorem 2. The system of eigenfunctions $\{\eta(x, \nu_n)\}_{n \geq 0}$ of the boundary value problem (1)–(3) is complete in $L_q^2(0, T)$.

Proof. Consider the function

$$Y(x, \nu) = \frac{1}{W_q(\nu)} \left[\xi(x, \nu) \int_0^x \eta(t, \nu) h(t) d_q t + \eta(x, \nu) \int_x^T \xi(t, \nu) h(t) d_q t \right].$$

It is easy to verify that

$$-\frac{1}{q} D_{q^{-1}} D_q Y(x) + \{-\nu + \nu(x)\} Y(x) = h(x), \quad x \in [0, T], \quad \nu \in \mathbb{C}, \quad (30)$$

Furthermore, taking into account (19), from (18) and (20) we get

$$\begin{aligned} \text{Res}_{\nu=\nu_n} Y(x, \nu) &= \frac{1}{\dot{W}_q(\nu_n)} \left[\xi(x, \nu_n) \int_0^x \eta(t, \nu_n) h(t) d_q t + \eta(x, \nu_n) \int_x^T \xi(t, \nu_n) h(t) d_q t \right] \\ &= \frac{\beta_n}{\dot{W}_q(\nu_n)} \eta(x, \nu_n) \int_0^T \eta(t, \nu_n) h(t) d_q t = \frac{1}{\alpha_n} \eta(x, \nu_n) \int_0^T \eta(t, \nu_n) h(t) d_q t. \end{aligned} \quad (31)$$

Let the function $h(x) \in L_q^2(0, T)$ be such that

$$\int_0^T \eta(t, \nu_n) h(t) d_q t = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (32)$$

Then in view of (31), $\text{Res}_{\nu=\nu_n} Y(x, \nu) = 0$ and consequently for each fixed $x \in [0, T]$, the function

$Y(x, \nu)$ is entire in ν . Furthermore, for $\rho \in G_\delta = \{\rho : |\rho - \rho_n| \geq \delta\}$ and $|\rho| \geq \rho^*$ where $\nu = \rho^2$, ρ_n are the zeros of the function

$$W_q^0(\rho) = \rho(b_1 \sin \rho T - b_2 \sin \rho(2a - T)),$$

where $b_1 = \frac{\alpha_1 + \alpha_1^{-1}}{2}$, $b_2 = \frac{\alpha_1 - \alpha_1^{-1}}{2}$, δ is a fixed positive number, ρ^* is rather large, the inequality

$$|W_q(\nu)| \geq C_\delta |\rho| e^{|\tau|T}, \quad \rho \in C_\delta, \quad \rho = \sigma + i\tau$$

and consequently the inequality

$$|Y(x, \nu)| \leq \frac{C_\delta}{|\rho|}, \quad \rho \in G_\delta,$$

is obtained (see [12]). Using the maximum principle and Liouville's theorem we conclude that $Y(x, \nu) \equiv 0$. From this and (30) it follows that $h(x) = 0$ a. e. on $(0, T)$. Thus the theorem is proved.

4. The q -sampling theory

Theorem 3. Let $\eta(x, \nu)$ and $\xi(x, \nu)$ be the solutions of (1) selected as above. Then every function h of the form

$$h(\nu) = \int_0^T \nu(x) \eta(x, \nu) d_q x, \quad \nu \in L_q^2(0, T), \quad (33)$$

can be written as the Lagrange-type sampling expansion

$$h(v) = \sum_{n=0}^{\infty} h(v_n) \frac{W_q(v)}{W_q(v_n)(v-v_n)}, \tag{34}$$

where $W_q(v)$ is the q -Wronskian of the functions $\eta(x, v)$ and $\xi(x, v)$.

Proof. We multiply equation (1) with $\eta(x, v_n)$. Then we consider again equation (1), but replace v by v_n and multiply this last equation by $\eta(x, v)$. Subtracting the two results yields

$$(v - v_n)\eta(x, v)\eta(x, v_n) = D_q^2\eta(q^{-1}x, v_n)\eta(x, v) - D_q^2\eta(q^{-1}x, v)\eta(x, v_n).$$

From the rule for the q -differentiation of product (4), we can write

$$(v - v_n)\eta(x, v)\eta(x, v_n) = D_q \left[D_q\eta(q^{-1}x, v_n)\eta(x, v) - D_q\eta(q^{-1}x, v)\eta(x, v_n) \right]$$

If we apply a q -integration by means of (6) we obtain

$$\begin{aligned} (v - v_n) \int_0^T \eta(x, v)\eta(x, v_n) d_q x &= \int_0^T D_q \left[D_q\eta(q^{-1}x, v_n)\eta(x, v) - D_q\eta(q^{-1}x, v)\eta(x, v_n) \right] d_q x \\ &= D_q\eta(q^{-1}T, v_n)\eta(T, v) - D_q\eta(q^{-1}T, v)\eta(T, v_n) - \left(D_q\eta(q^{-1}0, v_n)\eta(0, v) - D_q\eta(q^{-1}0, v)\eta(0, v_n) \right) \end{aligned}$$

From the condition (2), we have

$$\begin{aligned} D_q\eta(q^{-1}0, v_n)\eta(0, v) - D_q\eta(q^{-1}0, v)\eta(0, v_n) &= D_{q^{-1}}\eta(0, v_n)\eta(0, v) - D_{q^{-1}}\eta(0, v)\eta(0, v_n) \\ &= D_{q^{-1}}\eta(0, v_n) - \gamma\eta(0, v_n) = U(\eta) = 0. \end{aligned}$$

Multiply (17) by $\eta(T, v_n)$ to obtain

$$\begin{aligned} W_q(v)\eta(T, v_n) &= -D_{q^{-1}}\eta(T, v)\eta(T, v_n) - \Gamma\eta(T, v)\eta(T, v_n) \\ &= -D_{q^{-1}}\eta(T, v)\eta(T, v_n) + D_{q^{-1}}\eta(T, v_n)\eta(T, v). \end{aligned}$$

Then, we get

$$(v - v_n) \int_0^T \eta(x, v)\eta(x, v_n) d_q x = W_q(v)\eta(T, v_n).$$

as a result,

$$\int_0^T \eta(x, v)\eta(x, v_n) d_q x = \frac{W_q(v)\eta(T, v_n)}{v - v_n}$$

and taking the limit as $v \rightarrow v_n$ gives

$$\int_0^T |\eta(x, v_n)|^2 d_q x = \dot{W}_q(v_n)\eta(T, v_n).$$

We can therefore apply Kramer's lemma (see [14]) and write an integral transform of the form (33) as

$$h(v) = \sum_{n=0}^{\infty} h(v_n) \frac{W_q(v)}{W_q(v_n)(v-v_n)}. \tag{35}$$

References

1. Jackson F.H. q -Difference Equations. *Am. J. Math.*, 1910, Vol. 32, no. 4, pp. 305–314.
2. Annaby M.H., Mansour Z.S. q -Difference Equations. In: *q-Fractional Calculus and Equations. Lecture Notes in Mathematics*, vol. 2056. Springer, Berlin, Heidelberg, 2012. DOI: 10.1007/978-3-642-30898-7_2
3. Annaby M.H., Mansour Z. S. Basic Sturm–Liouville problems. *J. Phys. A: Math. Gen*, 2005, Vol. 38, pp. 3775–3797.
4. Chung K., Chung W., Nam S., Kang, H. New q -Derivative and q -Logarithm. *Int. J. Theor. Phys.*, 1994, Vol. 33, Iss. 10, pp. 2019–2029. DOI: 10.1007/BF00675167
5. Floreanini R., LeTourneux J., Vinet L. More on the q -Oscillator Algebra and q -Orthogonal Polynomials. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, Vol. 28, no. 10, pp. L287–L293. DOI:10.1088/0305-4470/28/10/002

6. Annaby M.H. q -Type Sampling Theorems. *Result. Math.*, 2003, Vol. 44, Iss. 3, pp. 214–225. DOI: 10.1007/BF03322983
7. Abrue L.D. A q -Sampling Theorem Related to the q -Hankel Transform. *Proc. Am. Math. Soc.*, 2005, Vol. 133, no. 4, pp. 1197–1203. DOI:10.2307/4097680
8. Abreu L.D. Sampling theory associated with q -difference equations of the Sturm–Liouville type. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 2005, Vol. 38(48), pp. 10311–10319. DOI: 10.1088/0305-4470/38/48/005
9. Karahan D., Mamedov Kh.R. Sampling Theory Associated with q -Sturm–Liouville Operator with Discontinuity Conditions. *Journal of Contemporary Applied Mathematics*, 2020, Vol. 10, no. 2, pp. 40–48.
10. Allahverdiev B.P., Tuna H. Qualitative Spectral Analysis of Singular q -Sturm–Liouville Operators. *Bulletin of the Malaysian Mathematical Sciences Society*, 2020, Vol. 43, Iss. 2, pp. 1391–1402. DOI: 10.1007/s40840-019-00747-3
11. Allahverdiev B.P., Tuna H. Eigenfunction Expansion in the Singular Case for q -Sturm–Liouville Operators. *CJMS.*, 2019, Vol. 8, Iss. 2, pp. 91–102. DOI: 10.22080/CJMS.2018.13943.1339
12. Yurko, V. Integral Transforms Connected with Discontinuous Boundary Value Problems. *Integral Transforms and Special Functions*, 2000, Vol. 10, Iss. 2, pp. 141–164. DOI: 10.1080/10652460008819282
13. Gasper G., Rahman M. *Basic Hypergeometric Series*. Cambridge; New York: Cambridge University Press, 1990, 287 p.
14. Kramer H.P. A Generalized Sampling Theorem. *Journal of Mathematics and Physics*, 1959, Vol. 38, Iss.1-4, pp. 68–72. DOI:10.1002/SAPM195938168

Received October 13, 2021

Information about the authors

Karahan Döne, Mathematics Department, Science and Letter Faculty, Harran University, Sanlurfa, Turkey, e-mail: dkarahan@harran.edu.tr

Mamedov Khanlar Rashid, Mathematics Department, Science and Letters Faculty, Mersin University, Mersin, Turkey, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-3283-9535>, e-mail: hanlar@mersin.edu.tr

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 4, pp. 5–12

УДК 515.162.8

DOI: 10.14529/mmph210401

О q -ГРАНИЧНОЙ ЗАДАЧЕ С РАЗРЫВНЫМИ УСЛОВИЯМИ

Д. Карахан¹, К.Р. Мамедов²

¹ Университет Харран, Шанлыурфа, Турция

E-mail: dkarahan@harran.edu.tr

² Мерсинский университет, Мерсин, Турция

E-mail: hanlar@mersin.edu.tr

Изучается q -аналог граничной задачи Штурма–Лиувилля на конечном интервале, имеющем разрыв во внутренней точке. Доказывается, что q -граничная задача Штурма–Лиувилля является само-сопряженной в модифицированном Гильбертовом пространстве. Исследуются спектральные свойства собственных значений и собственных функций q -граничной задачи Штурма–Лиувилля. Показано, что собственные функции q -граничной задачи Штурма–Лиувилля представимы в виде полной системы. Наконец, доказывается теорема о дискретном представлении для интегральных преобразований, чьи ядра являются базисными функциями, а интеграл имеет тип Джексона.

Ключевые слова: q -оператор Штурма–Лиувилля; самосопряженный оператор; полнота собственных функций; теорема о дискретном представлении.

Литература

1. Jackson, F.H. q -Difference Equations / F.H. Jackson // Am. J. Math. – 1910. – Vol. 32, no. 4. – P. 305–314.
2. Annaby, M.H. q -Difference Equations / M.H. Annaby, Z.S. Mansour // q -Fractional Calculus and Equations. Lecture Notes in Mathematics. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2012. – Vol 2056.
3. Annaby, M.H. Basic Sturm–Liouville problems / M.H. Annaby, Z.S. Mansour // J. Phys. A: Math. Gen. – 2005. – Vol. 38. – P. 3775–3797.
4. New q -Derivative and q -Logarithm / K. Chung, W. Chung, S. Nam, H. Kang // Int. J. Theor. Phys. – 1994. – Vol. 33, Iss. 10. – P. 2019–2029.
5. Floreanini, R. More on the q -Oscillator Algebra and q -Orthogonal Polynomials / R. Floreanini, J. LeTourneux, L. Vinet // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 1995. – Vol. 28, no. 10. – P. L287–L293.
6. Annaby, M.H. q -Type Sampling Theorems / M.H. Annaby // Result. Math. – 2003. – Vol. 44, Iss. 3. – P. 214–225.
7. Abreu, L.D. A q -Sampling Theorem Related to the q -Hankel Transform / L.D. Abreu // Proc. Am. Math. Soc. – 2005. – Vol. 133. – P. 1197–1203.
8. Abreu, L.D. Sampling theory associated with q -difference equations of the Sturm–Liouville type / L.D. Abreu // J. Phys. A: Math. Gen. – 2005. – Vol. 38(48). – P. 10311–10319.
9. Karahan, D. Sampling Theory Associated with q -Sturm–Liouville Operator with Discontinuity Conditions / D. Karahan, Kh.R. Mamedov // Journal of Contemporary Applied Mathematics. – 2020. – Vol. 10, no. 2. – P. 40–48.
10. Allahverdiev, B.P. Qualitative Spectral Analysis of Singular q -Sturm–Liouville Operators / B.P. Allahverdiev, H. Tuna // Bulletin of the Malaysian Mathematical Sciences Society. – 2020. – Vol. 43, Iss. 2. – P. 1391–1402.
11. Allahverdiev, B.P. Eigenfunction Expansion in the Singular Case for q -Sturm–Liouville Operators / B.P. Allahverdiev, H. Tuna // Caspian Journal of Mathematical Sciences (CJMS). – 2019. – Vol. 8, Iss. 2. – P. 91–102.
12. Yurko, V. Integral Transforms Connected with Discontinuous Boundary Value Problems / V. Yurko // Integral Transforms and Special Functions. – 2000. – Vol. 10, Iss. 2. – P. 141–164.
13. Gasper, G. Basic Hypergeometric Series / G. Gasper, M. Rahman. – Cambridge; New York: Cambridge University Press, 1990. – 287 p.
14. Kramer, H.P. A Generalized Sampling Theorem / H.P. Kramer // Journal of Mathematics and Physics. – 1959. – Vol. 38, Iss.1-4. – P. 68–72.

Поступила в редакцию 13 октября 2021 г.

Сведения об авторах

Карахан Доне, кафедра математики, факультет естественных наук и литературы, Университет Харран, Шанлыурфа, Турция, e-mail: dkarahan@harran.edu.tr

Мамедов Ханлар Рашид, кафедра математики, факультет естественных наук и литературы, Мерсинский университет, Мерсин, Турция, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-3283-9535>, e-mail: hanlar@mersin.edu.tr

УСЛОВИЯ СУЩЕСТВОВАНИЯ И ЕДИНСТВЕННОСТИ РЕШЕНИЙ ЛИНЕЙНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В КЛАССАХ ПЕРВООБРАЗНЫХ ОТ ЛЕБЕГОВСКИХ ФУНКЦИЙ НА ПРОСТОЙ ГЛАДКОЙ КРИВОЙ

В.Л. Дильман, Д.А. Комиссарова

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

E-mail: dilmanvl@susu.ru, komissarovada@susu.ru

Описываются линейные функциональные уравнения на простых гладких кривых с функцией сдвига, имеющей ненулевую производную, удовлетворяющую условию Гельдера, и неподвижными точками только на концах кривой. Цель статьи – найти условия существования и единственности решения таких уравнений в классах первообразных от лебеговских функций с коэффициентом и правой частью из таких же классов. Эти условия зависят от значений коэффициента уравнения на концах кривой. Показано, что если коэффициент и правая часть функционального уравнения принадлежат классу первообразных от лебеговских функций, то и его решение принадлежит этому классу. У решений определены показатели Гельдера и классов первообразных от лебеговских функций. Метод исследования основан на критерии Ф. Рисса принадлежности функции классу первообразных от интегрируемых по Лебегу функций. Показаны возможности применения линейных функциональных уравнений для изучения и решения сингулярных интегральных уравнений с логарифмическими особенностями.

Ключевые слова: сингулярные интегральные уравнения со сдвигом; линейные функциональные уравнения с одной переменной; классы первообразных от лебеговских функций.

Введение

Начиная с уравнения

$$\int_0^1 \ln|\tau-t| \varphi(\tau) d\tau = f(t),$$

решенного в 1922 г. в замкнутой форме Т. Карлеманом [1], интегральные уравнения первого рода с логарифмическими особенностями постоянно привлекали внимание исследователей теории краевых задач аналитических функций и сингулярных интегральных уравнений. В дальнейшем были получены многочисленные результаты, относящиеся к исследованию и решению различных типов уравнений с логарифмическими особенностями в ядре, исследованию свойств интегральных операторов с логарифмическими особенностями в различных функциональных классах и пространствах (ссылки в [2]). При изучении сингулярных интегральных уравнений с логарифмическими особенностями рассматривались классы или пространства первообразных либо от гильбертовских функций [3, 4], либо от функций из лебеговских пространств [5], а также функций из этих классов, имеющих степенные особенности в отдельных точках.

В работе [2] было предложено и исследовалось в гильбертовских классах функций «модельное» интегральное уравнение первого рода с переменной логарифмической особенностью в ядре вида:

$$A(t) \int_t^b \varphi(\tau) d\tau + B(t) \int_{\Gamma} \varphi(\tau) d\tau \int_a^{\tau} \frac{C(\xi)}{\xi-t} d\xi = f(t). \quad (1)$$

Здесь $\Gamma = [a; b]$ – простая ориентированная кривая на комплексной плоскости с концами a и b (ориентация от a до b ; возможно $a = b$). В работе [6] это уравнение исследовалось в лебеговских классах функций.

В связи с теорией краевых задач и сингулярных интегральных уравнений со сдвигом [7–9] представляет интерес изучение интегральных уравнений с двумя логарифмическими особенностями в ядре, одна из которых получается из другой в результате сдвига. Как обобщение уравне-

ния (1) на случай двух «подвижных» логарифмических особенностей, содержащихся в интегральном уравнении, можно рассмотреть в качестве модельного уравнение

$$A(t) \left(\int_{\alpha_{-1}(t)}^b \varphi(\tau) d\tau - g(t) \int_t^b \varphi(\tau) d\tau \right) + B(t) \int_{\Gamma} \varphi(\tau) d\tau \left(\int_a^{\alpha(\tau)} \frac{p(\xi)}{\xi-t} d\xi - \int_a^{\tau} \frac{g(\xi)p(\xi)}{\xi-t} d\xi \right) = f(t). \quad (2)$$

Это уравнение связано с линейным функциональным уравнением

$$(F_g(\psi))(t) \equiv \psi(\alpha(t)) - g(t)\psi(t) = h(t). \quad (3)$$

Имеется большое количество публикаций, связанных с уравнением (3) и его обобщениями [10]. В [10] исследования проводились в классах непрерывных функций.

В работе исследуются свойства решений уравнения (3). Цель статьи – найти условия существования и единственности решения уравнения (3) в классах A_p первообразных от лебеговских функций, если коэффициент и правая часть также принадлежит A_p . Эти условия зависят от значений коэффициента $g(t)$ уравнения на концах кривой. Показано, что если коэффициент и правая часть уравнения (3) принадлежат A_p , то и решение принадлежит A_p .

Обозначения и вспомогательные утверждения

Класс непрерывных на Γ функций обозначим C^Γ или просто C . Класс функций φ , удовлетворяющий условию Гельдера на Γ :

$$|\varphi(t_1) - \varphi(t_2)| < K|t_1 - t_2|^\mu, \quad t_1, t_2 \in \Gamma, \quad 0 < \mu \leq 1,$$

обозначим $H_\mu^\Gamma(K)$, или сокращенно $H_\mu(K)$ или H_μ ; $\tilde{H}_\mu^\Gamma = \bigcap_{0 < \nu < \mu} H_\nu^\Gamma$. Класс абсолютно интегрируемых на Γ со степенью p функций обозначим L_p^Γ , или сокращенно L_p . Класс первообразных от L_p обозначим A_p ; $\tilde{A}_p^\Gamma = \bigcap_{1 \leq q < p} A_q^\Gamma$, $p > 1$.

Пусть $\alpha = \alpha(t)$, $t \in \Gamma$ – отображение кривой Γ на себя со свойствами:

1. α – взаимно однозначное непрерывное отображение кривой Γ на себя с сохранением принятой на Γ ориентации;
2. На Γ не существует других неподвижных точек (н.т.), кроме a и b ;
3. Для всех $t \in \Gamma$ существует $\alpha'(t) \neq 0$, причем $\alpha' \in H_\theta$ на Γ , $\theta \in (0; 1]$;
4. $|\alpha'(a)| \neq 1$, $|\alpha'(b)| \neq 1$.

Будем применять обозначения: $\alpha_0(t) \equiv t$, $\alpha_1(t) \equiv \alpha(t)$, $\alpha_n(t) \equiv \alpha(\alpha_{n-1}(t))$, $\alpha_{-1}(t)$ – обратное к α отображение, $\alpha_{-n}(t) \equiv \alpha_{-1}(\alpha_{-n+1}(t))$, $n = \overline{1, \infty}$. Очевидно, $\alpha_n(\alpha_{-n}(t)) \equiv \alpha_{-n}(\alpha_n(t)) \equiv t$.

Если для всех $t \in (a; b)$ $\alpha(t) \in (a; t)$, то точку a будем называть *притягивающей неподвижной точкой* (п. н. т.). Если для всех $t \in (a; b)$ $\alpha(t) \in (a; t)$, то точку b будем называть *отталкивающей неподвижной точкой* (о.н.т.). Очевидно, что всегда либо точка a – п. н. т., а точка b – о. н. т., либо наоборот, a – о. н. т., а точка b – п. н. т.

Всюду в работе полагаем, что a – п. н. т., а точка b – о. н. т. В этом случае условие 4 можно заменить на условие

$$4^*. |\alpha'(a)| < 1, \quad |\alpha'(b)| > 1.$$

Заметим, что все утверждения, относящиеся к о. н. т., следуют из соответствующих утверждения для п. н. т.

Пусть $c \in (a; b)$. Введем обозначение: $I_n(c) = [\alpha_n(c); \alpha_{n-1}(c)]$, $n = \overline{1, \infty}$.

Критерий Ф. Рисса принадлежности функции классу $A_p, p > 1$ для действительных функций, заданных на отрезке действительной прямой, имеет место в рассматриваемой ситуации, то есть для комплекснозначных функций на простой гладкой кривой, заданной на комплексной плоскости. Сформулируем его в виде следующей леммы.

Лемма 1. Пусть $\Gamma = [a; b]$ – простая гладкая кривая. Определенная на Γ комплекснозначная функция $\varphi \in A_p, p > 1$, тогда и только тогда, когда для любой последовательности точек на Γ $\{t_j, j = 0, \dots, n : t_0 = a, t_n = b, t_j \in (t_{j-1}; t_{j+1}), j = 1, \dots, n-1\}$

$$\sum_{j=0}^n \frac{|\varphi(t_{j+1}) - \varphi(t_j)|^p}{|t_{j+1} - t_j|^{p-1}} < K,$$

где постоянная K не зависит от $\{t_j, j = 0, \dots, n\}$.

Основные результаты

Введем обозначение

$$G_n(t) = \prod_{j=0}^{n-1} \frac{g(\alpha_j(t))}{g(a)}, \quad G_0(t) \equiv 1, \quad G_{-n}(t) = \prod_{j=1}^n \frac{g(b)}{g(\alpha_{-j}(t))}, \quad n = \overline{1, \infty}. \quad (4)$$

Сначала сформулируем две теоремы, относящиеся к полуоткрытым промежуткам гладких кривых.

Теорема 1. Пусть $h, g \in H_\mu, g(t) \neq 0, t \in [a; b]$. Пусть $|g(a)| > 1$. Тогда существует единственное решение уравнения (3) в классе $C^{[a;b]}$ [10]:

$$\psi(t) = - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{h(\alpha_k(t))}{\prod_{j=0}^k g(\alpha_j(t))} = - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{h(\alpha_k(t))}{g^{k+1}(a) G_{k+1}(t)}. \quad (5)$$

Если $g, h \in A_p^{[a;b]}, p > 1$, то $\psi \in A_p^{[a;b]}$.

Введем обозначения. Пусть точка $c \in (a; b)$ – произвольна; обозначим через $C_{c,g,h}$ класс функций f , непрерывных на $I_0(c) = [\alpha(c); c]$ и удовлетворяющих условию:

$$f(\alpha(c)) - g(c)f(c) = h(c).$$

Пусть K – произвольный класс функций; положим по определению:

$$K_{c,g,h} = C_{c,g,h} \cap K.$$

Теорема 2. Пусть $c \in (a; b)$ – произвольна; $\psi_0 \in C_{c,g,h}$ – произвольна. Пусть $h, g \in H_\mu, g(t) \neq 0, t \in (a; b]$. Пусть $|g(b)| > 1$. Тогда уравнение (3) разрешимо в классе $C^{(a;b]}$. Его общее решение имеет вид:

$$\psi(t) = \begin{cases} \frac{h(b)}{1 - g(b)}, \\ \prod_{j=0}^{n-1} g(\alpha_{j-n}(t)) \psi_0(\alpha_{-n}(t)) + \sum_{k=0}^{n-1} h(\alpha_{k-n}(t)) \prod_{j=k+1}^{n-1} g(\alpha_{j-n}(t)), & t \in I_n(c), \quad n = 2; 3; \dots \\ g(\alpha_{-1}(t)) \psi_0(\alpha_{-1}(t)) + h(\alpha_{-1}(t)), & t \in I_1(c), \\ \psi_0(t), & t \in I_0(c), \\ \prod_{j=1}^{n-1} g^{-1}(\alpha_{j-n}(t)) \psi_0(\alpha_n(t)) - \sum_{k=1}^n h(\alpha_{n-k}(t)) \prod_{j=k}^n g^{-1}(\alpha_{n-j}(t)), & t \in I_{-n}(c), \quad n = 1; 2; \dots \end{cases} \quad (6)$$

Если $\mu < \log_{|\alpha'(a)|} |g(a)|$, то $\psi \in \widetilde{H}_\mu^{(a;b]}$. Если $g, h \in A_p^{(a;b]}$, $p > 1$, $\psi_0 \in A_{p_0, c, g, h}^{(a;b]}$, $p_0 > 1$, то $\psi \in \widetilde{A}_{p_b}^{(a;b]}$ для $p_b = \min\{p; p_0; p_b^*\}$, $p_b^* = \left(1 - \log_{|\alpha'(b)|} |g(b)|\right)^{-1}$, если $|g(b)| < |\alpha'(b)|$, и $p_b^* = +\infty$ в остальных случаях.

Следующая теорема является следствием теорем 1 и 2.

Теорема 3. Пусть $h, g \in H_\mu$, $g(t) \neq 0, t \in [a; b]$. Пусть $|g(a)| > 1, |g(b)| > 1$. Тогда существует единственное решение уравнения (3) в классе $C^{[a;b]}(b^0)$. Оно определяется формулами:

$$\psi(a) = \frac{h(a)}{1 - g(a)}, \quad \psi(t) = -\sum_{k=0}^{\infty} \frac{h(\alpha_k(t))}{(g(a))^{k+1} G_{k+1}(t)}, \quad t \in (a; b].$$

Если $\mu < \log_{|\alpha'(a)|} |g(a)|$, то $\psi \in \widetilde{H}_\mu^{[a;b]}$.

Если $g, h \in \widetilde{A}_p^{[a;b]}$, $p > 1$, $\frac{p-1}{p} < \log_{|\alpha'(a)|} |g(a)|$, то $\psi \in \widetilde{A}_p^{[a;b]}$.

Теорема 4. Пусть $h, g \in H_\mu$, $g(x) \neq 0, x \in [a; b]$. Пусть $|g(a)| \geq 1, |g(b)| \leq 1$. Тогда для существования решения уравнения (3) в классе $C^{[a;b]}(b^0)$ необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{h(\alpha_k(t))}{(g(a))^{k+1} G_{k+1}(t)} = 0, \quad t \in (a; b) \quad (7)$$

При выполнении (7) решение уравнения (3) единственно, причем $\psi \in H_\mu^{[a;b]}$. Если $g, h \in A_p^{[a;b]}$, $p > 1$, то $\psi \in A_p^{[a;b]}$.

Замечание. Если $g(a) = 1, |g(b)| > 1$ или $|g(a)| < 1, |g(b)| > 1$, то решение уравнения (3) не единственно. В первом случае решения существуют тогда и только тогда, когда $h(a) = 0$, а общее решение является однопараметрическим семейством функций. Во втором случае уравнение (3) имеет континуум линейно независимых решений в классе непрерывных на $[a; b]$ функций. В работе эти случаи не рассматриваются.

Доказательство теоремы 1

Сформулируем несколько вспомогательных утверждений.

Лемма 2. Пусть $\Gamma = [a; b]$ – гладкая в некоторой окрестности точки a кривая, r – действительное число, такое что

$$|\alpha'(a)| < r < 1.$$

Тогда: существует такая окрестность $V(a)$ точки a на кривой Γ и такое натуральное число N , зависящее только от r , что для любых точек $t_1, t_2 \in V(a)$ и любых целых $m, n \geq N$

$$|\alpha_n(t_1) - \alpha_m(t_2)| < r |\alpha_{n-1}(t_1) - \alpha_{m-1}(t_2)|,$$

существует число K такое, что для любых точек $t \in V(a)$

$$|\alpha_n(t) - a| < K_1 r^n.$$

Следствие. В условиях леммы 2 для $k = 0; 1; 2; \dots$

$$|\alpha_k(t_1) - \alpha_k(t_2)| < r^k |t_1 - t_2|.$$

Лемма 3. Пусть $\Gamma = [ab]$ – гладкая в некоторой окрестности $[ac]$ точки a кривая, функция $g(t) \neq 0$, $g(t) \in H_\mu$, $t \in [ac]$. Тогда последовательность $\{G_n(t), n=1;2;\dots\}$ равномерно сходится на $[a;c]$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} G_n(t) = G_a(t) \neq 0, \infty.$$

В частности, если функция g непрерывна на $[ab]$, то и $G_a(t)$ непрерывна на $[ab]$; $G_a(a) = 1$.

Сформулируем неравенство Гельдера для числовых рядов в форме:

Лемма 4. Пусть $\{a_j, j=0;1;2;\dots\}$ и $\{b_j, j=0;1;2;\dots\}$ – последовательности действительных чисел, $a_j \geq 0$, $b_j \geq 0$, $j=0;1;2;\dots$. Пусть сходятся ряды

$$\sum_{j=0}^{\infty} b_j^{p-1} = G^{p-1}, \quad \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{a_j}{b_j}\right)^p.$$

Тогда сходится ряд $\sum_{j=0}^{\infty} a_j$, причем

$$\left(\sum_{j=0}^{\infty} a_j\right)^p \leq G \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{a_j}{b_j}\right)^p. \quad (8)$$

Доказательство теоремы 1.

Шаг 1. Пусть $c \in (a;b)$, $f \in A_p$ на $[a;c]$, $|f(a)| < 1$. Тогда

$$\prod_{k=0}^j f(\alpha_k(t)) \in A(p, L),$$

где постоянная L не зависит от j .

Доказательство шага 1. Из условия следует, что существуют число r_1 и отрезок $[a;c_1] \subseteq [a;c]$ такие, что для $t \in [a;c_1]$ $|f(t)| < r_1 < 1$. Существует $k_0 \in \{0;1;2;\dots\}$ такое, что для $k \geq k_0$ $f(\alpha_k(t)) \in [a;c_1]$ и, следовательно,

$$|f(\alpha_k(t))| < r_1 < 1, \text{ если } t \in [a;c]. \quad (9)$$

Из условия $f \in A_p$ на $[a;c]$ и леммы 1 следует, что если $\{t_0; \dots; t_n\} \subseteq [a;c]$, $t_0 = a$; $t_n = c$, то

$$\sum_{m=0}^n \frac{|f(t_{m+1}) - f(t_m)|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq M,$$

где M не зависит от выбора $\{t_0; \dots; t_n\}$. Из следствия леммы 2 тогда следует:

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^n \frac{|f(\alpha_k(t_{m+1})) - f(\alpha_k(t_m))|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} &\leq \sum_{m=0}^n \frac{|f(\alpha_k(t_{m+1})) - f(\alpha_k(t_m))|^p}{|\alpha_k(t_{m+1}) - \alpha_k(t_m)|^{p-1}} \frac{|\alpha_k(t_{m+1}) - \alpha_k(t_m)|^{p-1}}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq \\ &\leq r^{k(p-1)} \sum_{m=0}^n \frac{|f(\alpha_k(t_{m+1})) - f(\alpha_k(t_m))|^p}{|\alpha_k(t_{m+1}) - \alpha_k(t_m)|^{p-1}} \leq M r^{k(p-1)}. \end{aligned} \quad (10)$$

Пусть $|f(t)| < M_1$ на $[a;c]$ для некоторого M_1 . Очевидно,

$$\left| \prod_{k=0}^{k_0-1} f(\alpha_k(t)) \right| \leq M_1^{k_0}. \quad (11)$$

Докажем, что для $\prod_{k=0}^j f(\alpha_k(t))$ выполняется условие леммы 1.

$$\sum_{m=0}^n \frac{\left| \prod_{k=0}^j f(\alpha_k(t_{m+1})) - \prod_{k=0}^j f(\alpha_k(t_m)) \right|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq M_1^{k_0} \sum_{m=0}^n \frac{\left| \prod_{k=k_0}^j f(\alpha_k(t_{m+1})) - \prod_{k=k_0}^j f(\alpha_k(t_m)) \right|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq$$

(следует из (11))

$$M_1^{k_0} \sum_{m=0}^n \frac{\left| \sum_{l=l_0}^j (f(\alpha_l(t_{m+1})) - f(\alpha_l(t_m))) \prod_{k=l_0}^{l-1} f(\alpha_k(t_m)) \prod_{k=l+1}^j f(\alpha_k(t_{m+1})) \right|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq$$

(для удобства записи формул считаем, что $\prod_{l_0}^{l_0-1}$, \prod_{j+1}^j равны 1)

$$M_1^{k_0} \sum_{m=0}^n \frac{j^{p-1} \sum_{l=l_0}^j \left| (f(\alpha_l(t_{m+1})) - f(\alpha_l(t_m))) \right|^p r_1^{j-k_0}}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq$$

(здесь использовано (9) и неравенство

$$\left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^p \leq n^{p-1} \sum_{i=1}^n x_i^p, \quad x_i \geq 0 \tag{12}$$

$$M_1^{k_0} \sum_{l=0}^j j^{p-1} r_1^{j-k_0} \frac{\sum_{m=0}^n \left| (f(\alpha_l(t_{m+1})) - f(\alpha_l(t_m))) \right|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq M_1^{k_0} M j^{p-1} r_1^{j-k_0} \sum_{l=0}^j r^{l(p-1)} \leq$$

(здесь использовано неравенство (10))

$$M_1^{k_0} M j^{p-1} r_1^{j-k_0} S, \quad S = \sum_{l=0}^{\infty} r^{l(p-1)}.$$

Пусть $\max \{ j^{p-1} r_1^{j-k_0}, j=1;2;\dots \} = M_2$. Тогда $\prod_{k=0}^j f(\alpha_k(t)) \in A(p, L)$, где $L = M M_1^{k_0} M_2 S$ и

не зависит от j .

Шаг 2. Подготовимся к проверке выполнения критерия Ф. Рисса (лемма 1) для функции (6). Введем обозначение для удобства записи формул:

$$H_j(t) = \frac{1}{g^{j+1}(a) G_{j+1}(t)} = \frac{1}{\prod_{k=0}^j g(\alpha_k(t))}, \quad j=0;1;\dots, \tag{13}$$

где $G_j(t)$ определено формулой (4). Так как $|g^{-1}(a)| < 1$ и $g^{-1}(t) \in A_p$, то, как следствие первого шага,

$$H_j \in A(p, L),$$

причем L не зависит от j . По лемме 3 функция H_j равномерно ограничена по j на $[a; c]$, то есть существует число M_3 такое, что $|H_j(t)| < M_3$ на $[a; c]$ для всех $j=0;1;\dots$. Используя обозначение (13) и формулу (5), запишем:

$$\sum_{m=0}^n \frac{|\psi(t_{m+1}) - \psi(t_m)|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} = \sum_{m=0}^n \frac{\left| \sum_{j=0}^{\infty} (h(\alpha_j(t_{m+1})) H_j(t_{m+1}) - h(\alpha_j(t_m)) H_j(t_m)) \right|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq S_1 + S_2, \tag{14}$$

где

$$S_1 = 2^{1-p} \sum_{m=0}^n \frac{\left| \sum_{j=0}^{\infty} h(\alpha_j(t_{m+1})) (H_j(t_{m+1}) - H_j(t_m)) \right|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq$$

$$\leq 2^{1-p} \sum_{m=0}^n \frac{\left(\sum_{j=0}^{\infty} \left| h(\alpha_j(t_{m+1})) (H_j(t_{m+1}) - H_j(t_m)) \right| \right)^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}}, \quad (15)$$

$$S_2 = 2^{1-p} \sum_{m=0}^n \frac{\left| \sum_{j=0}^{\infty} H_j(t_{m+1}) (h(\alpha_j(t_{m+1})) - h(\alpha_j(t_m))) \right|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq$$

$$\leq 2^{1-p} \sum_{m=0}^n \frac{\left(\sum_{j=0}^{\infty} \left| H_j(t_{m+1}) (h(\alpha_j(t_{m+1})) - h(\alpha_j(t_m))) \right| \right)^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}}, \quad (16)$$

причем неравенство (14) следует из неравенства (12) при $n = 2$, а неравенства (15) и (16) верны, если ряды из модулей в их правых частях сходятся, что будет показано ниже.

Шаг 3. Рассмотрим частный случай, когда $h(a) = 0$.

Оценим слагаемое S_1 . Временно обозначим:

$$u_j = \left| h(\alpha_j(t_m)) (H_j(t_{m+1}) - H_j(t_m)) \right|, \quad v_j = r^{\frac{p-1}{2p}j}. \quad (17)$$

Так как $h(a) = 0$ по предположению и $h \in A_p \subseteq H_{\frac{p-1}{p}}$, то

$$\left| h(\alpha_j(t_m)) \right| \leq \left| h(\alpha_j(t_m)) - h(a) \right| \leq M_4 \left| \alpha_j(t_m) - a \right|^{\frac{p-1}{p}} \quad (18)$$

для некоторой постоянной M_4 . Используя обозначения (17), неравенство $|H_j(t)| < M_3$ для всех $j = 1; 2; 3; \dots$ на $[a; c]$, неравенство (18) и лемму 2, получим:

$$\frac{u_j}{v_j} \leq \frac{2M_3M_4 \left| \alpha_j(t_m) - a \right|^{\frac{p-1}{p}}}{v_j} \leq \frac{2M_3M_4K^{\frac{p-1}{p}} r^{\frac{p-1}{p}j}}{v_j} \leq M_5 r^{\frac{p-1}{2p}j},$$

где $M_5 = 2M_3M_4K^{\frac{p-1}{p}}$, постоянная K введена в лемме 2. Поэтому ряд $\sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{u_j}{v_j} \right)^p$ сходится, что доказывает неравенства (15) и (16). Неравенство (8) леммы 4 в обозначениях (17) имеет вид:

$$\left(\sum_{j=0}^{\infty} u_j \right)^p \leq G \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{u_j}{v_j} \right)^p = G \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left| h(\alpha_j(t_m)) (H_j(t_{m+1}) - H_j(t_m)) \right|^p}{r^{j \left(\frac{p-1}{2} \right)}}. \quad (19)$$

Используя обозначения (17) и неравенство (19), получим:

$$S_1 \leq 2^{1-p} G \sum_{m=0}^n \frac{\sum_{j=0}^{\infty} r^{-j \left(\frac{p-1}{2} \right)} \left| h(\alpha_j(t_m)) (H_j(t_{m+1}) - H_j(t_m)) \right|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq$$

$$2^{1-p} G \sum_{m=0}^n \frac{\sum_{j=0}^{\infty} r^{-j\left(\frac{p-1}{2}\right)} (Kr^i)^{p-1} |H_j(t_{m+1}) - H_j(t_m)|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq$$

$$2^{1-p} GK^{p-1} \sum_{j=0}^{\infty} r^{j\left(\frac{p-1}{2}\right)} \sum_{m=0}^n \frac{|H_j(t_{m+1}) - H_j(t_m)|^p}{|t_{m+1} - t_m|^{p-1}} \leq 2^{1-p} GK^{p-1} L \sum_{j=0}^{\infty} r^{j\left(\frac{p-1}{2}\right)} = K_1$$

Сумма S_1 оценена константой, обозначенной K_1 .

Оценим слагаемое S_2 . В этом случае временно обозначим:

$$u_j = \left| h(\alpha_j(t_{m+1})) - h(\alpha_j(t_m)) \right|, \quad v_j = r^{\frac{p-1}{2}j}.$$

Тогда из леммы 2 и $h \in H_{\frac{p-1}{p}}$ следует:

$$\frac{u_j}{v_j} \leq \frac{M_4 |\alpha_j(t_{m+1}) - \alpha_j(t_m)|^{\frac{p-1}{p}}}{v_j} \leq M_6 r^{\frac{p-1}{2}j}.$$

Применяя неравенство (8) леммы 4, оценим S_2 точно так же, как S_1 . Пусть $S_2 \leq K_2$. Следовательно, для функции ψ , заданной формулой (5),

$$\sum_{j=0}^n \frac{|\psi(t_{j+1}) - \psi(t_j)|^p}{|t_{j+1} - t_j|^{p-1}} < K_1 + K_2,$$

откуда в силу леммы 1 $\psi(t) \in A_p, t \in [a; c]$.

Шаг 4. Пусть теперь не обязательно $h(a) = 0$. Очевидно, уравнение (3) равносильно уравнению

$$\chi(\alpha(t)) - g(t)\chi(t) = h_1(t),$$

где

$$\chi(t) = \psi(t) - \frac{h(a)}{1-g(a)}, \quad h_1(t) = h(t) - \frac{h(a)}{1-g(a)}(1-g(t)).$$

Так как $h_1(a) = 0, \chi(t) \in A_p, t \in [a; c]$, а, следовательно, $\psi(t) \in A_p, t \in [a; c]$, что завершает доказательство теоремы 1.

Приложение к сингулярным интегральным уравнениям

Рассмотрим уравнение (2). Воспользуемся формулой перестановки порядка интегрирования в повторном интеграле [7]:

$$\int_{\Gamma} \varphi(\tau) d\tau \int_a^{\tau} \frac{p(\xi)}{\xi-t} d\xi = \int_{\Gamma} \frac{p(\xi)}{\xi-t} d\xi \int_{\xi}^b \varphi(\tau) d\tau. \quad (20)$$

Здесь $\Gamma = [a; b]$ – простая гладкая кривая, внутренний интеграл в левой части при $t \in (a; \tau)$ и интеграл в правой части существуют в смысле главного значения, а внешний интеграл левой части существует по крайней мере как несобственный. Из формулы (20) следует

Лемма 5. Пусть $\Gamma = [a; b]$ – простая гладкая кривая, $c \in (a; b)$. Пусть функция φ интегрируема по Лебегу на $[c; b]$, причем

$$\psi(t) = \int_t^b \varphi(\tau) d\tau \in H^{[c; b]}, \quad (21)$$

функция $p \in H^{[c;b]}$, а функция α задана на $\Gamma = [a;b]$ и удовлетворяет условиям 1–4. Тогда

$$\int_c^b \varphi(\tau) d\tau \int_{\alpha(c)}^{\alpha(\tau)} \frac{p(\xi)}{\xi-t} d\xi = \int_{\alpha(c)}^b \frac{p(\xi)}{\xi-t} d\xi \int_{\alpha_{-1}(\xi)}^b \varphi(\tau) d\tau, \quad t \in (a;b). \quad (22)$$

Здесь внутренний интеграл в левой части при $t \in (\alpha(c); \alpha(\tau))$ и интеграл в правой части существуют в смысле главного значения.

Переходя в (22) к пределу при $c \rightarrow a$, получаем:

$$\int_{\Gamma} \varphi(\tau) d\tau \int_a^{\alpha(\tau)} \frac{p(\xi)}{\xi-t} d\xi = \int_{\Gamma} \frac{p(\xi)}{\xi-t} d\xi \int_{\alpha_{-1}(\xi)}^b \varphi(\tau) d\tau, \quad t \in (a;b). \quad (23)$$

Из (20) и (23) следует:

$$\int_{\Gamma} \varphi(\tau) d\tau \left(\int_a^{\alpha(\tau)} \frac{p(\xi)}{\xi-t} d\xi - \int_a^{\tau} \frac{g(\xi)p(\xi)}{\xi-t} d\xi \right) = \int_{\Gamma} \frac{p(\xi)}{\xi-t} d\xi \left(\int_{\alpha_{-1}(t)}^b \varphi(\tau) d\tau - g(t) \int_t^b \varphi(\tau) d\tau \right).$$

Тогда (2) приобретает вид:

$$A(t) \left(\int_{\alpha_{-1}(t)}^b \varphi(\tau) d\tau - g(t) \int_t^b \varphi(\tau) d\tau \right) + B(t) \int_{\Gamma} \frac{p(\xi)}{\xi-t} d\xi \left(\int_{\alpha_{-1}(t)}^b \varphi(\tau) d\tau - g(t) \int_t^b \varphi(\tau) d\tau \right) = f(t)$$

или

$$A(t)v(t) + B(t) \int_{\Gamma} \frac{p(\xi)v(\xi)}{\xi-t} d\xi = f(t), \quad (24)$$

где обозначено:

$$\int_{\alpha_{-1}(t)}^b \varphi(\tau) d\tau - g(t) \int_t^b \varphi(\tau) d\tau = v(t),$$

то есть (см. (21))

$$\psi(\alpha_{-1}(t)) - g(t)\psi(t) = v(t). \quad (25)$$

Поэтому для решения уравнения (2) следует решить сингулярное интегральное уравнение (24), полученное решение подставить в правую часть функционального уравнения (25); решение этого уравнения, в соответствии с (21), продифференцировать. Если решение уравнения (24) принадлежит L_p , $p \geq 1$, то решение уравнения (2) также принадлежит L_p .

Литература

1. Carleman, T. Über die Abelsche Integralgleichung mit konstanten Integrationsgrenzen / T. Carleman // *Mathematische Zeitschrift*. – 1922. – Vol. 15, Iss. 1. – P. 111–120.
2. Чибрикова, Л.И. Об интегральных уравнениях с обобщенными логарифмическими и степенными ядрами / Л.И. Чибрикова, Н.Б. Плещинский // *Изв. вузов. Математика*. – 1976. – № 6. – С. 91–104.
3. Мухелишвили, А.И. Сингулярные интегральные уравнения / А.И. Мухелишвили. – М.: Наука, 1968. – 511 с.
4. Гахов, Ф.Д. Краевые задачи / Ф.Д. Гахов. – М.: Наука, 1977. – 640 с.
5. Хведелидзе, Б.В. Метод интегралов типа Коши в разрывных граничных задачах теории голоморфных функций одной комплексной переменной / Б.В. Хведелидзе // *Итоги науки и техн. Сер. Современ. пробл. мат.* – 1975. – Т. 7. – С. 5–162.
6. Дильман, В.Л. О решениях интегрального уравнения с обобщенным логарифмическим ядром в L_p , $p > 1$ / В.Л. Дильман, Л.И. Чибрикова // *Изв. вузов. Математика*. – 1986. – № 4. – С. 26–36.
7. Litvinchuk, G.S. Solvability Theory of Boundary Value Problems and Singular Integral Equations with Shift / G.S. Litvinchuk. – Springer Science +Business Media, 2012. – 378 p.

8. Kravchenko, V.G. Introduction to the Theory of Singular Integral Operators with Shift / V.G. Kravchenko, G.S. Litvinchuk. – Springer Science+Business Media, 2014. – 308 p.

9. Карлович, Ю.И. Теория Нётера сингулярных интегральных операторов со сдвигом / Ю. И. Карлович, В. Г. Кравченко, Г. С. Литвинчук // Изв. вузов. Математика. – 1983. – № 4. – С. 3–27.

10. Kuczma, M. An Introduction to the Theory of Functional Equations and Inequalities, Cauchy's Equation and Jensen's Inequality. Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Katowice, 1985.

Поступила в редакцию 22 октября 2021 г.

Сведения об авторах

Дильман Валерий Лейзерович – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой математического анализа и методики преподавания математики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9197-3497>, e-mail: dilmanvl@susu.ru

Комиссарова Дарья Амировна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра математического анализа и методики преподавания математики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-0590-3981>, e-mail: komissarovada@susu.ru

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 4, pp. 13–23*

DOI: 10.14529/mmph210402

EXISTENCE AND UNIQUENESS CONDITIONS FOR SOLUTIONS OF LINEAR FUNCTIONAL EQUATIONS IN THE CLASSES OF LEBESGUE FUNCTIONS ANTIDERIVATIVES ON A SIMPLE SMOOTH CURVE

V.L. Dilman, D.A. Komissarova

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: dilmanvl@susu.ru, komissarovada@susu.ru

The article describes linear functional equations on simple smooth curves with a shift function and fixed points only at the ends of the curve. The case when the shift function has a nonzero derivative satisfying the Hölder condition is considered. The objective of the article is to find the conditions of the existence and uniqueness of such equations solution in the classes of Lebesgue functions antiderivatives with a coefficient and the right-hand part belonging to the same classes. These conditions depend on the values of the equation coefficient at the ends of the curve. It is shown that if the coefficient and the right-hand side of a functional equation belong to the class of Lebesgue functions antiderivatives, then its solution also belongs to this class. The indicators of Hölder and of classes of Lebesgue functions antiderivatives are determined for the solutions. The research method is based on F. Riesz's criterion of a function's belonging to the class of antiderivatives of Lebesgue integrable functions. The possibilities of applying linear functional equations for studying and solving singular integral equations with logarithmic singularities are shown.

Keywords: singular integral equations with a shift; linear functional equations with a single variable; classes of Lebesgue functions antiderivatives.

References

1. Carleman T. Über die Abelsche Integralgleichung mit Konstanten Integrationsgrenzen. *Mathematische Zeitschrift*, 1922, Vol. 15, Iss. 1, pp. 111–120. DOI: 10.1007/bf01494386

2. Chibrikova L.I., Pleshchinskiĭ N.B. Integral Equations with Generalized Logarithmic and Power Kernels. *Soviet Mathematics (Izvestiya VUZ. Matematika)*, 1976, Vol. 20, no. 6, pp. 80–92.

3. Muskhelishvili A.I. *Singulyarniye integral'niye uravneniya* (Singular Integral Equations). Moscow, Nauka Publ., 1968, 511 p. (in Russ.).

4. Gakhov F.D. *Krayeviyе zadachi* (Boundary Value Problems), Moscow, Nauka Publ., 1977, 640 p. (in Russ.).

5. Khvedelidze B.V. The Method of Cauchy-type Integrals in the Discontinuous Boundary-Value Problems of the Theory of Holomorphic Functions of a Complex Variable. *Journal of Soviet Mathematics*, 1977, Vol. 7, no. 3, pp. 309–415. DOI: 10.1007/BF01091836

6. Dil'man V.L., Chibrikova L.I. Solutions of an Integral Equation with Generalized Logarithmic Kernel in L_p , $p > 1$. *Soviet Mathematics* (Izvestiya VUZ. Matematika), 1986, Vol. 30, no. 4, pp. 33–46.

7. Litvinchuk G.S. *Solvability Theory of Boundary Value Problems and Singular Integral Equations with Shift*. Springer Science +Business Media, 2012, 378 p.

8. Kravchenko V.G., Litvinchuk G.S. *Introduction to the Theory of Singular Integral Operators with Shift*. Springer Science+Business Media, 2014, 308 p.

9. Karlovich Yu.I., Kravchenko V.G., Litvinchuk G.S. Noether's Theory of Singular Integral Operators with Shift. *Soviet Mathematics* (Izvestiya VUZ. Matematika), 1983, Vol. 27, no. 4, pp. 1–34.

10. Kuczma M. *An Introduction to the Theory of Functional Equations and Inequalities, Cauchy's Equation and Jensen's Inequality*. Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Katowice, 1985.

Received October 22, 2021

Information about the authors

Dilman Valeriy Leyzerovich, Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Head of Mathematical Analysis and Methods of Teaching Mathematics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9197-3497>, e-mail: dilmanvl@susu.ru

Komissarova Dar'ya Amirovna, Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Mathematical Analysis and Methods of Teaching Mathematics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-0590-3981>, e-mail: komissarovada@susu.ru

MAKING INVESTMENT DECISIONS IN AN INDUSTRIAL ENTERPRISE UNDER UNCERTAINTY

V.G. Mokhov¹, G.S. Chebotareva²

¹ South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: mokhovvg@susu.ru

² Ural Federal University, Ekaterinburg, Russian Federation

E-mail: g.s.chebotareva@urfu.ru

The article is devoted to the issue of selecting investment projects for the modernization of an industrial enterprise in the conditions of uncertainty. Uncertainty in this work is understood as the lack of data on the likelihood of the implementation of scenarios of alternative investment projects. As a methodological base, a set of generally accepted quantitative criteria for reducing uncertainty is proposed, which is characterized by different attitudes towards the probability of future events (pessimistic, optimistic, neutral, etc.). Additionally, a criterion is selected that combines expert and quantitative assessment of uncertainty. Practical calculations are made according to five criteria for three scenarios of five investment projects of an industrial enterprise. The aim of this work is to assess the difficulty of making unambiguous investment decisions under conditions of uncertainty. As a result, each of the four quantitative criteria has pointed to a different project. The fifth criterion has made it possible to limit the range of choice to two projects. This has confirmed the conclusions that making investment decisions requires the responsible person to use not only quantitative indicators, but also existing experience and intuition. The reliability of the findings has been confirmed by the use of generally accepted models and methods, as well as the practical implementation of the results. It is recommended to use these results in the scientific community when conducting subsequent methodological studies aimed at reducing uncertainty, as well as to business owners and investors when making strategic decisions.

Keywords: alternative; investment decision; investment project; criterion; uncertainty; industrial enterprise; scenario.

Introduction

In the modern world, which is characterized by ultra-fast changes, as well as instability, complexity and ambiguity, the value of the ability to work effectively under conditions of high uncertainty is increasing. Such activity requires a step-by-step study of huge amounts of information and adjustments to work with it as new data becomes available in order to be able to accurately predict the future [1, 2]. The problem of working under conditions of uncertainty is extremely relevant at the level of large industrial enterprises. Especially in situations where it is necessary to quickly solve complex economic problems, incl. selection of investment projects. The existing toolkit is rather heterogeneous and represents a combination of quantitative and expert methods. As a result, testing of such approaches is required to minimize uncertainty in the process of making investment decisions at an industrial enterprise. In the future, this will improve the tools for dealing with uncertainty and speed up the process of making effective economic decisions. This issue is extremely important for both business owners and investors. Consequently, this problem is significant not only from a scientific, but also from a practical point of view.

1. Methodology for the quantitative substantiation of investment decisions in conditions of uncertainty

The determining sign of uncertainty is the lack of sufficient information about the likelihood of future events. In particular, when making investment decisions under conditions of uncertainty, as a rule, there is not enough data on the likelihood of the implementation of investment project scenarios. In this case, the formation of the investor's personal attitude to probability is required based on a number of

criteria. The methodological basis of this work is a set of five such criteria, presented in detail below [2, 3].

Wald's criterion, based on careful decision making, is a pessimistic approach. The highest probability is assigned to the most unfavorable event among all considered projects and their corresponding scenarios, as shown in conditions:

$$\begin{cases} W_i = \min(X_{ij}), i=1\dots n, j=1\dots m \\ W_k = \max(W_i), i=1\dots n \\ X_{optim} = X_k, k \in (1;n) \end{cases}, \quad (1)$$

where W is Wald's criterion; n is the total number of i -th alternatives; j is the state (quantitative value) of the i -th alternative; X_{ij} is studied i -th alternative with state j ; W_i is the minimum value of the state of each i -th alternative; W_k is the maximum value of the alternative state among all the minimums; $X_{optim} = X_k$ is the optimal alternative according to the criterion.

According to the optimistic "maximax" criterion, the highest probability is given to the best event in each alternative in accordance with:

$$\begin{cases} M_i = \max(X_{ij}), i=1\dots n, j=1\dots m \\ M_k = \max(M_i), i=1\dots n \\ X_{optim} = X_k, k \in (1;n) \end{cases}, \quad (2)$$

where M is the "maximax" criterion; M_i is maximum value of the state of each i -th alternative; M_k is the maximum value of the alternative state among all the maximums; $X_{optim} = X_k$ is the optimal alternative according to the criterion.

Laplace's criterion is based on the principle of insufficient justification and assumes that the probabilities of all alternatives should be equal to each other, and the priority is the project with the maximum average effect according to the conditions:

$$\begin{cases} L_i = \frac{\sum_{j=1}^m X_{ij}}{m}, i=1\dots n, j=1\dots m, \\ L_k = \max(L_i), i=1\dots n, \\ X_{optim} = X_k, k \in (1;n), \end{cases} \quad (3)$$

where L is the Laplace criterion; L_i – average result of each i -th alternative; L_k – the maximum value of the alternative state among all averages; $X_{optim} = X_k$ is the optimal alternative according to the criterion.

The Savage criterion transforms the initial data into a "regret matrix" that takes into account the lost effect and gives preference to the project with a minimum loss in (4) and (5):

$$\begin{cases} y_i = \max(X_{ij}), i=1\dots n, j=1\dots m \\ r_{ij} = y_i - X_{ij} \end{cases}, \quad (4)$$

where y_i is the maximum value of the state for each j -th case; r_{ij} – lost effect in the form of the difference between the maximum gain and the actual value for each state.

$$\begin{cases} S_i = \max(r_{ij}), i=1\dots n, j=1\dots m, \\ S_k = \min(S_i), i=1\dots n, \\ X_{optim} = X_k, k \in (1;n), \end{cases}, \quad (5)$$

Математика

where S is the Savage criterion; S_i – the maximum lost payoff of each i -th alternative; S_k – the minimum lost gain among all the maximums; $X_{optim} = X_k$ is the optimal alternative according to the criterion.

The Hurwitz criterion is based on an expert's intuitive assessment of the likelihood of scenarios - the “optimism coefficient” (α). The choice of projects involves the study of only extreme scenarios according to (6) and (7):

$$\begin{cases} X_{i\max} = \max(X_{ij}), i=1\dots n, j=1\dots m \\ X_{i\min} = \min(X_{ij}), i=1\dots n, j=1\dots m \end{cases}, \quad (6)$$

where $X_{i\max}$ is the maximum state value for each i -th alternative; $X_{i\min}$ is the minimum state value for each i -th alternative.

$$\begin{cases} H_i = \alpha \cdot X_{i\max} + (1-\alpha) \cdot X_{i\min}, i=1\dots n, j=1\dots m, \\ H_k = \max(H_i), i=1\dots n, \\ X_{optim} = X_k, k \in (1;n), \end{cases} \quad (7)$$

where H is the Hurwitz criterion; H_i - the value of the gain, taking into account the “optimism coefficient” α for each i -th alternative; H_k – the maximum payout among all alternatives; $X_{optim} = X_k$ is the optimal alternative according to the criterion.

2. Practical choice of investment projects in conditions of uncertainty.

The scenario conditions of investment projects for the modernization of an industrial enterprise are presented in Table 1, and the results of the assessment of the criteria are in Table 2.

Table 1

Alternative projects	Brief description of projects		
	Profit / Loss Scenarios (RUB thousand)		
	Pessimistic	Neutral	Optimistic
Project 1	-1 000	-100	3 000
Project 2	0	10	2 000
Project 3	100	300	1 000
Project 4	-500	0	2 500
Project 5	0	200	1 500

Table 2

Alternative projects	Selection of projects (criteria)	Criterion values for projects
		Criterion value, thousand rubles
Project 1	“Maximax” / Hurwitz	$M_1 = \max(-1000; -100; 3000) = 3000$ At $\alpha = 0,8$ $H_1 = 0,8 \cdot 3000 + 0,2 \cdot (-1000) = 2200$
Project 2	Laplace / Hurwitz	$L_2 = \frac{0+10+2000}{3} = 670$ At $\alpha = 0,3$ $H_2 = 0,3 \cdot 2000 + 0,7 \cdot 0 = 600$
Project 3	Wald	$W_3 = \min(100; 300; 1000) = 100$
Project 4	Savage	$S_4 = \max(600; 300; 500) = 600$
Project 5	–	

Calculations showed that the opinions of the most objective indicators (with the exception of the intuitive Hurwitz criterion) were divided between the first, second, third and fourth projects. When taking into account the expert assessment according to the Hurwitz criterion, the first and second projects become priority. The fifth project was not selected by any of the criteria, although it is among the break-even ones.

Conclusions

1. A method is proposed for solving the urgent problem of selecting investment projects in conditions of complete uncertainty.
2. A comparative analysis of alternative projects and their scenarios was carried out according to five criteria for reducing uncertainty.
3. The obtained results are recommended to be used when developing an approach to reducing uncertainty and making investment decisions at industrial enterprises.

The work was supported by grant of the President of the Russian Federation (MK-4549.2021.2).

References

1. Gitel'man L.D., Isaev A.P., Sandler D.G., Gavrilova T.B., Gamburg A.V., Kozhevnikov M.V., Makarov A.Yu., Ryzhuk O.B., Starikov E.M., Chebotareva G.S. *Professionalny v konkurentsii za budushchee. Operezhayushchee obucheniye dlya liderstva v tsifrovoy industrii (Professionals in competition for the future. Advanced training for leadership in the digital industry)*. Moscow, SOLON-Press Publ., 2021, 304 p. (in Russ.).
2. Abdar M., Pourpanah F., Hussain S., Rezazadegan D., Liu L., Ghavamzadeh M., Fieguth P., Cao X., Khosravi A., Acharya U.R., Makarenkov V., Nahavandi S. A review of uncertainty quantification in deep learning: Techniques, applications and challenges. *Information Fusion*, 2021, Vol. 76, pp. 243–297. DOI: 10.1016/j.inffus.2021.05.008
3. Chebotareva G.S. *Otraslevoy risk-menedzhment (Industrial risk management)*, Moscow, KNORUS, 2021, 148 p. (in Russ.).

Received October 24, 2021

Information about the authors

Mokhov Veniamin Gennad'evich, Dr. Sc. (Economics), Professor, Professor of the Department of Digital Economy and Information Technologies, Leading Researcher of the Department of Mathematical and Computer Modeling, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: mokhovvg@susu.ru

Chebotareva Galina Sergeevna, PhD (Economics), Associate Professor, Senior Researcher, Department of Management Systems Energy and Industrial Enterprises, Ural Federal University, Yekaterinburg, Russian Federation, e-mail: g.s.chebotareva@urfu.ru

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 4, pp. 24–28*

УДК 330.322.013 + 658.152.12

DOI: 10.14529/mmph210403

ПРИНЯТИЕ ИНВЕСТИЦИОННЫХ РЕШЕНИЙ НА ПРОМЫШЛЕННОМ ПРЕДПРИЯТИИ В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

В.Г. Мохов¹, Г.С. Чеботарева²

¹ Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация
E-mail: mokhovvg@susu.ru

² Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: g.s.chebotareva@urfu.ru

Статья посвящена вопросу отбора инвестиционных проектов модернизации промышленного предприятия в условиях неопределенности. Под неопределенностью в работе понимается отсутствие данных о вероятности реализации сценариев альтернативных инвестиционных проектов. В качестве методической базы предложен набор общепризнанных количественных критериев сни-

жения неопределенности, характеризующихся различным отношением к вероятности будущих событий (пессимистичное, оптимистичное, нейтральное и др.). Дополнительно выбран критерий, сочетающий экспертную и количественную оценку неопределенности. Практические расчеты произведены по пяти критериям для трех сценариев пяти инвестиционных проектов промышленного предприятия. Целью работы является оценка сложности принятия однозначных инвестиционных решений в условиях неопределенности. В результате, каждый из четырех количественных критериев указал на свой проект. Пятый критерий позволил ограничить круг выбора до двух проектов. Это подтвердило выводы о том, что принятие инвестиционных решений требует от ответственного лица использования не только количественных показателей, но и имеющегося опыта и интуиции. Достоверность полученных выводов подтверждена применением общепризнанных моделей и методов, а также практической реализацией полученных результатов. Данные результаты рекомендуется использовать в научном сообществе при проведении последующих методических исследований, направленных на снижение неопределенности, а также собственникам бизнеса и инвесторам при принятии стратегических решений.

Ключевые слова: альтернатива; инвестиционное решение; инвестиционный проект; критерий; неопределенность; промышленное предприятие; сценарий.

Литература

1. Профессионалы в конкуренции за будущее. Опережающее обучение для лидерства в цифровой индустрии / Л.Д. Гительман, А.П. Исаев, Д.Г. Сандлер и др. – М.: СОЛОН-Пресс, 2021. – 304 с.
2. Abdar, M. A review of uncertainty quantification in deep learning: Techniques, applications and challenges / Information Fusion // M. Abdar, F. Pourpanah, S. Hussain *et al.* – 2021. – Vol. 76. – P. 243–297.
3. Чеботарева, Г.С. Отраслевой риск-менеджмент / Г.С. Чеботарева. – М.: КНОРУС, 2021. – 148 с.

Поступила в редакцию 24 октября 2021 г.

Сведения об авторах

Мохов Вениамин Геннадьевич, доктор экономических наук, профессор, профессор кафедры цифровой экономики и информационных технологий, ведущий научный сотрудник кафедры математического и компьютерного моделирования, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: mokhovvg@susu.ru

Чеботарева Галина Сергеевна, кандидат экономических наук, доцент, старший научный сотрудник, кафедра систем управления энергетикой и промышленными предприятиями, Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: g.s.chebotareva@urfu.ru

АЛГОРИТМЫ И ОБРАБОТКА ИНФОРМАЦИИ В ЧИСЛЕННОМ ИССЛЕДОВАНИИ СТОХАСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ БАРЕНБЛАТТА–ЖЕЛТОВА–КОЧИНОЙ

Е.А. Солдатова¹, А.В. Келлер^{1,2}

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

² Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Российская Федерация

E-mail: soldatovaea@susu.ru

Исследуется модель динамики давления фильтрующейся в трещиновато-пористой среде жидкости со случайным внешним воздействием, в ее основе лежит задача Коши–Дирихле для стохастического уравнения Баренблатта–Желтова–Кочиной. Представлен алгоритм численного исследования и обработки информации, предусматривающий получение как вырожденного, так и невырожденного уравнения. В статье дается описание алгоритма численного решения задачи Коши–Дирихле для стохастического уравнения Баренблатта–Желтова–Кочиной, в основе которого лежит метод Галеркина. Численное исследование стохастической модели предполагает получение и обработку результатов n экспериментов при различных значениях случайной величины, в том числе, относящихся к редким событиям. Основными теоретическими результатами, позволившими провести данное численное исследование, являются методы теории вырожденных групп операторов и теории уравнений соболевского типа. Алгоритмы представлены схемами, позволяющими построить на их основе блок-схемы программ для проведения вычислительных экспериментов.

Ключевые слова: Модель Баренблатта–Желтова–Кочиной; численное исследование; алгоритм; стохастическое уравнение соболевского типа.

Введение

Уравнение Баренблатта–Желтова–Кочиной [1] с последующей редукцией к уравнению соболевского типа при различных условиях исследовалось, например, в [2, 3]. Развитие методов теории уравнений соболевского типа и теории вырожденных (полу)групп, заложенных в [4], позволило начать аналитические исследования стохастических уравнений соболевского типа и стохастической модели Баренблатта–Желтова–Кочиной [5, 6], затем были начаты разработки и численных методов для ее исследования [7].

Для исследования стохастической модели Баренблатта–Желтова–Кочиной введем в рассмотрение вещественные сепарабельные гильбертовы пространства

$A = \left\{ u \in W_2^2(D) : \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ на } \partial D \right\}$, $\mathfrak{F} = W_2(D)$; ограниченную область $D \subset \mathbb{R}^m$ с границей ∂D класса

C^∞ . Будем искать $\eta = \eta(x, t)$, удовлетворяющую в цилиндре $D \times [0, T]$, $T \in \mathbb{R}$, уравнению

$$Ld\eta = M\eta dt + Ndw, \quad (1)$$

условию Дирихле

$$\eta(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \partial D \times [0, T] \quad (2)$$

и условию Коши

$$\eta(x, 0) = \eta_0(x). \quad (3)$$

Здесь операторы $L, M \in \mathcal{L}(U; F)$ такие, что $L = \lambda - \Delta$, $M = \alpha\Delta$, параметр $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, $\lambda \in \mathbb{R}$ характеризуют среду, а через dw обозначен обобщенный дифференциал (\mathcal{U} – значного, ядерного) К–винеровского процесса. Случайный процесс

$$w(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_k} \beta_k(t) \varphi_k, \quad t \in \overline{\mathbb{R}_+}$$

называется K -винеровским процессом, где $\{\lambda_k\}$ – последовательность собственных значений оператора K , занумерованных по невозрастанию с учетом их кратности. Если след оператора K $TrK = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k < +\infty$, то оператор K называется ядерным. Кроме того $\{\beta_k(t)\}, t \in \overline{\mathbb{R}_+}$ – последовательность независимых одномерных винеровских процессов.

Отметим, что исследования стохастических уравнений и стохастических уравнений соболевского типа с использованием (полу)группового подхода и методов производных в среднем ведутся отечественными и зарубежными учеными [8–13]. Кроме того, активно развиваются качественные и количественные исследования задачи восстановления динамически искаженного сигнала при наличии помех «белый шум» [14, 15].

Модель (1)–(3) описывает динамику давления жидкости, фильтрующейся в трещиновато-пористой среде.

В первой части статьи приведем аналитическое решение задачи (1)–(3), во второй части приведем алгоритм ее численного решения модифицированным методом Галеркина, в третьей части приведем алгоритм численного исследования и обработки информации, получаемой в результате различных вычислительных экспериментов.

Аналитическое решение

Аналитическое исследование модели (1)–(3) приведем, следуя результатам в [16]. Прежде всего, отметим условия на параметры λ и α , которые позволяют использовать теорию относительно ограниченных операторов

Лемма 2.1. При любых $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, $\alpha \in \mathbb{R}$. оператор $M(L, 0)$ -ограничен.

В качестве K возьмем оператор Грина однородной задачи Дирихле $\Delta u(x) = 0$, $x \in \partial D$ для уравнения Пуассона $-\Delta u = f$ в области D . В этом случае собственные значения $\{\mu_k\}$ спектральной задачи $-\Delta \phi_k = \mu_k \phi_k$ в области D имеют асимптотику

$$\mu_k \sim k^2, k \rightarrow \infty,$$

в этом случае оператор Грина будет ядерным.

Следуя теории относительно ограниченных операторов и порождаемых ими вырожденных групп [4] отметим, что пространства \mathcal{U} и \mathcal{F} представимы в виде прямых сумм $\mathcal{U}^0 \oplus \mathcal{U}^1 = \mathcal{U}$ and $\mathcal{F}^0 \oplus \mathcal{F}^1 = \mathcal{F}$, операторы $L_k(M_k)$ есть сужение операторов $L(M)$ на \mathcal{U}^k ($\text{dom} M \cap \mathcal{U}^k$), $k = 0, 1$. Если оператор $M(L, 0)$ -ограничен, то операторы $L_k \in \mathcal{L}(\mathcal{U}^k; \mathcal{F}^k)$, $k = 0, 1$; $M_0 \in Cl(\mathcal{U}^0; \mathcal{F}^0)$, $M_1 \in \mathcal{L}(\mathcal{U}^1; \mathcal{F}^1)$; существуют операторы $L_1^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{F}^1; \mathcal{U}^1)$ и $M_0^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{F}^0; \mathcal{U}^0)$. Обозначим $H = M_0^{-1} L_0 \in \mathcal{L}(\mathcal{U}^0)$, $S = L_1^{-1} M_1 \in \mathcal{L}(\mathcal{U}^1)$.

Пусть оператор $N \in \mathcal{L}(\mathcal{F}^1)$. Тогда задача (1), (3) распадается на две независимые задачи

$$H d\eta^0 = \eta^0 dt, \eta^0(0) = \eta_0^0, \quad (4)$$

$$d\eta^1 = S \eta dt + L_1^{-1} N dw, \eta^1(0) = \eta_0^1, \quad (5)$$

где случайные процессы $\eta^0 = (I - P)\eta$, $\eta^1 = P\eta$, а случайные величины $\eta_0^k \in L_2(\Omega, \mathcal{U}^k)$, $k = 0, 1$, где Ω – полное вероятностное пространство, P – проектор.

Уравнение в (5) имеет единственное, причем п. н. тривиальное, решение, значит, задача (4) разрешима только при нулевом значении η_0^0 , а для разрешимости задачи (1), (3) необходимо, чтобы начальное значение η_0 п. н. принадлежали пространству $L_2(\Omega, \mathcal{U}^1)$. Обратимся к задаче (5) и перейдем к стохастическому интегро-дифференциальному уравнению

$$\eta^1 = \int_0^t S \eta dt + \int_0^t L_1^{-1} N dw.$$

Тогда единственным формальным решением будет случайный процесс

$$\eta^1(t) = U^t \eta_0 + \int_0^t U^{t-s} L_1^{-1} N dw(s)$$

или после преобразований

$$\eta^1(t) = U^t \eta_0 + L_1^{-1} N w(t) + \int_0^t U^{t-s} L_1^{-1} N w(s) ds, \quad (6)$$

где U^t строится аналогично детерминированному случаю [4]:

$$U^t = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} (\mu L - M)^{-1} L e^{\mu t} d\mu.$$

Таким образом, справедлива

Теорема 2.1. Пусть оператор M $(L, 0)$ -ограничен, $w \in L_2^0(\mathbb{R}_+ \times \Omega, \mathfrak{F}^1)$ – \mathfrak{F}^1 -значный Квинеровский процесс, оператор $N \in L(\mathfrak{F}^1)$. Тогда для любого $\eta_0 \in L_2(\Omega, \mathfrak{M}^1)$, независимых с w при каждом фиксированном t существует единственное решение задачи (1), (3) вида (6).

Алгоритм численного решения задачи Коши–Дирихле

Для численного исследования в качестве случайного воздействия будем рассматривать задачу Коши–Дирихле

$$p(r_0, t) = 0, \quad |p(0, t)| < +\infty, \quad p(r, 0) = p_0(r) \quad (7)$$

для уравнения

$$(\lambda - \Delta_r) p_t = \alpha \Delta_r p + w(r, t), \quad (8)$$

где $\Delta_r = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$.

Для нахождения приближенного решения будем использовать представление

$$p(r, t) = p^N(r, t) = \sum_{k=1}^N p_k(t) \varphi_k(r) \quad (9)$$

где N нужно брать таким, чтобы $\mu_N < \lambda$, чтобы учесть эффекты вырожденности уравнения. Если внешние возмущения случайны, то решение задачи (7), (8) будем искать потраекторно.

Прежде всего необходимо сгенерировать случайный процесс, для чего используем генератор случайных чисел, тогда

$$w(r, t) = \sum_{k=1}^N A_k \sin(\omega t) \varphi_k(r) \quad (10)$$

Подставим в уравнение (8) представления для приближенного решения (9), получим

$$\sum_{k=1}^N (\lambda + \mu_k) p_k(t) \varphi_k(r) = -\alpha \sum_{k=1}^N \mu_k p_k(t) \varphi_k(r) + w(r, t), \quad (11)$$

затем умножим уравнение скалярно на собственные функции $\varphi_k(r)$, $k = 1, \dots, N$. В результате получим систему N уравнений

$$\begin{cases} (\lambda + \mu_1) \dot{p}_1(t) = -\alpha \mu_1 p_1(t) + \langle w(r, t), \varphi_1 \rangle \\ \dots \\ (\lambda + \mu_N) \dot{p}_N(t) = -\alpha \mu_N p_N(t) + \langle w(r, t), \varphi_N \rangle \end{cases} \quad (12)$$

В зависимости от значения λ уравнения в (12) могут получаться либо дифференциальными первого порядка, либо алгебраическими.

I. Если $\lambda \notin \sigma(-\Delta)$, то все уравнения (12) будут обыкновенными дифференциальными уравнениями первого порядка. Для решения этой системы относительно $p_k(r)$, $k = 1, \dots, N$ условие Коши умножаем скалярно на собственные функции $\varphi_k(r)$, $k = 1, \dots, N$, найдем N начальных условий. Затем полученная система с найденными начальными условиями решается, таким образом, находятся коэффициенты $p_k(r)$, $k = 1, \dots, N$ в приближенном решении (9)

II. Нам больше интересуют случаи $\lambda \in \sigma(-\Delta)$. Предположим, что $\lambda = \mu_{q_1} = \mu_{q_2} = \dots = \mu_{q_r}$, где r – кратность собственных значений μ_q . Уравнения (12), которые соответствуют им, будут алгебраическими, а остальные обыкновенными дифференциальными уравнениями первого порядка. Отдельно решается система алгебраических уравнений относительно p_{q_j} , $j = 1, \dots, r$ без использования начальных условий, в результате чего получаем тривиальное решение (см п. 1). Затем решается система оставшихся обыкновенных дифференциальных уравнений.

Алгоритм нахождения приближенного решения задачи Коши–Дирихле для стохастического уравнения Баренблатта–Желтова–Кочиной сводится к следующим этапам:

1. Находятся собственные значения и собственные функции для оператора $-\Delta$.
2. Находится значение N из условия $\mu_N < \lambda$.
3. Проверка по заданному параметру λ , к какому случаю относится математическая модель – I или II. Отметим, что в случае I могут применяться различные численные методы, например [8].
4. Вычисление приближенного решения при заданном начальном условии, используя метод Галеркина.

Алгоритм численного исследования и обработки информации

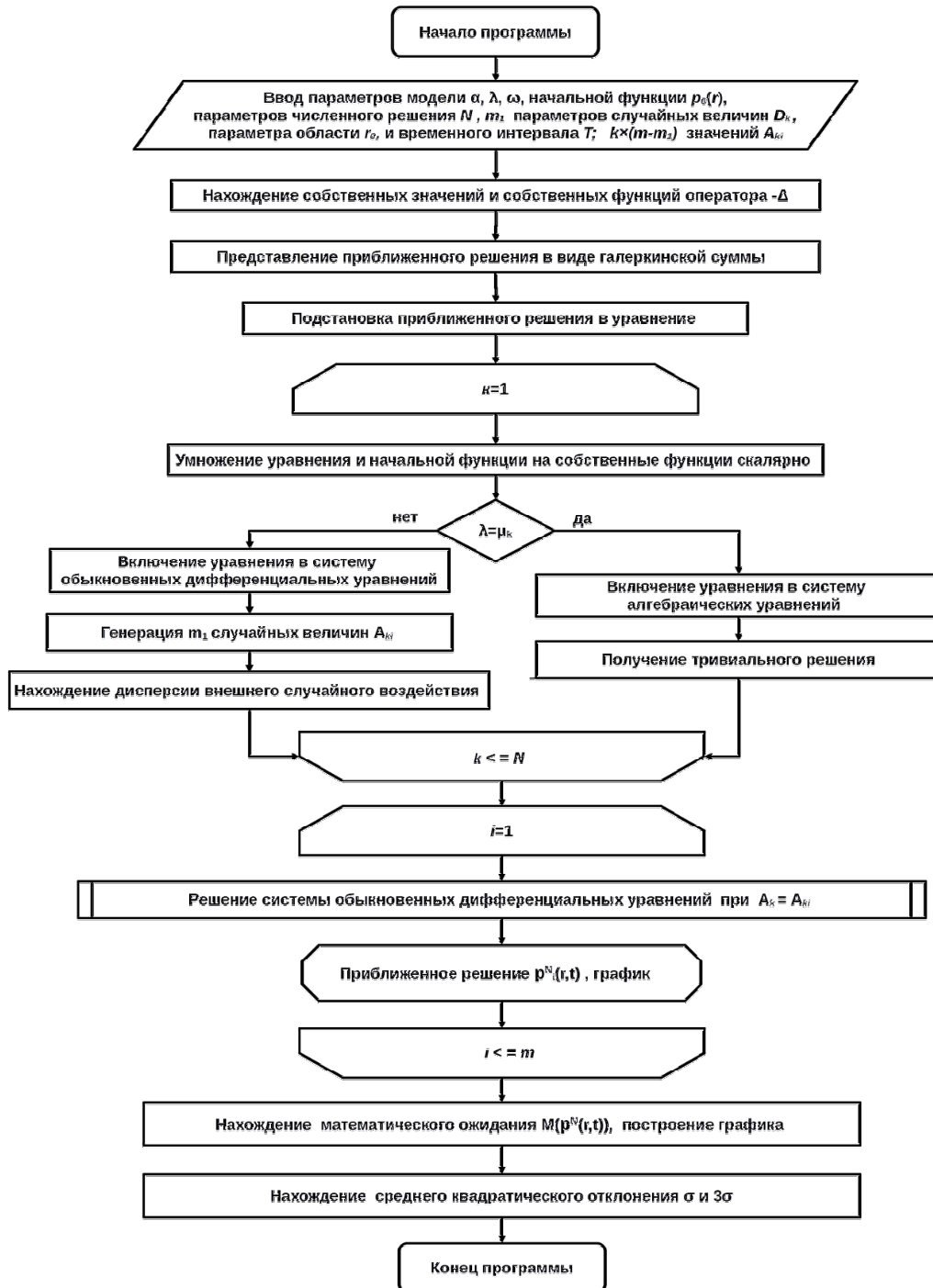
В основе алгоритма численного исследования стохастической модели Баренблатта–Желтова–Кочиной лежит численное решение задачи Коши–Дирихле (7), (8). Исследование стохастической модели предполагает проведение m вычислительных экспериментов, из которых в первой группе (m_1 эксперимент) для моделирования внешнего воздействия используется генератор нормально распределенной случайной величины с заданными параметрами математического ожидания и дисперсии, а во второй группе ($m - m_1$ экспериментов) моделируется внешнее воздействие при значении случайной величины, вероятность которого крайне мала. Для первой группы экспериментов генерируются A_{ki} из (10), где $i = 1, \dots, m_1$ – номер вычислительного эксперимента, для второй группы задаются A_{ki} из (10), где $i = m_1 + 1, \dots, m$, исходя из физических свойств случайного воздействия как редкого события. Для этого задаются математическое ожидание $M(A_{ki}) = 0$, $uD(A_{ki}) = D_k$.

Алгоритм численного исследования стохастической модели Баренблатта–Желтова–Кочиной представлена на рисунке. После генерации случайных величин реализуются первые три этапа численного решения задачи Коши–Дирихле для стохастического уравнения Баренблатта–Желтова–Кочиной (см. п. 2). Для последующей обработки результатов запускается цикл по i , что позволяет в одной программе обработать результаты m экспериментов.

Затем идут вычисления необходимых характеристик случайных процессов. Представление случайного внешнего воздействия как (10) имеет вид канонического разложения случайного процесса. Случайные величины A_k называются коэффициентами разложения, а функции $\psi_k(t) = \sin(\omega t)\varphi_k(r)$ – координатными функциями разложения. В этом случае ковариационная функция и дисперсия имеют вид

$$K(t_1, t_2) = \sum_{k=1}^N D_k \psi_k(t_1) \psi_k(t_2), D(t) = K(t, t), \quad (13)$$

Кроме того, так как все A_k являются гауссовыми с математическим ожиданием $m_k = 0$ и дисперсией D_k , то математическое ожидание внешнего воздействия будет равно нулю, а дисперсия определяться по (13).



Алгоритм численного исследования стохастической модели Баренблатта–Желтова–Кочинной

Математическим ожиданием является неслучайная функция $M(p(r,t))$, которая при любом значении t равна математическому ожиданию соответствующего сечения, т. е. представляет собой усредненную траекторию (реализацию), полученную в результате обработки m_1 экспериментов. Дисперсией и средним квадратическим отклонением будут являться неслучайные функции $D(p(r,t))$ и $\sigma(t)$, которые при любом значении t равны дисперсии и среднему квадратическому отклонению соответствующего сечения случайного процесса. В результате с вероятностью 0,997 $\|p(r,t) - M\tilde{p}(r,t)\| < 3\sigma(t)$.

При проведении второй группы экспериментов целью является моделирование системы, ее реакции на случайное воздействие, относящееся к редким событиям.

Варьирование параметров модели, характеризующих среду, внешнего случайного воздействия позволят на основе вычислительных экспериментов получить совокупность результатов, обработка которых методами системного анализа, позволит сделать качественные выводы о системах, моделируемых уравнением Баренблатта–Желтова–Кочиной.

Литература

1. Баренблатт, Г.И. Об основных представлениях теории фильтрации в трещиноватых средах / Г.И. Баренблатт, Ю.П. Желтов, И.Н. Кочина // Приклад. математика и механика. – 1960. – Т. 24, № 5. – С. 852–864.
2. Свиридюк, Г.А. Уравнения Баренблатта–Желтова–Кочиной на графе / Г.А. Свиридюк, В.В. Шеметова // Вестник Магнитогорского государственного университета. – 2003. – № 4. – С. 129.
3. Умаров, Х.Г. Явный вид решения смешанной задачи в анизотропном полупространстве для уравнения Баренблатта–Желтова–Кочиной / Х.Г. Умаров // Владикавказский математический журнал. – 2013. – Т. 15, вып. 1. – С. 51–64.
4. Свиридюк, Г.А. К общей теории полугрупп операторов / Г.А. Свиридюк // Успехи мат. наук. – 1994. – Т. 49, № 4(298). – С. 47–74.
5. Загребина, С.А. Многоточечная начально-конечная задача для стохастической модели Баренблатта–Желтова–Кочиной / С.А. Загребина // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. – 2013. – Т. 13, № 4. – С. 103–111.
6. Kitaeva, O.G. Exponential Dichotomies in Barenblatt–Zheltev–Kochina Model in Spaces of Differential Forms with «Noise» / O.G. Kitaeva, D.E. Shafranov, G.A. Sviridyuk // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2019. – Т. 12, № 2. – С. 47–57.
7. Kadchenko, S.I. Numerical Research of the Barenblatt–Zheltev–Kochina Stochastic Model / S.I. Kadchenko, E.A. Soldatova, S.A. Zagrebina // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2016. – Т. 9, № 2. – С. 117–123.
8. Favini, A. One Class of Sobolev Type Equations of Higher Order with Additive «White Noise» / A. Favini, G.A. Sviridyuk, A.A. Zamyshlyayeva // Communications on Pure and Applied Analysis. – 2016. – Т. 15, № 1. – С. 185–196.
9. Favini, A. Linear sobolev type equations with relatively p-sectorial operators in space of «noises» / A. Favini, G.A. Sviridyuk, N.A. Manakova // Abstract and Applied Analysis. – 2015. – Vol. 2015. – P. 697410.
10. Favini, A. Linear Sobolev Type Equations with Relatively p-Radial Operators in Space of «Noises» / A. Favini, G.A. Sviridyuk, M. Sagadeeva // Mediterranean Journal of Mathematics. – 2016. – Vol. 13, no. 6. – P. 4607–4621.
11. Favini, A. Multipoint Initial-Final Value Problems for Dynamical Sobolev-Type Equations in the Space of Noises / A. Favini, S.A. Zagrebina, G.A. Sviridyuk // Electronic Journal of Differential Equations. – 2018. – Vol. 2018, no. 128. – P. 1–10.
12. Мельникова, И.В. Уравнения, связанные со случайными процессами: полугрупповой подход и преобразование Фурье / И.В. Мельникова, У.А. Алексеева, В.А. Бовкун // Современная математика. Фундаментальные направления. – 2021. – Т. 67, № 2. – С. 324–348.
13. Гликлих, Ю. Е. Изучение уравнений леонтьевского типа с белым шумом методами производных в среднем случайных процессов / Ю. Е. Гликлих // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 27 (286), вып. 13. – С. 24–34.
14. The Numerical Algorithms for the Measurement of the Deterministic and Stochastic Signals / A.V. Keller, A.L. Shestakov, G.A. Sviridyuk, Y.V. Khudyakov // Semigroups of operators – theory and applications. Springer Proceedings in Mathematics and Statistics. – Springer, Cham, 2015. – С. 183–195.
15. Zamyshlyayeva, A.A. Stochastic Model of Optimal Dynamic Measurements / A.A. Zamyshlyayeva, A.V. Keller, M.B. Syropiatov // Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software. – 2018. – Vol. 11, no. 2. – С. 147–153.
16. Солдатова Е.А. Линейные уравнения соболевского типа с относительно р-ограниченными операторами и аддитивным белым шумом / Е.А. Солдатова, С.А. Загребина // Известия Иркутского государственного университета. Серия: Математика. – 2013. – Т. 6, Вып. 1. – С. 20–34.

Поступила в редакцию 18 октября 2021 г.

Сведения об авторах

Солдатова Екатерина Александровна – старший преподаватель, кафедра математического и компьютерного моделирования, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: soldatovaea@susu.ru

Келлер Алевтина Викторовна – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра прикладной математики и механики, Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Российская Федерация; ведущий научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории «Неклассические уравнения математической физики», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: alevtinak@inbox.ru

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 4, pp. 29–36

DOI: 10.14529/mmph210404

ALGORITHMS AND INFORMATION PROCESSING IN NUMERICAL RESEARCH OF THE BARENBLATT–ZHELTOV–KOCHINA STOCHASTIC MODEL

E. A. Soldatova¹, A. V. Keller^{1,2}

¹ South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

² Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation

E-mail: soldatovaea@susu.ru

The paper investigates a model of pressure dynamics of a liquid filtered in a fractured-porous medium with random external action. It is based on the Cauchy–Dirichlet problem for the Barenblatt–ZheltoV–Kochina stochastic equation. An algorithm for numerical research and information processing is presented, which provides for obtaining both degenerate and non-degenerate equations. The article describes an algorithm for the numerical solution of the Cauchy–Dirichlet problem for the Barenblatt–ZheltoV–Kochina stochastic equation, which is based on the Galerkin method. Numerical study of the stochastic model implies obtaining and processing the results of n experiments at various values of a random variable, including those related to rare events. The main theoretical results that have made it possible to conduct this numerical study are the methods of the theory of degenerate groups of operators and the theory of Sobolev-type equations. Algorithms are represented by schemes that allow to build flowcharts of programs on their basis, for conducting computational experiments.

Keywords: Barenblatt–ZheltoV–Kochina equation; numerical research; algorithm; Sobolev-type stochastic equation.

References

1. Barenblatt, G.I., ZheltoV, Iu.P., Kochina, I.N. Basic Concepts in the Theory of Seepage of Homogeneous Liquids in Fissured Rocks [strata]. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 1960, Vol. 24, Iss. 5, pp. 1286–1303. DOI: 10.1016/0021-8928(60)90107-6
2. Sviridyuk G.A., Shemetova V.V. Barenblatt–ZheltoV–Kochina Equation on the Graph. *Bulletin of the Magnitogorsk State University*, 2003, no. 4, p. 129.
3. Umarov Kh.H. An Explicit Form of the Solution of a Mixed Problem in an Anisotropic Half-Space for the Barenblatt–ZheltoV–Kochina Equation. *Vladikavkaz Mathematical Journal*, 2013, Vol 15, no. 1, pp. 51–64.
4. Sviridyuk G.A. On the General Theory of Operator Semigroups. *Russian Mathematical Surveys*, 1994, Vol. 49, no. 4, pp. 45–74. DOI: 10.1070/RM1994v049n04ABEH002390
5. Zagrebina S.A. Multipoint Initial-Final Problem for the Barenblatt–ZheltoV–Kochina Stochastic model. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Computer Technologies, Automatic Control, Radio Electronics"*, 2013, Vol. 13, no. 4, pp. 103–111.
6. Kitaeva O.G., Shafranov D.E., Sviridyuk G.A. Exponential Dichotomies in Barenblatt–ZheltoV–Kochina Model in Spaces of Differential Forms with "Noise". *Bulletin of the South Ural State Univer-*

city. *Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software (Bulletin SUSU MMCS)*, 2019, Vol. 12, no. 2, pp. 47–57. DOI: 10.14529/mmp190204

7. Kadchenko S.I., Soldatova E.A., Zagrebina S.A. Numerical Research of the Barenblatt–Zheltoy–Kochina Stochastic Model. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software (Bulletin SUSU MMCS)*, 2016, Vol. 19, no. 2, pp. 117–123. DOI: 10.14529/mmp160211

8. Favini A., Sviridyuk G.A., Zamyshlyayeva A.A. One Class of Sobolev Type Equations of Higher Order with Additive “White Noise”. *Communications on Pure and Applied Analysis*, 2016, Vol. 15, no. 1, pp. 185–196. DOI: 10.3934/cpaa.2016.15.185

9. Favini A., Sviridyuk G.A., Manakova N.A. Linear Sobolev Type Equations with Relatively p-Sectorial Operators in Space of “Noises”. *Abstract and Applied Analysis*, 2015, Vol. 2015, no. 697410. DOI: 10.1155/2015/697410

10. Favini A., Sviridyuk G.A., Sagadeeva M. Linear Sobolev Type Equations with Relatively p-Radial Operators in Space of “Noises”. *Mediterranean Journal of Mathematics*, 2016, Vol. 13, no 6, pp. 4607–4621. DOI: 10.1007/s00009-016-0765-x

11. Favini A., Zagrebina S.A., Sviridyuk G.A. Multipoint Initial-Final Value Problems for Dynamical Sobolev-Type Equations in the Space of Noises. *Electronic Journal of Differential Equations*, 2018, Vol. 2018, no. 128, pp. 1–10.

12. Melnikova I.V., Alekseeva U.A., Bovkun V.A. Equations related to stochastic processes: semi-group approach and Fourier transform, Contemporary Mathematics. *Fundamental Directions*, 2021, Vol. 67, no. 2. pp. 324–348. DOI: 10.22363/2413-3639-2021-67-2-324-348

13. Gliklikh Yu.E. Investigation of Leontieff Type Equations with White Noise by the Methods of Mean Derivatives of Stochastic Processes. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software (Bulletin SUSU MMCS)*, 2012, no. 27 (286), Iss. 13, pp. 24–34.

14. Keller A.V., Shestakov A.L., Sviridyuk G.A., Khudyakov Y.V. The Numerical Algorithms for the Measurement of the Deterministic and Stochastic Signals. *Semigroups of operators – theory and applications. Springer Proceedings in Mathematics and Statistics*, Springer, Cham, 2015, pp. 183–195. DOI: 10.1007/978-3-319-12145-1

15. Zamyshlyayeva A.A., Keller A.V., Syropiatov M.B. Stochastic Model of Optimal Dynamic Measurements. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software (Bulletin SUSU MMCS)*, 2018, Vol. 11, no. 2, pp. 147–153. DOI: 10.14529/mmp180212

16. Zagrebina S.A., Soldatova E.A. The linear Sobolev-type Equations With Relatively p-bounded Operators and Additive White Noise. *The Bulletin of Irkutsk State University. Series Mathematics*, 2013, Vol. 6, no. 1, pp. 20–34.

Received October 18, 2021

Information about the authors

Soldatova Ekaterina Aleksandrovna, Senior Lecturer, Department of Mathematical and Computer Modeling, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: soldatovaea@susu.ru

Keller Alevtina Viktorovna, Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Department of Applied Mathematics and Mechanics, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation; Leading researcher of the Research Laboratory “Non-classical equations of mathematical physics”, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: alevtinak@inbox.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПОВЫШЕНИЯ СКОРОСТИ ПОРШНЯ В УСЛОВИЯХ ЭЛЕКТРОТЕРМОХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К УСТАНОВКЕ СРЕДНЕГО КАЛИБРА

В.В. Буркин, А.С. Дьячковский, А.Н. Ищенко, В.З. Касимов, Н.М. Саморокова, А.Д. Сидоров, Е.Ю. Степанов

*Научно-исследовательский институт прикладной математики и механики, Томский государственный университет, г. Томск, Российская Федерация
E-mail: aleksid92@gmail.com*

Представлены результаты теоретического исследования нетрадиционной схемы выстрела с применением электротермохимической технологии воспламенения в условиях установки среднего калибра. Адаптирован закон горения порохов к условиям выстрела с электротермохимической технологией воспламенения порохового заряда применительно к модельной баллистической установке среднего калибра. За основу приняты расчетные данные, полученные на лабораторной баллистической гладкоствольной установке малого калибра. Проведены теоретические параметрические исследования, направленные на определение возможностей выстрела с применением электротермохимической технологии воспламенения комбинированного порохового заряда в широком диапазоне вводимой энергии при разной начальной температуре порохового заряда. Температурный градиент по дульной скорости поршня при начальных температурах порохового заряда -40 и $+20$ °С без дополнительного энерго ввода составил 4 %. Для его компенсации необходимо введение дополнительной энергии 60 кДж в пороховой заряд. Определены условия заряжания исследуемой баллистической установки, позволяющие добиться максимального повышения дульной скорости поршня по сравнению с базовым выстрелом по классической схеме заряжания с применением традиционных воспламенителей. Проведена теоретическая модернизация порохового заряда для достижения большего прироста дульной скорости поршня.

Ключевые слова: внутренняя баллистика; выстрел; электротермохимический; скорость горения; повышение дульной скорости.

Введение

Существует проблема повышения дульной скорости метаемого элемента или поршня, являющаяся одной из основных задач внутренней баллистики. Традиционные способы повышения дульной скорости выстрела по классической схеме заряжания не позволяют добиться значительного результата. В связи с повышением характеристик защищенности бронированных целей поиск путей повышения скорости поршня не утратил своей актуальности и в настоящее время. Для этого требуются исследования нетрадиционных схем метания, позволяющих повысить дульную скорость поршня. Перспективным направлением в области высокоскоростного метания является нетрадиционная схема выстрела с применением электротермохимической (ЭТХ) технологии воспламенения пороха. Она применяется для повышения интенсивности газообразования в камере, что обусловлено высокой температурой электроразрядной плазмы (ЭП), образующейся при высоковольтном разряде. При помощи ЭП удастся существенно сократить длительность периода воспламенения порохового заряда, стабилизировать его характеристики и уменьшить влияние начальной температуры пороха на баллистические параметры выстрела по сравнению с капсюльным инициированием пороха [1].

Целью данной работы является проведение теоретических исследований возможностей выстрела с целью повышения дульной скорости поршня при использовании ЭТХ технологии воспламенения применительно к модельной баллистической установке среднего калибра.

Интерпретация режима повышенного газообразования

Расчетно-теоретический анализ схемы выстрела выполнен с использованием программного комплекса [2], в основе которого лежит математическая модель внутрибаллистических процессов в ствольных системах, базируемая на основных допущениях механики многофазных сред.

Параметры модельной установки: средний калибр (120 мм), масса поршня 7,8 кг. Заряд состоит из зернового семиканального и трубчатого порохов (рис. 1). Плазматрон типа «флейта» [3] расположен внутри насыпной семиканальной части метательного заряда.

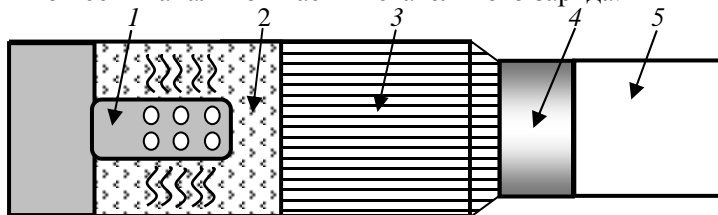
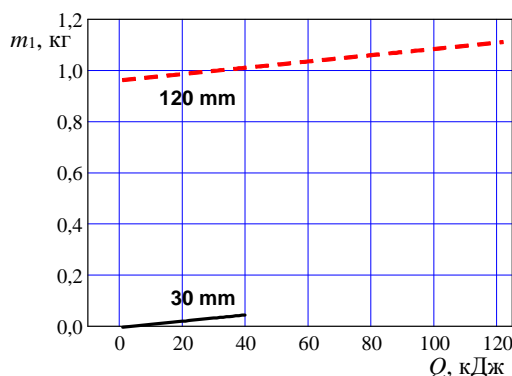


Рис. 1. Схема расположения пороха в камере ЭТХ выстрела:
1 – плазматрон; 2 – семиканальный порошок; 3 – трубчатый порошок; 4 – поршень; 5 – ствол

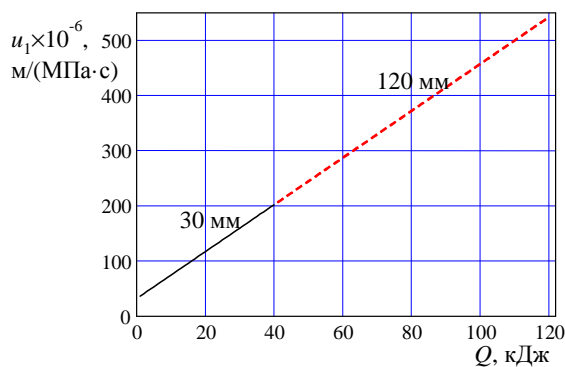
Поскольку программный комплекс [2] позволяет использовать произвольное количество фракций пороха, введение ЭП в порох учтено при помощи введения отдельной фракции – условного быстрогорящего топлива [4]. Это позволяет смоделировать время и характер разряда. Введение ЭП с энергией Q вызывает неравномерное воспламенение и горение пороха. В связи с этим режим повышенного газообразования смоделирован следующим образом. Фракция семиканального пороха, окружающая плазматрон (первая фракция), воспламеняется в момент начала электроввода и горит в режиме ускоренного газообразования. В общем случае увеличение газообразования может быть связано не только с дополнительным прогревом пороха, но и с частичной деструкцией пороховых зерен и увеличением поверхности горения. Образовавшийся газ спустя некоторое время воспламеняет вторую фракцию, которая горит в обычном режиме. Данное предположение согласуется с результатами экспериментов с введением ЭП в полиэтиленовые гранулы в замкнутом объеме, моделирующие зерновой порох в камере сгорания (рис. 2). Результаты показали, что часть гранул, расположенная вблизи «флейты», сгорела, а другая часть лишь обуглилась. Поэтому в расчетах семиканальный порох делится на две фракции с разными параметрами горения: масса, единичная скорость горения и время воспламенения [5].



Рис. 2. Результат введения электроразрядной плазмы в гранулированный полиэтилен



а



б

Рис. 3. Зависимость массы первой фракции (а) и единичной скорости горения (б) от энерговвода

Адаптация режима повышенного газообразования к модельной установке калибром 120 мм проведена на основе расчетных данных, полученных на баллистической установке калибром 30 мм [6]. При смене калибра с 30 на 120 мм предполагается, что в плазмотроне увеличивается количество отверстий и размеры: длина и диаметр, что позволяет воспламенять большее количество пороха на этапе разряда. Это приводит к возрастанию значения массы первой фракции пороха. Зависимости массы первой фракции от уровня введенной энергии для 30 и 120 мм установок имеют линейную форму и расположены параллельно друг к другу на графике (рис. 3, а). Зависимости единичной скорости горения u_1 и времени воспламенения второй фракции t_2 не изменятся, поскольку отличие порохов для 30 и 120 мм выстрелов – только в размере зерна (рис. 3, а и 4). Полученные в [5] зависимости для 30 мм установки экстраполируются в сторону больших значений энергии для 120-мм выстрела.

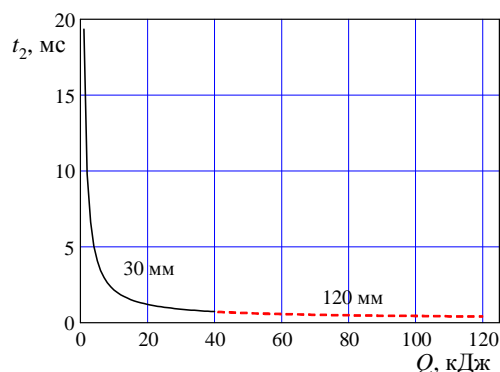


Рис. 4. Зависимость времени воспламенения второй фракции от уровня введенной энергии

Параметрические исследования

На основе полученного режима повышенного газообразования было проведено параметрическое исследование по определению возможностей выстрела с использованием ЭТХ-технологии воспламенения применительно к модельной установке калибром 120 мм, являющейся аналогом Rh120 [7], в широком диапазоне уровня введенной энергии $Q = 20\text{--}120$ кДж. Для определения прироста дульной скорости в качестве базовых точек использованы данные трех выстрелов по классической схеме заряжания с применением традиционных воспламенителей (далее базовый выстрел) при разных начальных температурах: -40 , $+20$ и $+40$ °С.

Расчеты проведены с учетом ряда предположений. Начальная температура заряда равна $+20$ °С. Трение поршня о канал ствола и давление форсирования не зависят от уровня энерговода. Сила f и относительная поверхность горения $\sigma(\psi)$ второй фракции семиканального пороха не зависят от энерговода. Вторая фракция семиканального пороха и трубчатый порох воспламеняются одновременно. Весь пороховой заряд горит по геометрическому закону. Параметры горения трубчатого пороха не зависят от энерговода. Порох полностью сгорает за время выстрела. В условиях ЭТХ-воспламенения рост газоприхода учитывается при помощи увеличения единичной скорости горения первой фракции семиканального пороха.

Согласно полученным результатам, введение 120 кДж (около 1 % от общей потенциальной энергии всего заряда) в семиканальный порох позволяет повысить дульную скорость на 5,2 % (кривая 2, рис. 5) по сравнению с базовым выстрелом. При этом доля первой фракции достигает 65 % от общей массы семиканального пороха. В области высоких значений введенной энергии (100–120 кДж) наблюдается снижение прироста давления газа (кривая 2, рис. 5, б), которое вызвано преждевременным форсированием поршня и увеличением объема заряжания, что приводит к снижению прироста дульной скорости поршня. Точками указаны расчетные данные базового выстрела при разных начальных температурах.

Известно, что изменение начальной температуры пороха влияет на баллистические параметры выстрела: дульную скорость поршня и максимальное давление [8]. Поэтому отдельно рассмотрены разные начальные температуры порохов: -40 и $+40$ °С (рис. 6). Температурный градиент выстрела по дульной скорости поршня при температурах -40 и $+20$ °С без дополнительного энерговода составляет 4 %. Введение 60 кДж в пороховой заряд при начальной температуре $T_0 = -40$ °С позволяет компенсировать температурный градиент по дульной скорости поршня до уров-

Механика

уровня базового выстрела (с применением традиционных воспламенителей) при температуре $+20\text{ }^{\circ}\text{C}$. Введение 120 кДж в пороховой заряд при $T_0 = -40\text{ }^{\circ}\text{C}$ позволяет максимально повысить дульную скорость на 6,5 %, в порох ($+40\text{ }^{\circ}\text{C}$) – на 5 %.

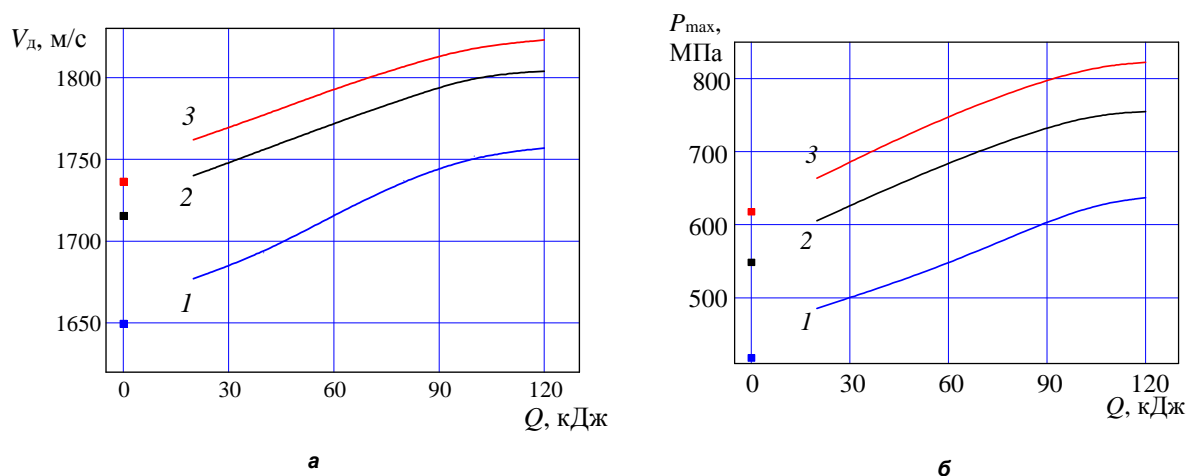


Рис. 5. Зависимость дульной скорости поршня (а) и максимального давления газа (б) от уровня введенной энергии: 1 – $-40\text{ }^{\circ}\text{C}$; 2 – $+20\text{ }^{\circ}\text{C}$; 3 – $+40\text{ }^{\circ}\text{C}$; ■ – данные выстрелов по классической схеме заряжания

Для получения большего прироста дульной скорости поршня за счет использования ЭТХ воспламенителя были рассмотрены пороха с разными толщинами горящего свода при начальной температуре $+20\text{ }^{\circ}\text{C}$ (см. рис. 6). А именно: размер горящего свода семиканального и трубчатого порохов меньше (кривая 3) и больше (кривая 1) на 10 %, чем у стандартных порохов (кривая 2). Порох, имеющий меньший размер, позволил добиться большего прироста дульной скорости. В первом случае введение 120 кДж позволяет повысить дульную скорость на 6,6 %, во втором случае на 3,6 %.

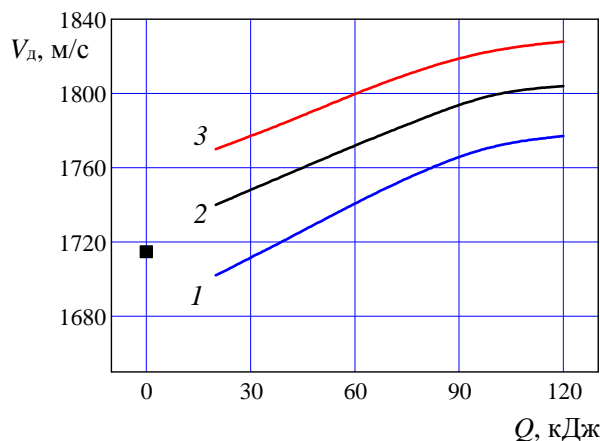


Рис. 6. Зависимость дульной скорости поршня от уровня введенной энергии: 1 – утолщенный (+10 % к размеру); 2 – стандартный; 3 – утонченный (–10 % к размеру) ■ – данные выстрела по классической схеме заряжания

Заключение

В работе представлены результаты теоретического исследования схемы выстрела с применением ЭТХ-технологии воспламенения в условиях модельной установки среднего калибра. Для проведения параметрических исследований режим повышенного газообразования, полученный на баллистической установке калибром 30 мм, был адаптирован к условиям модельной баллистической установки калибром 120 мм. Полученные результаты продемонстрировали положительный эффект применения ЭТХ-технологии воспламенения заряда при разных начальных температурах пороха. Введение 60 кДж пороховой заряд при $T_0 = -40\text{ }^{\circ}\text{C}$ повышает дульную скорость поршня на 4 %. Это позволяет компенсировать температурный градиент выстрела при начальных температурах -40 и $+20\text{ }^{\circ}\text{C}$. Максимальный прирост дульной скорости поршня по сравнению с

базовым выстрелом при температуре $T_0 = -40$ °С получен при введении 120 кДж пороховой заряд и составил 6,5 %. Дальнейшее повышение уровня энерговода в порох вызывает преждевременное форсирование поршня со снижением баллистических параметров выстрела. Показано, что порох с меньшей толщиной горящего свода позволяет добиться большего прироста дульной скорости (на 6,6 %).

Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № 0721-2020-0032.

Литература

1. Michalski, J. Closed Vessel Investigation of Propellant Ignition Process with Using Capillary Plasma Generator / J. Michalski, Z. Leciejewski // Problems of mechatronics armament, aviation, safety engineering. – 2015. – Vol. 6, no. 1 (19). – P. 19–26.

2. Ищенко, А. Математическая модель и программный комплекс для теоретического исследования внутрибаллистических процессов в ствольных системах / А. Ищенко, В. Касимов. – Томск: Издательский дом Томского государственного университета, 2015. – 72 с.

3. Пат. 149459 Российская Федерация МПК В23К 10/00. Инжектор плазмы для инициирования заряда взрывчатого вещества (ВВ) / А.Н. Ищенко, В.В. Буркин, В.А. Бураков и др. – № 2013151732/02; опубл. 10.01.2015. – 13 с.

4. Исследование схемы электротермохимического управления баллистическими параметрами выстрела / А.Д. Сидоров, В.В. Буркин, А.Н. Ищенко и др. // Сборник материалов IX Всероссийской конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики», 21–25 сентября 2016 года, НИИ ПММ ТГУ, г. Томск. – Томск: Томский государственный университет, 2016. – С. 163–165.

5. Анализ горения метательного заряда в условиях электротермохимической технологии метания / В.В. Буркин, А.Н. Ищенко, В.З. Касимов, Н.М. Саморокова, А.Д. Сидоров // Сборник материалов X Всероссийской конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики», 3–5 сентября 2018 года, г. Томск. – Томск: Томский государственный университет, 2018. – С. 30–32.

6. Beyer, R.A. Plasma Ignition in a 30-mm Cannon / R.A. Beyer, A.L. Brant // IEEE transactions on magnetics. – 2007. – Vol. 43, no. 1. – P. 294–298.

7. Dursun, T. Effects of projectile and gun parameters on the dispersion / T. Dursun // Defense Science Journal. – 2020. – Vol. 70, no. 2. – P. 166–174.

8. Boulkadid, M.K. Temperature sensitivity of propellant combustion and temperature coefficients of gun performance / M.K. Boulkadid, M. Lefebvre // Central European Journal of Energetic Materials. – 2016. – Vol 13, no 4. – P. 1005–1022.

Поступила в редакцию 1 июня 2021 г.

Сведения об авторах

Буркин Виктор Владимирович – кандидат физико-математических наук, зав. сектором прикладной электродинамики, научно-исследовательский институт прикладной математики и механики, Томский государственный университет, г. Томск, Российская Федерация.

Дьячковский Алексей Сергеевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, научно-исследовательский институт прикладной математики и механики, Томский государственный университет, г. Томск, Российская Федерация.

Ищенко Александр Николаевич, доктор физико-математических наук, директор научно-исследовательского института прикладной математики и механики Томского государственного университета, г. Томск, Российская Федерация.

Касимов Владимир Зинатович, доктор физико-математических наук, зав. лабораторией прикладной газодинамики, научно-исследовательский институт прикладной математики и механики, Томский государственный университет, г. Томск, Российская Федерация.

Саморокова Нина Михайловна, научный сотрудник, научно-исследовательский институт прикладной математики и механики, Томский государственный университет, г. Томск, Российская Федерация.

Сидоров Алексей Дмитриевич, инженер-исследователь, научно-исследовательский институт прикладной математики и механики, Томский государственный университет, г. Томск, Российская Федерация, e-mail: aleksid92@gmail.com

Степанов Евгений Юрьевич, научный сотрудник, научно-исследовательский институт прикладной математики и механики, Томский государственный университет, г. Томск, Российская Федерация.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 4, pp. 37–43*

DOI: 10.14529/mmph210405

INVESTIGATION OF THE POSSIBILITIES OF INCREASING THE PROJECTILE VELOCITY UNDER THE CONDITIONS OF ELECTROTHERMAL-CHEMICAL IGNITION TECHNOLOGY AS APPLIED TO A MEDIUM-CALIBER INSTALLATION

V.V. Burkin, A.S. D'yachkovskiy, A.N. Ishchenko, V.Z. Kasimov, N.M. Samorokova, A.D. Sidorov, E.Yu. Stepanov

Research Institute of Applied Mathematics and Mechanics of Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

E-mail: aleksid92@gmail.com

This paper presents the results of a theoretical study of an unconventional shot scheme using electrothermal-chemical ignition technology in a medium-caliber installation. The law of combustion of propellants has been adapted to the conditions of a shot with the electrothermal-chemical technology of ignition of a propellant charge as applied to a model ballistic machine of medium caliber. The calculated data obtained on a laboratory ballistic smooth-bore installation of small caliber are taken as a basis. Theoretical parametric studies are carried out aimed at determining the capabilities of a shot using the electrothermal-chemical technology of ignition of a combined powder charge in a wide range of input energy at different initial temperatures of the powder charge. The temperature gradient of the muzzle velocity of the projectile at the initial temperatures of the powder charge of -40 and $+20$ °C without additional energy input has been 4 %. To compensate for it, it is necessary to introduce an additional energy of 60 kJ into the powder charge. The conditions for loading the investigated ballistic installation are determined, which make it possible to achieve a maximum increase in the muzzle velocity of the projectile in comparison with the base shot according to the classical loading scheme using traditional igniters. The theoretical modernization of the powder charge has been carried out to achieve bigger increase in the muzzle velocity of the projectile.

Keywords: interior ballistics; shot, electrothermal-chemical; combustion rate; increasing muzzle velocity.

References

1. Michalski J., Leciejewski Z. Closed Vessel Investigation of Propellant Ignition Process with Using Capillary Plasma Generator. *Problems of mechatronics armament, aviation, safety engineering*, 2015, Vol. 6, no. 1 (19), pp. 19–26.
2. Ishchenko A., Kasimov V. *Matematicheskaya model' i programmnnyy kompleks dlya teoreticheskogo issledovaniya vnutriballisticheskikh protsessov v stvol'nykh sistemakh* (A mathematical model and a software package for a theoretical study of intraballistic processes in barrel systems). Tomsk, Izdatel'skiy dom Tomskogo gosudarstvennogo universiteta Publ., 2015, 72 p. (in Russ.).
3. Ishchenko A.N., Burkin V.V., Burakov V.A., Korol'kov L.V., Stepanov E.Yu., Agafonov S.V. *Inzhektor plazmy dlya initsirovaniya zaryada vzryvchatogo veshchestva (VV)* (Plasma Injector for Initiating an Explosive Charge (Explosive)). Patent RU 149459 U1 Russian Federation, published 10.01.2015, p. 13. (in Russ.).
4. Sidorov A.D., Burkin V.V., Ishchenko A.N., Kasimov V.Z., Samorokova N.M. Issledovanie skhemy elektrottermokhimicheskogo upravleniya ballisticheskimi parametrami vystrela (Study of the scheme of electrothermochemical control of ballistic parameters of a shot). *Sbornik materialov IX Vserossiyskoy konferentsii "Fundamental'nye i prikladnye problemy sovremennoy mekhaniki"*, 21–25 sentyabrya 2016 goda, NII PMM TGU, g. Tomsk (Proc. IX All-Russian Conference "Fundamental and

applied problems of modern mechanics”, September 21–25, 2016, Research Institute of PMM TSU, Tomsk), Tomsk, Tomskiy gosudarstvennyy universitet, 2016, pp. 163–165. (in Russ.).

5. Burkin V.V., Ishchenko A.N., Kasimov V.Z., Samorokova N.M., Sidorov A.D. Analiz goreniya metatel'nogo zaryada v usloviyakh elektrotermokhimicheskoy tekhnologii metaniya (Analysis of the combustion of the propellant charge under the conditions of the electrothermochemical technology of throwing). *Sbornik materialov X Vserossiyskoy konferentsii “Fundamental'nye i prikladnye problemy sovremennoy mekhaniki”*, 3–5 sentyabrya 2018 goda, g. Tomsk (Proc. X All-Russian Conference “Fundamental and applied problems of modern mechanics”, September 3–5, 2018, Research Institute of PMM TSU, Tomsk), Tomsk, Tomskiy gosudarstvennyy universitet Publ., 2018, pp. 30–32. (in Russ.).

6. Beyer R.A., Brant A.L. Plasma Ignition in a 30-mm Cannon. *IEEE transactions on magnetics*, 2007, Vol. 43, no. 1, pp. 294–298. DOI:10.1109/TMAG.2006.887689

7. Dursun T. Effects of projectile and gun parameters on the dispersion. *Defense Science Journal*, 2020, Vol. 70, no. 2, pp. 166–174. DOI: 10.14429/dsj.70.14922

8. Boulkadid M.K., Lefebvre M. Temperature sensitivity of propellant combustion and temperature coefficients of gun performance. *Central European Journal of Energetic Materials*, 2016, Vol. 13, no. 4, pp. 1005–1022.

Received June 1, 2021

Information about the authors

Burkin Viktor Vladimirovich, Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Head of the Applied Electrodynamics Sector, Research Institute of Applied Mathematics and Mechanics of Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation.

D'yachkovskiy Aleksey Sergeevich, Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Senior Staff Scientist, Research Institute of Applied Mathematics and Mechanics of Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-8553-6645>

Ishchenko Aleksandr Nikolaevich, Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Head of Research Institute of Applied Mathematics and Mechanics of Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation.

Kasimov Vladimir Zinatovich, Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Research Institute of Applied Mathematics and Mechanics of Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation.

Samorokova Nina Mikhailovna, Staff Scientist, Research Institute of Applied Mathematics and Mechanics of Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation.

Sidorov Aleksey Dmitrievich, research engineer, Research Institute of Applied Mathematics and Mechanics of Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-8054-6390>, e-mail: aleksid92@gmail.com

Stepanov Evgeniy Yur'evich, Staff Scientist, Research Institute of Applied Mathematics and Mechanics of Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation.

ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ С КУБИЧЕСКОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ И ВОЗБУЖДЕНИЕ КОЛЕБАНИЙ В СИСТЕМЕ «СРЕДА–ИСТОЧНИК»

О.Н. Шабловский

Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, г. Гомель,
Республика Беларусь
E-mail: shablovsky-on@yandex.by

Получено новое точное решение волнового уравнения с источником, зависящим от искомой функции и времени. Функция источника имеет полиномиальную (третьей степени) нелинейность, а также два дополнительных аддитивных члена, в которые входят вторая и третья степени искомой функции и явная синусная зависимость от времени. Построенные соотношения описывают именно процесс возбуждения колебаний в системе «среда – нелинейный реономный источник» и поэтому не содержат в себе как частный случай решение волнового уравнения с обычной кубической нелинейностью. Физическая интерпретация результатов работы обусловлена свойствами внешнего периодического воздействия на среду. Решение получено на плоскости «искомая функция – время» и дает аналитические выражения частных производных искомой функции по пространственной координате и времени. Это позволяет изучать нестационарные свойства изолиний искомой функции: их скорость и условия, при которых эта скорость является знакопеременной. Важное влияние на поведение изолиний оказывает наклон функции источника в малой окрестности нулевого значения искомой функции. А именно: его знак определяет режим движения (дозвуковой либо сверхзвуковой) изолинии, а его модуль служит масштабом при вычислении безразмерной частоты возбуждающих колебаний. В работе рассмотрены интервалы высоких и низких частот. В каждый момент времени градиентные свойства искомой функции характеризует монотонный профиль, располагающийся в полубесконечной области на плоскости «координата – искомая функция». Указаны условия, при которых происходят периодические по времени кинк-пульсации: в отдельные мгновения исходный монотонный профиль трансформируется в кинк, соответствующий двум состояниям равновесия системы. Изучены нестационарные свойства кривизны монотонных профилей: появление точек перегиба и точек спрямления. Рассмотрены два монотонных профиля: левая и правая ветви, расположенные в полубесконечных областях, соответственно, слева и справа от начала координат. Эти ветви совершают колебательные движения, периодически сближаясь и удаляясь друг от друга. В моменты времени, когда ветви примыкают к началу координат, они образуют неподвижный разрыв, который является слабым или сильным, если наклоны ветвей соответственно разных знаков либо одного знака. Обнаружено, что в ходе такого колебательного процесса в интервале высоких частот возможен трансзвуковой переход: скорость изолинии меняется от дозвукового значения к сверхзвуковому. Построена конфигурация волнового типа: левая и правая ветви, образующие слабый либо сильный разрыв, совершают периодическое по времени движение вдоль оси координат.

Ключевые слова: волновое уравнение; кубическая нелинейность источника; трансзвуковой переход; подвижная граница; слабый и сильный разрыв.

Введение. Волновые уравнения с линейными и нелинейными источниками (уравнения Клейна–Гордона) являются фундаментальными уравнениями математической физики и позволяют изучать динамические свойства неравновесных состояний теплофизических, физико-химических и биологических систем [1–3]. Область практического применения уравнений Клейна–Гордона в значительной степени расширяется при учете явной зависимости функции источника от времени. Такой нелинейный реономный источник позволяет моделировать влияние

внешней силы и рассматривать физически содержательные режимы воздействия на скорость и направление движения волны. Современное состояние названной проблемы и подробная библиография представлены в работах [4–8]. Отметим, что в этих исследованиях основное внимание было обращено на уравнение синус-Гордона с модификациями, относящимися к различным способам внешнего нестационарного воздействия на среду.

Цель данной статьи – построить и проанализировать точное решение волнового уравнения, для которого функция источника содержит кубическую нелинейность и явную синусную зависимость от времени.

Построение решения. Одномерное волновое уравнение с источником имеет вид

$$\frac{\partial^2 \tau}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \tau}{\partial (x')^2} = k_v, \quad (1)$$

где τ – функция, описывающая некоторое физическое свойство среды; t – время; $x' = x/w$; x – декартова координата; w – скорость распространения малых возмущений; $k_v = k_v(\tau, t)$ – функция источника. Для размерных и безразмерных уравнений пользуемся одинаковой формой записи, применяя масштабы τ_b и t_b :

$$(\tau/\tau_b) \rightarrow \tau, (t/t_b) \rightarrow t, [x/(wt_b)] \rightarrow x', (k_v t_b^2/\tau_b) \rightarrow k_v.$$

Изолиния $\tau(x', t) = \tau_i = \text{const}$ перемещается со скоростью $N = dx'/dt$, которая является дозвуковой/сверхзвуковой, если число Маха $M = dx'/dt = N/w$ меньше/больше единицы. Обозначим

$$u = \partial \tau / \partial x', \quad v = \partial \tau / \partial t, \quad d\tau = u dx' + v dt$$

и вместо (1) запишем систему уравнений

$$(\partial v / \partial t) - (\partial u / \partial x') = k_v, \quad \partial u / \partial t = \partial v / \partial x'.$$

После преобразования независимых переменных $(x', t) \rightarrow (\tau, t)$ получаем [9]:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial \tau} - u \frac{\partial u}{\partial \tau} = k_v, \quad (2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial \tau} = u \frac{\partial v}{\partial \tau}. \quad (3)$$

Здесь $D(\tau, t)/D(x', t) = \partial \tau / \partial x' \neq 0$. Изолиния $\tau = \tau_i$ движется со скоростью $M = -v(\tau_i, t)/u(\tau_i, t)$.

Решение представим в виде

$$u = \tau [a_0 + \tau (a_1 \sin kt + a_2 \cos kt)], \quad (4)$$

$$v = \tau [b_0 + \tau (b_1 \sin kt + b_2 \cos kt)], \quad k \equiv \text{const} > 0. \quad (5)$$

Шесть постоянных коэффициентов $a_n, b_n, \alpha = 0, 1, 2$ связаны, согласно (3), следующими двумя соотношениями:

$$a_0 b_1 = b_0 a_1 - k a_2, \quad a_0 b_2 = b_0 a_2 + k a_1. \quad (6)$$

Остальные формулы, необходимые для замыкания задачи, получаем на основе (2) при построении функции источника, вид которой определяется выражением

$$k_v = Q_1 \tau \pm Q_2 \tau^2 \sin(kt + \beta) + Q_3 \tau^3 (1 + a_3 \sin 2kt). \quad (7)$$

В этом случае

$$b_0^2 = a_0^2 + Q_1, \quad b_1^2 - a_1^2 = b_2^2 - a_2^2 = Q_3/2, \quad (8)$$

$$Q_3 a_3 = 2(b_1 b_2 - a_1 a_2), \quad \text{tg } \beta = C_2/C_1, \quad Q_2^2 = C_1^2 + C_2^2,$$

$$C_1 = 3(b_0 b_1 - a_0 a_1) - k b_2, \quad C_2 = 3(b_0 b_2 - a_0 a_2) + k b_1.$$

Физическое содержание данного решения зависит от выбора коэффициентов Q_1, Q_2, Q_3 . Подробные формулы для Q_2^2, a_3^2 будут указаны в ходе дальнейших вычислений. Величина β , а также выбор знаков «+» и «-» перед Q_2 в (7) относятся к допустимым вариантам начального ($t = 0$) состояния источника. После подстановки b_1, b_2 из (6) в (8) получаем

$$(a_2)_{1,2} = \frac{1}{k} \left[b_0 a_1 \pm \sqrt{a_0^2 \left(a_1^2 + \frac{Q_3}{2} \right)} \right], \quad (9)$$

причем знак перед корнем такой же, как знак произведения $b_0 a_1$. Здесь и в дальнейшем нижние индексы 1, 2 соответствуют знакам «+»/«-» перед корнем. При проведении расчетов учитываем, что

$$a_2^2 - a_1^2 = 4b_0 k a_1 a_2 / (k^2 - Q_1), \quad a_1^2 + a_2^2 = a_0^2 Q_3 / (k^2 + Q_1), \quad (10)$$

В результате находим

$$(a_1^2)_{1,2} = \frac{a_0^2 Q_3}{2(k^2 + Q_1)} \left[1 \pm \sqrt{\frac{4k^2 b_0^2}{4a_0^2 k^2 + (k^2 + Q_1)^2}} \right] > 0. \quad (11)$$

Обращаем внимание на то, что здесь подкоренное выражение положительное и меньше единицы. Выбор знака перед корнем в (11) выполняется при физическом истолковании решения. Из последующих аналитических преобразований будет ясно, что выражения (10) не содержат особенность типа «деление на ноль». Связь $a_0^2 \leftrightarrow Q_2^2$ имеет вид:

$$16k^2 a_0^2 Q_3 = (k^2 + Q_1) Q_2^2 - Q_3 (k^4 + 10k^2 Q_1 + 9Q_1^2). \quad (12)$$

Таким образом, аналитическая структура решения (4), (5) основана на формулах (12), (11), (9), (8) и (6). Следует отметить, что полученное решение не содержит в себе как частный случай варианты, когда $Q_2 = 0$ и/или $a_3 = 0$.

Свойства решения. Возьмем для определенности конечный интервал $\tau \in (0, \tau_m]$, $\tau_m \equiv \text{const} > 0$, для которого $u > 0$, $x' \in (-\infty, x'_m]$. Для $\tau < 0$ рассуждения аналогичные. Принимаем естественное ограничение

$$a_0^2 > (a_1^2 + a_2^2) \tau_m^2, \quad (13)$$

которое говорит о том, что $\text{sgn} u = \text{sgn}(\tau a_0)$.

Обозначим $a_{12}^2 = a_1^2 + a_2^2$, см.(10); $b_{12}^2 = b_1^2 + b_2^2$. Из (8) следует, что $b_{12}^2 = a_{12}^2 + Q_3$. Представим скорость изолинии $\tau = \tau_i$ и ее закон движения следующими выражениями:

$$dx'_i/dt = -[b_0 + b_{12} \tau_i \sin(kt + \beta_2)] / [a_0 + a_{12} \tau_i \sin(kt + \beta_1)], \quad (14)$$

$$a_0 > 0, \quad b_0 < 0, \quad a_{12} > 0, \quad b_{12} > 0,$$

$$x'_i(t) \equiv x'(\tau = \tau_i, t) = -\frac{b_0 t}{a_0} - \frac{1}{a_0} \ln \frac{a_0 + a_{12} \tau_i \sin(kt + \beta_1)}{a_0 + a_{12} \tau_i \sin \beta_1} + \text{const}. \quad (15)$$

Здесь $\text{tg} \beta_1 = a_2/a_1$, $\text{tg} \beta_2 = b_2/b_1$, $\cos(\beta_1 - \beta_2) = b_0 a_{12} / (a_0 b_{12})$, $\beta_1 \neq \beta_2$. Итоговая запись функции (15) не содержит b_{12} . Пусть $x'(\tau = \tau_i, t = 0) = 0$; тогда изолиния $(\tau_i + \Delta\tau) \leq \tau_m$, расположенная выше ($\Delta\tau > 0$), имеет начальную координату $x'(\tau_i + \Delta\tau, t = 0) = c_0 > 0$, где

$$\exp(-a_0 c_0) = \tau_i [a_0 + (\tau_i + \Delta\tau) a_{12} \sin \beta_1] / [(\tau_i + \Delta\tau) (a_0 + \tau_i a_{12} \sin \beta_1)] < 1.$$

Анализ показал, что при всех $t \geq 0$ выполнено неравенство $x'(\tau_i + \Delta\tau, t) > x'(\tau_i, t)$, которое означает, что в каждый момент времени верхняя изолиния расположена справа от нижней вдоль оси x' . Следовательно, данное решение не разрушается во все время движения профиля $u = u(x', t)$.

Если $a_0^2 = \tau_m^2 a_{12}^2$, т. е. $[\tau_m^2 Q_3 / (k^2 + Q_1)] = 1$, то, согласно (14), в те моменты времени $t = t_p$, когда $\sin(kt + \beta_1) = -1$, τ_m – изолиния удаляется на бесконечность ($x'_m \rightarrow \infty$) с неограниченно большой скоростью, и исходный профиль принимает вид кинк-перехода между состояниями равновесия ($\tau = 0, t \geq 0$) и ($\tau = \tau_m, t = t_p$). Такой режим движения можно назвать кинк-пульсациями монотонного профиля $u = u(x', t) > 0$, рис. 1.

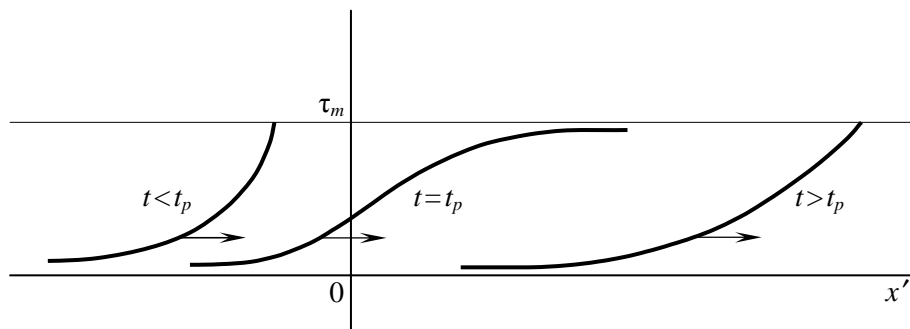


Рис. 1. Кинк-пульсации монотонного профиля.
Стрелка указывает направление движения

Обсудим поведение решения в малой окрестности $\tau = 0$. При $\tau = +0$ получаем из (4), (5) с точностью до членов первого порядка по τ : $\tau = \tau_0 \exp \xi$, $\xi = a_0 x' + b_0 t \leq 0$, $a_0 > 0$, $b_0 < 0$, $x' \leq 0$, $t \geq 0$, $\tau_0 \equiv \text{const}$. Ясно, что эта экспонента (ангармоническое автомодельное решение) удовлетворяет уравнению $d^2 \tau / d \xi^2 = \tau$, которое есть результат линеаризации (1), (7) в окрестности решения $\tau = 0$. Данный вывод относится к положительным и отрицательным значениям $Q_1 = b_0^2 - a_0^2$, где Q_1 – наклон функции источника $k_v = Q_1 \tau$ (см. (7)). Рассмотрим изолинию $\tau = \tau_i = \varepsilon > 0$, где ε – малое положительное число; далее для краткости называем ее ε -изолинией. Для нее квадрат числа Маха равен $M_\varepsilon^2 = 1 + (Q_1/a_0^2) > 0$, поэтому Q_1 характеризует отклонение скорости ε -изолинии от скорости звука. При $Q_1 < 0$ эта скорость дозвуковая, при $Q_1 > 0$ – сверхзвуковая. Проанализируем поведение решения (4), (5), (7) при различных вариантах выбора знаков коэффициентов Q_1 и Q_3 .

Колебания высокой частоты. Допустим, что $Q_1 < 0$, $Q_3 > 0$, $k^2 + Q_1 > 0$. Условие (13) приводит к неравенству

$$0 < \left[Q_3 \tau_m^2 / (k^2 + Q_1) \right] < 1. \quad (16)$$

Для удобства аналитических преобразований введем в рассмотрение вместо Q_2^2 вспомогательный параметр m_1 :

$$Q_2^2 = -16Q_1Q_3 / (1 - m_1^2), \quad 0 < m_1 < 1. \quad (17)$$

Требование выполнения неравенства $b_0^2 = a_0^2 + Q_1 > 0$ дает оценку интервала, в котором меняется частота колебаний источника (7). Обозначаем $\mu^2 = k^2 / (-Q_1)$ и получаем интервал высоких частот

$$1 < \mu_2^2 < \mu^2 < \mu_1^2, \quad (18)$$

$$\mu_1^2 = (3m_1 + 5) / (1 - m_1), \quad \mu_2^2 = (5 - 3m_1) / (1 + m_1). \quad (19)$$

В этом случае имеем $a_0^2 = -Q_1 a_{01}^2$,

$$a_{01}^2 = \frac{(\mu^2 - 1)}{16\mu^2} \left(\frac{16}{1 - m_1^2} - \mu^2 + 9 \right) > 1, \quad (20)$$

и поэтому $a_1^2 + a_2^2$ в (10) не содержит $k^2 + Q_1 = -Q_1(\mu^2 - 1)$.

Порядок расчетов состоит в следующем. Указываем интервал $(0, \tau_m]$, внутри которого расположена область изменения функции $\tau(x', t)$. Задаем произвольно параметр источника $Q_1 < 0$; выбираем значение $m_1 \in (0, 1)$ и подсчитываем μ_1^2 , μ_2^2 в (19); частоту колебаний источника можем варьировать в интервале (18). Для выбранного значения μ^2 подсчитываем $k^2 + Q_1 > 0$, а на

основе оценки (16) задаем параметр источника Q_3 : $0 < Q_3 < [(-Q_1)(\mu^2 - 1)/\tau_m^2]$. Определяем Q_2 из (17). Коэффициент a_3 в (7) характеризует амплитуду внешнего периодического воздействия на среду и коррелирует с частотой колебаний следующим образом:

$$a_3^2 = 1 + \frac{\mu_1^2 \mu_2^2 - \mu^2}{4(\mu^2 - 1)}. \quad (21)$$

При фиксированном m_1 , (см. (19)), зависимость a_3^2 от μ^2 – монотонно убывающая. Вместе с тем верхняя граница значений Q_3 монотонно растет по мере роста $\mu^2 > 1$. Далее вычисляем последовательно a_0^2 , a_1^2 и $(a_2)_{1,2}$ по формулам (12), (11) и (9), а также находим b_0^2 ; здесь в (11) был взят «-» перед корнем. Для подсчета b_1 , b_2 и $\text{tg}\beta$ применяем (6) и (8). Выбор знаков коэффициентов a_0 , a_1 , $(a_2)_{1,2}$, b_0 выполняем при физическом истолковании данного решения.

Итак, константа m_1 влияет опосредованным образом на ширину интервала частоты колебаний (см. (18), (19)) и на параметры Q_2 , Q_3 , a_3 источника (см. (16), (17), (21)). Случай $m_1 = 1 - 0$ оставляем в стороне, потому что он приводит к неограниченно большим значениям Q_2 и a_3 .

Пример расчета. Задаем $\tau_m = 1$, $Q_1 = -1$, $m_1 = 1/2$. Тогда $\mu_1^2 = 13$, $\mu_2^2 = 7/3$; берем $\mu = 2$. Значит, $Q_3 \in (0, 3)$. Берем $Q_3 = 1$ и получаем $Q_2 = 8/\sqrt{3}$, $a_3^2 = 115/36$. Далее находим $a_0^2 = 79/64$, $b_0^2 = 15/64$. Числовые значения остальных констант, входящих в решение, здесь не приводятся: эти вычисления нетрудно воспроизвести.

Обсудим возможность перемены знака скорости изолинии. Основное неравенство (16) запишем в виде $\tau_m^2 = \delta_m^2 (-Q_1)(\mu^2 - 1)/Q_3$, $\delta_m^2 \in (0, 1)$, и тогда $\tau_i^2 = \delta_i^2 \tau_m^2$, $\delta_i^2 \in (0, 1]$. Скорость τ_i -изолинии сохраняет постоянный знак, если $b_0^2 > \tau_i^2 b_{12}^2$. Это условие выполняется для изолиний с номерами δ_i , удовлетворяющими неравенству

$$\delta_i^2 \leq (a_{01}^2 - 1) / \left[\delta_m^2 (a_{01}^2 - 1 + \mu^2) \right]. \quad (22)$$

Здесь знак равенства относится к изолинии, скорость которой обращается в ноль в отдельные моменты времени. Скорость τ_i -изолинии знакопеременная, если

$$(a_{01}^2 - 1) / \left[\delta_m^2 (a_{01}^2 - 1 + \mu^2) \right] < \delta_i^2 \leq 1. \quad (23)$$

Такие δ_i^2 существуют, если δ_m^2 не является слишком малым:

$$(a_{01}^2 - 1) / (a_{01}^2 - 1 + \mu^2) < \delta_m^2 < 1.$$

Поведение кривизны линии $\tau = \tau(x', t)$ ясно из рассмотрения формулы

$$\partial^2 \tau / \partial (x')^2 = u [a_0 + 2\tau a_{12} \sin(kt + \beta_1)]. \quad (24)$$

Это выражение имеет постоянный знак, если $a_0^2 > 4\tau_m^2 a_{12}^2$, т.е. $(\mu^2 - 1) > [4\tau_m^2 Q_3 / (-Q_1)]$. Кривизна обращается в ноль в отдельные моменты времени на изолиниях $\tau = \tau_{if}$, для которых $a_0^2 \leq 4\tau_{if}^2 a_{12}^2$. Знак неравенства соответствует точкам перегиба, знак равенства – точка спрямления, поэтому с учетом оценки (16) получаем

$$\left[\tau_m^2 Q_3 / (-Q_1) \right] < (\mu^2 - 1) \leq \left[4\tau_{if}^2 Q_3 / (-Q_1) \right]. \quad (25)$$

Эти неравенства совместны, если $(\tau_m^2 / 4) < \tau_{if}^2 < \tau_m^2$.

Колебания низкой частоты. Рассмотрим случай $Q_1 < 0$, $Q_3 < 0$, когда $k^2 + Q_1 < 0$. Должны быть выполнены условия $b_0^2 = a_0^2 + Q_1 > 0$ и $[a_1^2 + (Q_3/2)] > 0$, (см. (9)). В формуле (11) для a_1^2

нужно взять «+» перед корнем. Итоговые оценки выглядят так: $(k^2 + Q_1) < Q_3 \tau_m^2 < 0$, $Q_2^2 = m_2^2 Q_1 Q_3$, $9 < m_2^2 < 24$, $a_0^2 = -Q_1 a_{01}^2$, $a_{01}^2 = (1 - \mu^2)(m_2^2 - 9 + \mu^2)/(16\mu^2)$.

Низкие частоты располагаются в интервале

$$0 < \mu^2 < \mu_3^2 < (1/2), \quad \mu_3^2 = \left(-m_2^2 - 6 + \sqrt{m_2^4 + 16m_2^2}\right)/2.$$

В отличие от колебаний высокой частоты здесь a_3^2 – возрастающая функция аргумента μ^2 :

$$a_3^2 = 1 + \frac{m_2^2 - 9 + \mu^2}{4(1 - \mu^2)}. \quad (26)$$

Верхняя граница значений $|Q_3|$ равна $(-Q_1)(1 - \mu^2)/\tau_m^2$ и убывает по мере роста частоты колебаний. Порядок расчетов аналогичен предыдущему.

Пример расчета: $\tau_m = 1$, $Q_1 = -1$, $m_2^2 = 10$, $\mu_3^2 = -8 + \sqrt{65}$, $(-19/20) < Q_3 < 0$; берем $\mu^2 = 1/20$, $Q_3 = -1/10$ и получаем $Q_2^2 = 1$, $a_3^2 = 97/76$.

Условия, при которых скорость изолинии имеет постоянный либо переменный знак, записываются, соответственно, в виде (22) либо (23). Содержание этих соотношений такое: $\tau_m^2 = \delta_m^2 Q_1 (1 - \mu^2)/Q_3$, $\tau_i^2 = \delta_i^2 \tau_m^2$, $\delta_i^2 \in (0, 1]$, $\delta_m^2 \in (0, 1)$. Точки перегиба и точки спрямления изолиний τ_{if} появляются в отдельные моменты времени (см. обсуждение формулы (25)), если

$$\left(\tau_m^2 Q_3 / Q_1\right) < (1 - \mu^2) \leq \left(4\tau_{if}^2 Q_3 / Q_1\right), \quad \left(\tau_m^2 / 4\right) < \tau_{if}^2 < \tau_m^2.$$

Знак кривизны изолинии сохраняется при условии, что $(1 - \mu^2) > (4\tau_m^2 Q_3 / Q_1)$.

При очень малой частоте $\mu^2 = +0$ наблюдается неустойчивость данного решения: $a_0^2 \sim (1/\mu^2) \gg 1$. Ситуация меняется, если принять следующую зависимость коэффициента Q_2 от частоты колебаний: $m_2^2 - 9 = m_{21}^2 \mu^2$, $0 < m_{21}^2 \mu^2 < 15$. Тогда имеем устойчивое решение:

$$Q_2^2 = (9 + m_{21}^2 \mu^2) Q_1 Q_3, \quad a_{01}^2 = (1 - \mu^2)(1 + m_{21}^2)/16, \quad a_3^2 = 1 + \frac{\mu^2(1 + m_{21}^2)}{4(1 - \mu^2)}. \quad (27)$$

Здесь, как и в случае (26), a_3^2 – возрастающая функция аргумента μ^2 . Далее нам понадобится интересный вариант $b_1 = 0$, для которого

$$\begin{aligned} m_2^2 - 9 &= \mu^2 (21\mu^4 + 92\mu^2 + 15) / [(5\mu^2 + 1)(1 - \mu^2)], \\ m_2^2 &\in (9, 24), \quad Q_2^2 = m_2^2 Q_1 Q_3, \quad \mu^2 \in (0, 1/4], \quad b_2 = b_0 a_{12}^2 / (a_0 a_2), \\ a_{01}^2 &= (\mu^4 + 6\mu^2 + 1) / (5\mu^2 + 1), \quad a_{12}^2 = a_0^2 Q_3 / (k^2 + Q_1), \\ a_3^2 &= 1 + \frac{4(\mu^4 + 6\mu^2 + 1)}{(5\mu^2 + 1)(1 - \mu^2)^2}. \end{aligned} \quad (28)$$

Отметим еще, что для рассмотренных режимов колебаний высокой и низкой частоты ($b_0 \neq 0$) отсутствует трансзвуковой переход вида $(M_\varepsilon^2 < 1) \rightarrow (M^2 > 1)$.

Широкий интервал частот. Перейдем к изучению варианта $Q_1 > 0$, $Q_3 > 0$, который отличается от двух предшествующих положительностью параметра Q_1 источника: ε -изолиния движется со сверхзвуковой скоростью. В этом случае $Q_2^2 = m_3^2 Q_1 Q_3$, $k^2 = \mu^2 Q_1$, $\tau_m^2 Q_3 < (k^2 + Q_1)$,

$$a_3^2 = 1 + \frac{m_3^2 - 9 - \mu^2}{4(\mu^2 + 1)}, \quad m_3^2 > 9, \quad (29)$$

и процесс возбуждения колебаний происходит на конечном интервале частот $0 < \mu^2 < (m_3^2 - 9) < \infty$. Здесь a_3^2 – монотонно убывающая функция аргумента μ^2 при фиксированном m_3^2 . Далее имеем: $a_0^2 = Q_1 a_{01}^2$, $a_{01}^2 = (\mu^2 + 1)(m_3^2 - 9 - \mu^2)/(16\mu^2) > 0$; в формуле (11) для a_1^2 нужно взять «+» перед корнем; a_2 определяется выражением (9). В частности, при $\mu^2 = 1$ получаем $a_{01}^2 = (m_3^2 - 10)/8 > 0$, $a_1^2 = a_{01}^2 Q_3/2$,

$$(a_2)_{1,2} = (1 \pm 1) a_{01} [Q_3(1 + a_{01}^2)/2]^{1/2} / \mu.$$

На основе соотношений $\tau_m^2 = \delta_m^2 Q_1 (\mu^2 + 1)/Q_3$, $\tau_i^2 = \delta_i^2 \tau_m^2$, $\delta_m^2 \in (0, 1)$, $\delta_i^2 \in (0, 1]$ находим, что скорость τ_i -изолинии сохраняет постоянный знак при $\delta_i^2 \leq (1 + a_{01}^2)/[\delta_m^2(1 + a_{01}^2 + \mu^2)]$. Перемена знака происходит при $(1 + a_{01}^2)/[\delta_m^2(1 + a_{01}^2 + \mu^2)] < \delta_i^2 \leq 1$. Такое δ_i^2 существует, если $[(1 + a_{01}^2)/(1 + a_{01}^2 + \mu^2)] < \delta_m^2 < 1$. Трансзвуковой переход отсутствует. Условие появления точек перегиба и точек спрямления имеет вид

$$(\tau_m^2 Q_3 / Q_1) < (\mu^2 + 1) \leq (4\tau_{if}^2 Q_3 / Q_1).$$

Комментарий к этим оценкам такой же, как при обсуждении формул (24), (25). В случае малой частоты [$\mu^2 = +0$] данное решение неустойчивое: $a_0^2 \sim (1/\mu^2) \gg 1$.

Физические свойства источника (7) меняются, если считать, что коэффициент Q_2 зависит от частоты возбуждающих колебаний. Возьмем $m_3^2 - 9 = m_{31}^2 \mu^2$, где $m_{31}^2 > 1$ – фиксированный конечный параметр; тогда $Q_2^2 = (9 + m_{31}^2 \mu^2) Q_1 Q_3$, $a_{01}^2 = (\mu^2 + 1)(m_{31}^2 - 1)/16$,

$$a_3^2 = 1 + \frac{\mu^2 (m_{31}^2 - 1)}{4(\mu^2 + 1)}, \quad (30)$$

и решение устойчивое для любого конечного μ^2 . Теперь, в отличие от (29), a_3^2 – монотонно возрастающая функция μ^2 .

При $Q_3 > 0$ допускается случай $Q_1 = 0$, когда ε -изолиния имеет звуковую скорость: качественно новых результатов здесь нет.

Задача с подвижной границей. В качестве физической модели решения (4), (5) рассмотрим процесс в полубесконечной области с неизвестной подвижной границей $x' = x'_w(t) : (\partial\tau/\partial x') > 0$, $x' \in (-\infty, x'_w]$, $\tau \in (0, \tau_w] \subseteq (0, \tau_m]$;

$$x' \rightarrow -\infty, \partial\tau/\partial x' \rightarrow 0, \tau \rightarrow 0; x' = x'_w(t), (\partial\tau/\partial x')_w = g(\tau_w), \quad (31)$$

где $\tau_w = \tau(x_w, t)$. Функция $g(\tau_w) = g_1 \tau_w + g_2 \tau_w^2$ характеризует зависимость градиента искомой функции от самой этой неизвестной функции; здесь g_1, g_2 – положительные постоянные. Такая физическая интерпретация пригодна для всех трех рассмотренных выше вариантов: колебания высокой и низкой частоты, широкий интервал частот. Скорость движения границы равна

$$\begin{aligned} dx'_w/dt &= [(\tau_w d\tau_w/dt) - V_w]/U_w, \\ U_w &= a_0 + \tau_w a_{12} \sin(kt + \beta_1), V_w = b_0 + \tau_w b_{12} \sin(kt + \beta_2), \\ a_0 &> 0, b_0 < 0, a_{12} > 0, b_{12} > 0. \end{aligned}$$

Функцию $\tau_w(t)$ находим из граничного условия (31) с учетом структуры решения (4): $\tau_w = (a_0 - g_1)/[g_2 - a_{12} \sin(kt + \beta_1)]$. Здесь следует принять $0 < g_1 < a_0$, $g_2 > a_{12}$, и тогда $\tau_w(t) \leq \tau_m^1$, где $\tau_m^1 = (a_0 - g_1)/(g_2 - a_{12})$ есть верхняя граница значений функции $\tau_w(t)$. Исходное

допущение $\tau_m^1 \leq \tau_m$ будет выполнено, если $(a_0 + \tau_m a_{12}) < (g_1 + \tau_m g_2)$. Этому неравенству всегда можно удовлетворить подходящим выбором $g_2 > 0$.

Колебания двух монотонных ветвей. Изучим отдельный вариант $b_0 = 0$ (см. (8)). Формулы расчета такие: $a_0^2 = -Q_1 > 0$, $a_1^2 = a_2^2$, $a_{12}^2 = -Q_1 Q_3 / (k^2 + Q_1)$, $b_1 = -b_2 = (-ka_2/a_0)$, $\text{tg } \beta = 1$, $a_3^2 = (\mu^2 + 1)^2 / (\mu^2 - 1)^2$. Здесь $k^2 = -Q_1 \mu^2$, $\tau_m^2 = \delta_m^2 Q_1 (1 - \mu^2) / Q_3$, $\delta_m^2 \in (0, 1)$.

Колебания высокой частоты: $Q_3 > 0$, $Q_1 < 0$, $k^2 + Q_1 > 0$, $\mu^2 > 1$, $Q_2^2 = -m^2 Q_1 Q_3$. Этот случай наблюдается при $m^2 \geq 16$ для двух частот

$$\mu^2 = \left[m^2 - 6 \pm \sqrt{m^2 (m^2 - 16)} \right] / 2. \quad (32)$$

Колебания низкой частоты: $Q_3 < 0$, $Q_1 < 0$, $k^2 + Q_1 < 0$, $Q_2^2 = m^2 Q_1 Q_3$, $m^2 > 9$, $\mu^2 < 1$,

$$\mu^2 = \left[-6 - m^2 + \sqrt{m^2 (m^2 + 16)} \right] / 2.$$

На интервале $\tau \in (0, \tau_m]$ проанализируем режим колебаний двух монотонных ветвей, имеющих разные знаки наклона.

Левая ветвь: $\partial \tau / \partial x' > 0$, $a_0 > 0$, $a_1 > 0$, $a_2 > 0$, $a_{12} > 0$; $x' \in (-\infty, x'_l]$; $x' \rightarrow -\infty$, $\tau \rightarrow (+0)$.
Правая ветвь: $\partial \tau / \partial x' < 0$, $a_0 < 0$, $a_1 < 0$, $a_2 < 0$, $a_{12} < 0$; $x' \in [x_r, \infty)$; $x' \rightarrow +\infty$, $\tau \rightarrow (+0)$. Для обеих ветвей $b_1 < 0$, $b_2 > 0$, $b_{12} < 0$. Модули одноименных коэффициентов слева и справа одинаковые; $\text{tg } \beta_2 = -\text{ctg } \beta_1$; например, далее $\beta_2 = \beta_1 + (\pi/2)$. Скорости τ_m -изолиний на левой (l) и правой (r) ветвях такие:

$$\frac{dx'_l}{dt} = -\frac{dx'_r}{dt} = \frac{dx'_m}{dt} = -b_{12} \tau_m \cos \varphi / [a_0 + a_{12} \tau_m \sin \varphi]_l, \quad \varphi = kt + \beta_1. \quad (33)$$

Тогда закон движения τ_m -изолинии дается формулой

$$x'_m(\varphi) = \left[\frac{b_{12}}{a_{12} k} \ln \frac{a_0 + a_{12} \tau_m}{a_0 + a_{12} \tau_m \sin \varphi} \right]_l, \quad (34)$$

$$x'_l(\varphi) = -x'_r(\varphi) = x'_m(\varphi).$$

Качественная схема расположения монотонных профилей на плоскости (x', τ) представлена на рис. 2. Проанализируем поведение точек (x', τ_m) ; далее для краткости называем их τ_m -точками. В моменты времени, когда $\varphi = 2\pi n_0$ (n_0 – целое положительное число) τ_m -точки на ветвях смещены влево и вправо на одинаковые расстояния от $x' = 0$, и их скорости направлены навстречу друг другу. При $\varphi = (\pi/2) + 2\pi n_0$, $x' = 0$ ветви смыкаются с нулевой скоростью и образуют слабый разрыв: при $\tau = \tau_m$ терпит разрыв первого рода первая производная по координате. При $\varphi = \pi + 2\pi n_0$ ветви расходятся и в последующем τ_m -точки достигают наибольшего удаления от $x' = 0$: $\varphi = (3\pi/2) + 2\pi n_0$, см. (34). Итак, нулевую скорость τ_m -изолиний на левой и правой ветвях имеем дважды в течение одного периода колебаний: в момент смыкания ветвей и в момент наибольшего их удаления друг от друга.

Обсудим пример трансзвукового перехода на τ_m -изолинии при $\varphi = 2\pi n_0$. В этом случае $(dx'_m/dt)^2 = \mu^2 \delta_m^2$, $\delta_m^2 \in (0, 1)$. Для низких частот ($\mu^2 < 1$) трансзвуковой переход отсутствует, а при $\mu^2 > 1$ он существует, если $\mu^2 > (1/\delta_m^2)$. Например, для $\delta_m^2 = 1/2$ это неравенство будет выполнено, если, согласно (32), $m^2 > 25$ (знак «+» перед корнем) либо $16 \leq m^2 < 25$ (знак «-» перед корнем).

Теперь рассмотрим колебания двух монотонных ветвей, имеющих одинаковый знак наклона. Левая ветвь: $\tau \in (0, \tau_m]$, $\partial \tau / \partial x' > 0$, $a_0 > 0$, $a_1 > 0$, $a_2 > 0$, $a_{12} > 0$, $b_1 < 0$, $b_2 > 0$, $b_{12} < 0$; $x' \in (-\infty, x'_l]$; $x' \rightarrow -\infty$, $\tau \rightarrow (+0)$. Правая ветвь: $\tau \in [-\tau_m, 0)$, $\partial \tau / \partial x' > 0$, $a_0 < 0$, $a_1 > 0$, $a_2 > 0$,

$a_{12} > 0, b_1 > 0, b_2 < 0, b_{12} > 0; x' \in [x'_r, \infty); x' \rightarrow \infty, \tau \rightarrow (-0)$. Скорости $(\pm\tau_m)$ -точек противоположны друг другу и вычисляются по формуле

$$\left(\frac{dx'}{dt}\right)_{l,r} = \frac{-(b_{12})_{l,r} (\pm\tau_m) \cos \varphi}{(a_0)_{l,r} + (a_{12})_{l,r} (\pm\tau_m) \sin \varphi}. \quad (35)$$

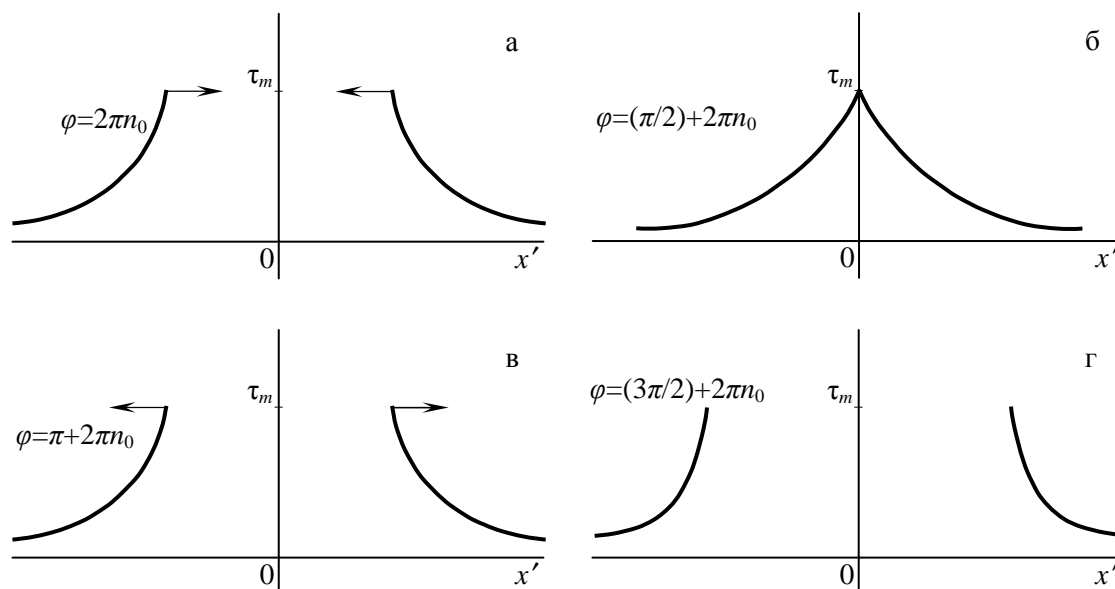


Рис. 2. Колебания двух монотонных ветвей, имеющих разные знаки наклона. Стрелка указывает направление движения

Закон движения $(\pm\tau_m)$ -изолиний дается выражением

$$(x')_{l,r} = \frac{1}{k} \left(\frac{b_{12}}{a_{12}} \right)_{l,r} \ln \frac{(a_0)_{l,r} + (a_{12})_{l,r} (\pm\tau_m)}{(a_0)_{l,r} + (a_{12})_{l,r} (\pm\tau_m) \sin \varphi},$$

$$x'_j(\varphi) = -x'_r(\varphi).$$

Процесс колебаний ветвей аналогичен тому, что наблюдался для профилей с наклонами разных знаков, но теперь при $\varphi = (\pi/2) + 2\pi n_0$ имеем в точке $x' = 0$ неподвижный сильный разрыв: функция $\tau(x', t)$ меняется скачком от $-\tau_m$ до τ_m , рис. 3.

Для вариантов (33) и (35) корреляция «наклон ветви – скорость τ_m -изолинии» представляется в форме

$$M = \pm [\mu^2 F(\zeta)]^{1/2}, \quad (36)$$

$$M = dx'_m/dt, \quad \zeta = u_m/\tau_m, \quad F(\zeta) = \frac{1}{\zeta^2} [a_{12}^2 \tau_m^2 - (\zeta - a_0)^2] \geq 0. \quad (37)$$

Две линии (36) образуют на плоскости (ζ, M) эллипсоидную петлю динамического гистерезиса. Для левой и правой ветвей петли расположены симметрично по отношению к оси $\zeta = 0$. На рис. 4 показан качественный вид такой петли для левой ветви: $\zeta \in [\zeta_1, \zeta_2]$, $\zeta_{1,2} = a_0 \mp \tau_m a_{12}$.

Представляют интерес колебания на интервале $(0, \tau_j]$ с нестационарной границей $\tau_j = \tau_j(t)$, для которой принято условие $(\partial \tau / \partial x')_j = g_2 \tau_j^2$, $g_2 \equiv \text{const}$. Возьмем ветви, имеющие наклоны разных знаков. Левая ветвь: $\partial \tau / \partial x' > 0$, $x' \in (-\infty, x'_{jl}]$, $\tau \in (0, \tau_j]$, $a_0 > 0$, $a_1 > 0$, $a_2 > 0$, $a_{12} > 0$, $b_1 < 0$, $b_2 > 0$, $b_{12} < 0$, $g_2 > 0$. Правая ветвь: $\partial \tau / \partial x' < 0$, $x' \in [x'_{jr}, \infty)$, $\tau \in (0, \tau_j]$, $a_0 < 0$, $a_1 < 0$, $a_2 < 0$, $a_{12} < 0$, $b_1 < 0$, $b_2 > 0$, $b_{12} < 0$, $g_2 < 0$. В данном случае

$$\tau_j = \frac{a_0}{g_2 - a_{12} \sin \varphi}, \quad \frac{dx'_j}{dt} = \frac{1}{g_2} \left(\frac{a_{12}k}{a_0} - b_{12} \right) \cos \varphi, \quad \varphi = kt + \beta_1, \quad (38)$$

$$x'_j = \frac{1}{g_2 k} \left(\frac{a_{12}k}{a_0} - b_{12} \right) (\sin \varphi - 1), \quad (39)$$

$$\tau_{jl} = \tau_{jr}, \quad (dx'_j/dt)_l = -(dx'_j/dt)_r, \quad (x'_j)_l = -(x'_j)_r.$$

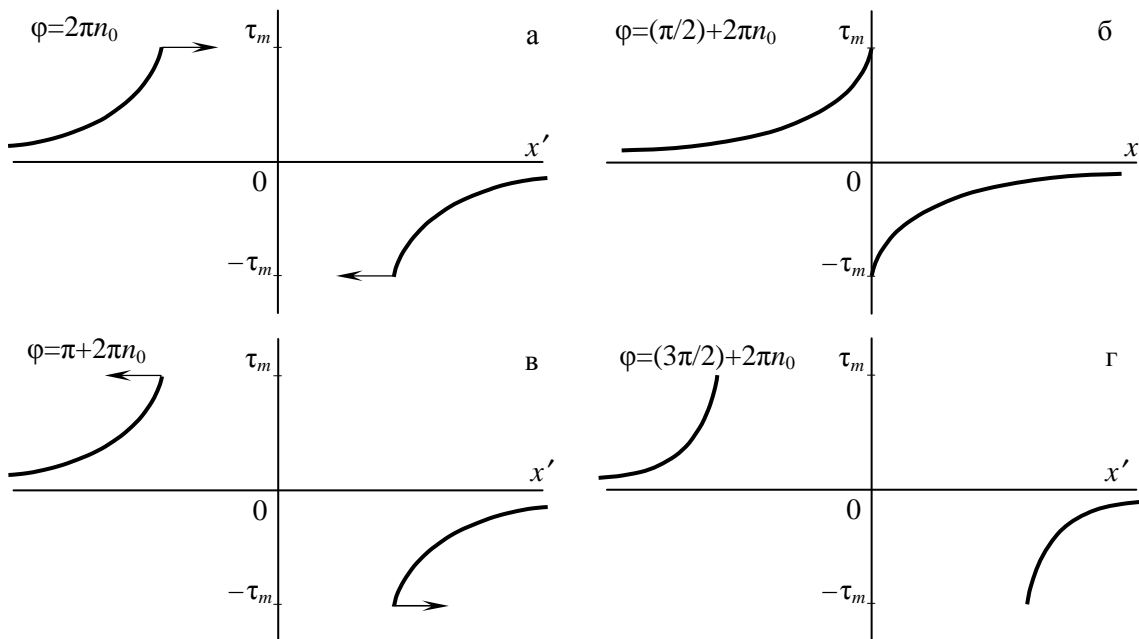


Рис. 3. Колебания двух монотонных ветвей, имеющих одинаковые знаки наклона. Стрелка указывает направление движения

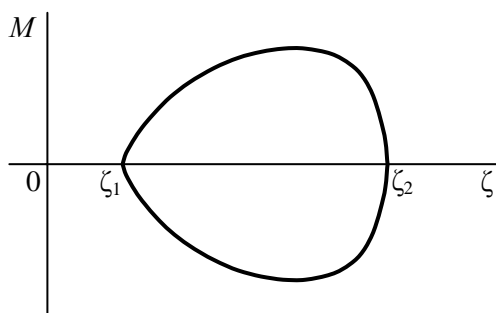


Рис. 4. Петля динамического гистерезиса на плоскости «наклон ветви – скорость τ_m -изолинии»

Здесь следует принять $g_2 = 2a_{12}\Delta_j$, $\Delta_j > 1$. Условие $a_0^2 > a_{12}^2 \tau_j^2$ означает, что

$$\left(\tau_j^2 \right)_{\varphi=\varphi_1} = \delta_j^2 (-Q_1) (\mu^2 - 1) / Q_3, \quad \varphi_1 = (\pi/2) + 2\pi n_0, \quad \delta_j^2 \in (0, 1)$$

и приводит к связи $\delta_j^2 = 1 / (2\Delta_j - 1)^2$. В качественном отношении процесс колебаний этих ветвей похож на случай (33), (34) (рис. 2), но теперь на границах ветвей имеем периодическую зависимость τ_j от времени, см. (38). При $\varphi = \varphi_1$ две смыкающиеся ветви образуют слабый разрыв. Для $\varphi = 2\pi n_0$ трансзвуковой переход существует при высоких частотах, если $\mu^2 > \Delta_j^2 > 1$.

При рассмотрении ветвей, имеющих одинаковый знак наклона, поступаем следующим образом. Левая ветвь: $\partial \tau / \partial x' > 0$, $\tau \in (0, \tau_{jl}]$, $x' \in (-\infty, x'_{jl}]$, $a_0 > 0$, $a_{12} > 0$, $b_{12} < 0$, $g_2 > 0$. Правая ветвь: $\partial \tau / \partial x' > 0$, $\tau \in [\tau_{jr}, 0)$, $x' \in [x'_{jr}, \infty)$, $a_0 < 0$, $a_{12} > 0$, $b_{12} > 0$, $g_2 > 0$. Здесь справедливы формулы (38), (39), в которых выбор знаков коэффициентов соответствует наименованию ветви: $\tau_j = \tau_{jl} = -\tau_{jr}$, $(dx'_j/dt)_l = (dx'_j/dt)_r = -(dx'_j/dt)_r$, $x'_j = x'_{jl} = -x'_{jr}$. При $\varphi = (\pi/2) + 2\pi n_0$ эти ветви образуют неподвижный сильный разрыв. Рассуждения, относящиеся к выбору параметров g_2 , Δ_j , δ_j^2 и условию появления трансзвукового перехода, остаются такими же, как и в предыдущем случае для ветвей с наклонами разных знаков. Качественная картина колебаний аналогична той, что показана на рис. 3, но теперь граничная функция τ_j содержит синусную зависимость от времени, см. (38).

Колебания слабого и сильного разрывов. Вернемся к интервалу низких частот и обсудим физическую модель решения при $b_1 = 0$: см. соотношения, сопутствующие формуле (28). На интервале $\tau \in (0, \tau_m]$ две монотонные ветви смыкаются друг с другом при $\tau = \tau_m \equiv \text{const}$ и образуют слабый разрыв. Левая ветвь: $\partial \tau / \partial x' > 0$, $x' \in (-\infty, x'_m]$, $a_0 > 0$, $a_1 > 0$, $a_2 > 0$, $a_{12} > 0$, $b_0 < 0$, $b_2 < 0$. Правая ветвь: $\partial \tau / \partial x' < 0$, $x' \in [x'_m, \infty)$, $a_0 < 0$, $a_1 < 0$, $a_2 < 0$, $a_{12} < 0$, $b_0 > 0$, $b_2 > 0$. Расположение ветвей похоже на то, что изображено на рис. 2, б. Обе ветви примыкают друг к другу при всех $t \geq 0$. Скорость слабого разрыва равна

$$dx'_m/dt = -(b_0 + b_2 \tau_m \cos kt) / [a_0 + a_{12} \tau_m \sin(kt + \beta_1)]. \quad (40)$$

В этой формуле выбор знаков коэффициентов соответствует наименованию ветви: $(dx'_m/dt)_l = (dx'_m/dt)_r$.

Другой вариант построения ветвей выполняется следующим образом. Левая ветвь: $\tau \in (0, \tau_m]$, $\partial \tau / \partial x' > 0$, $x' \in (-\infty, x'_m]$, $a_0 > 0$, $a_1 > 0$, $a_2 > 0$, $b_0 < 0$, $b_2 < 0$. Правая ветвь: $\tau \in [-\tau_m, 0)$, $\partial \tau / \partial x' > 0$, $x' \in [x'_m, \infty)$, $a_0 < 0$, $a_1 > 0$, $a_2 > 0$, $b_0 > 0$, $b_2 < 0$. Схема расположения ветвей аналогична той, что показана на рис. 3, б. Эти ветви примыкают слева и справа к линии $x'_m = x'_m(t)$, $t \geq 0$. Такая конфигурация ассоциируется с сильным разрывом, на котором функция $\tau(x', t)$ меняется скачком от $-\tau_m$ до τ_m . Скорость разрыва равна

$$\frac{dx'_m}{dt} = - \frac{(b_0)_{l,r} + (b_2)_{l,r} (\pm \tau_m) \cos kt}{(a_0)_{l,r} + (a_1)_{l,r} (\pm \tau_m) \sin kt + (a_2)_{l,r} (\pm \tau_m) \cos kt}, \quad (41)$$

$$(dx'_m/dt)_l = (dx'_m/dt)_r.$$

Для вариантов (40) и (41) линии динамического гистерезиса на плоскости (ζ, Z) имеют вид, аналогичный (36):

$$Z = \pm \left[\frac{a_1^2}{a_2^2} F(\zeta) \right]^{1/2}; \quad Z = 1 + \frac{a_0}{b_0} M.$$

Функция $F(\zeta)$ определяется формулой (37).

Заключение. Волновое уравнение (1) с источником (7) имеет точное частное решение (4), (5). Основные свойства решения детерминированы выбором знаков коэффициентов Q_1 , Q_3 и характером зависимости коэффициента a_3 от частоты возбуждающих колебаний источника (см. (21), (26)–(30)). Рассмотрены колебания высокой и низкой частоты. Изучены свойства τ_i -изолиний: кинк-пульсации; знакопеременность скорости изолиний; дозвуковой и сверхзвуковой режимы движения; трансзвуковой переход. Представлены три группы задач, связанных с физической интерпретацией решения: задача с неизвестной подвижной границей (31); колебания двух монотонных ветвей, периодически сближающихся и удаляющихся друг от друга; конфигурация волнового типа – слабый либо сильный разрыв, движущийся вдоль координатной оси.

Литература

1. Додд, Р. Солитоны и нелинейные волновые уравнения / Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гиббон, Х. Моррис. – М.: Мир, 1988. – 694 с.
2. Табор, М. Хаос и интегрируемость в нелинейной динамике / М. Табор. – М.: Эдиториал УРСС, 2001. – 318 с.
3. Жоу, Д. Расширенная необратимая термодинамика / Д. Жоу, Х. Касас-Баскес, Дж. Лебон. – Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2006. – 528 с.
4. Аэро, Э.Л. Динамические задачи для уравнения синус-Гордона с переменными коэффициентами. Точные решения / Э.Л. Аэро // Прикладная математика и механика. – 2002. – Т. 66, Вып. 1. – С. 102–108.
5. Nonautonomous mixed nKdV–sinh–Gordon hierarchy / J.F. Gomes, G.R. de Melo, L.H. Ymai, A.H. Zimerman // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. – 2010. – Vol. 43, no. 39. – P. 395203–395212.
6. Аэро, Э.Л. Решения уравнений синус-Гордон с переменной амплитудой / Э.Л. Аэро, А.Н. Булыгин, Ю.В. Павлов // Теоретическая и математическая физика. – 2015. – Т. 184, № 1. – С. 79–91.
7. Якушевич, Л.В. О движении кинка ДНК под действием постоянного торсионного момента / Л.В. Якушевич, В.Н. Балашова, Ф.К. Закирьянов // Матем. биология и биоинформ. – 2016. – Т. 11, Вып. 1. – С. 81–90.
8. Попов, С.П. Неавтономные солитонные решения модифицированного уравнения Кортевега-де Фриза-синус-Гордона / С.П. Попов // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2016. – Т. 56, № 11. – С. 1960–1969.
9. Шабловский, О.Н. Динамика неустойчивых решений волнового уравнения с источниками / О.Н. Шабловский // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2020. – Т. 12, № 4. – С. 51–61.

Поступила в редакцию 20 сентября 2021 г.

Сведения об авторе

Шабловский Олег Никифорович – доктор физико-математических наук, профессор, Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого, г. Гомель, Республика Беларусь, e-mail: shablovsky-on@yandex.by

*Bulletin of the South Ural State University
Series “Mathematics. Mechanics. Physics”
2021, vol. 13, no. 4, pp. 44–56*

DOI: 10.14529/mmph210406

WAVE EQUATION WITH CUBIC NONLINEARITY AND EXCITATION OF OSCILLATIONS IN THE “MEDIUM–SOURCE” SYSTEM

O.N. Shablovskii

Pavel Sukhoi State Technical University of Gomel, Republic of Belarus

E-mail: shablovsky-on@yandex.by

A new accurate solution of the wave equation with a source depending on the required function–time has been obtained. The source function has a polynomial (third degree) nonlinearity, as well as two complementary additive members, which include the second and third degrees of the required function and an explicit sine dependence on time. The constructed relations describe namely the process of excitation of oscillations in the “medium – nonlinear rheonomic source” system and therefore do not contain, as a special case, the solution of the wave equation with common cubic nonlinearity. Physical interpretation of the results of work is explained by the properties of the effect of the periodic external force on the medium. The solution has been obtained on the plane the “required function–time” and gives analytical expressions of the partial spatial and time derivatives of the required function. This allows to study the rheonomic properties of isolines of the required function: their velocity and the conditions at which this velocity is alternating. An important influence on the isolines behavior is exerted by

the slope of the source function in a small neighborhood of the zero value of the required function. Specifically: its sign determines the mode of (subsonic or supersonic) isoline movement, and its module serves as the scale when calculating the non-dimensional frequency of the exciting oscillations. The intervals of low and high frequencies are considered in this work. At every instant, the gradient properties of the required function are characterized by the monotone profile, located in the semi-infinite domain on the plane of the “coordinate – required function”. The conditions are indicated, at which time-periodic kink-pulsations occur: at separate moments, the source monotone profile transforms into a kink, which corresponds to two equilibrium states of the system. The rheonomic properties of the monotone profiles curvature have been studied: the appearance of points of inflection and rectification points. Two monotone profiles have been considered: the left and the right branches, located in the semi-infinite domains, respectively, to the left and right of the origin of coordinates. These branches move in oscillation, occasionally approaching each other and moving apart. At the moments when the branches adjoin the origin of coordinates, they form an immobile discontinuity, which is either weak or strong depending on whether the branch slopes are respectively either of different sign or of the same sign. It has been revealed that in the course of such oscillation process, a transonic transition is possible in the high frequency interval: the isoline velocity changes from the subsonic value to the supersonic one. A wave type formation has been constructed: the left and the right branches, forming either weak or strong discontinuity, move in time-periodic oscillation along the coordinate axis.

Keywords: wave equation; cubic nonlinearity of the source; transonic transition; moving boundary; weak and strong discontinuity.

References

1. Dodd R.K., Eilbeck J.C., Gibbon J.D., Morris H.C. *Solitons and Nonlinear Wave Equations*. London, Academic Press. Inc., 1984, 630 p.
2. Tabor M. *Chaos and Integrability In Nonlinear Dynamics*. New York etc.: Wiley, Cop., 1989, 364 p.
3. Jou D., Casas-Vazquez J., Lebon G. *Extended Irreversible Thermodynamics*. Springer, 2001, 463 p. DOI: 10.1007/978-3-642-56565-6
4. Aero E.L. Dynamical Problems for the Sine-Gordon Equation with Variable Coefficients. Exact solutions. *J. Appl. Math. Mech.*, 2002, Vol. 66, no 1, pp. 99–105. DOI: 10.1016/S0021-8928(02)00013-8
5. Gomes J.F., de Melo G.R., Ymai L.H., Zimmerman A.H. Nonautonomous mixed nKdV–sinh–Gordon hierarchy. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2010, Vol. 43, no. 39, pp. 395203–395212. DOI: 10.1088/1751-8113/43/39/395203
6. Aero E.L., Bulygin A.N., Pavlov Yu. V. Solutions of the Sine-Gordon Equation with Variable Amplitude. *Theoretical and Mathematical Physics*, 2015, Vol. 184, no. 1, pp. 961–972. DOI: 10.1007/s11232-015-0309-8
7. Yakushevich L.V., Balashova V.N., Zakiryanov F.K. On the DNA Kink Motion Under the Action of Constant Torque. *Math. Biol. Bioinf.*, 2016, Vol. 11, Iss. 1, pp. 81–90. DOI: 10.17537/2016.11.81
8. Popov S.P. Nonautonomous Soliton Solutions of the Modified Korteweg–De Vries–Sine-Gordon Equation. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2016, Vol. 56, Iss. 11, pp. 1929–1937. DOI: 10.1134/S0965542516110105
9. Shablovskiy O.N. Dynamics of Unstable Solutions for the Wave Equation with Sources. *Bulletin of the South Ural State University, series “Mathematics. Mechanics. Physics”*, 2020, Vol. 12, no. 4, pp. 51–61. DOI: 10.14529/mmph200406

Received September 20, 2021

Information about the author

Shablovskii Oleg Nikiforovich, Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Pavel Sukhoi State Technical University of Gomel, Gomel, Republic of Belarus, e-mail: shablovsky-on@yandex.by

AB INITIO MODELING OF INTERACTIONS OF P, H, C, S WITH GRAIN BOUNDARIES IN α -IRON

A.V. Verkhovyykh, A.A. Mirzoev, N.S. Dyuryagina

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: diuriaginans@susu.ru

The results of modeling from the first principles of interaction of non-metallic impurities of interstitial (H, C) and substitutional (P, S) with grain boundaries in α -iron are presented. The modeling has been conducted within the framework of the density functional theory (DFT) by the full-potential linearized augmented plane waves (FP LAPW) method with consideration to the generalized gradient approximation (GGA'96) in the WIEN2k software package. Three grain boundaries of the slope $\Sigma 3$ (111), $\Sigma 5$ (210) and $\Sigma 5$ (310) are studied. The supercells of the tilt grain boundaries using the coincidence site lattice model is constructed. The values of the energy characteristics of various grain boundaries with impurities are influenced by a number of factors, namely, the volume of the Voronoi polyhedron per impurity, magnetic moments, and the symmetry of the surrounding matrix. The results show that symmetric grain boundaries $\Sigma 3$ (111) and $\Sigma 5$ (310) are embrittled by phosphorus, hydrogen, and sulfur, while carbon strengthens interatomic bonds at the grain boundary, which coincides with the data available in the work. In the case of an asymmetric grain boundary $\Sigma 5$ (210), phosphorus and hydrogen weaken bonds at the grain boundary, while sulfur strengthens them. This is primarily explained by the geometry of the surrounding matrix. The magnetic moments at the impurity atoms are very small and, in most cases, are antiparallel to the magnetic moments at the neighboring Fe atoms.

Keywords: ab initio modeling; BCC iron; hydrogen; phosphorus; sulfur; carbon; grain boundary

Introduction

The brittle intergranular fracture was experimentally observed in many different materials: iron and steel; nickel, copper, and high-melting alloys [1–3]. This type of brittle fracture is often accompanied by a significant reduction of fracture toughness. And, as a result, its sudden appearance can lead to a catastrophic degradation of material properties, which limits the use of many alloys. Although the mechanism of a brittle intergranular fracture depends on the material and its application, there is a distinguishing characteristic observed in all known cases. Impurities with low solubility in the volume accumulate at the grain boundaries (GB) and locally reduce the cohesive strength of a metal. These embrittling elements are called impurities because their bulk concentrations are often below the level that can be controlled during the manufacturing melting process (for example, less than 200 ppm). However, when these elements accumulate at the grain boundaries, their concentration can be very high, about 5–10 at. %.

Though researchers have been studied the influence of various impurities on the interatomic bonds on GB for several decades, some problems remain unsolved. The intergranular embrittlement, which stems from the changes in interatomic bonds on GB, is associated either with a chemical mechanism related to the features of impurity capture [4–6] or with a mechanical impact related to the atomic size of the impurity [7]. The predominant mechanism depends on a type of impurity and a material boundary. The properties of loaded interfaces (such as GB) are determined by their thermodynamic characteristics, experimental evaluation of which is not an easy process. At the same time, computer modelling from the first principles allows researchers to calculate numerically reliable thermodynamic characteristics.

In 1990 Krasko and Olsen [8] for the first time studied the behavior of various impurities (boron, carbon, phosphorus, and sulfur) on GB $\Sigma 3(111)$ in iron, using the ab initio modelling. Freeman and his colleagues [9–13] continued the investigation. They showed that the chemical bond between impurity elements and Fe plays an important role in the segregation processes of dissolved substances. At the same time, the modelling of the $\Sigma 5(210)$ boundary in the bcc iron indicated that the main factor is the size of the impurity atom [14]. Many studies on the segregation of light elements (B, C, P, N, O, and S)

at the grain boundary $\Sigma 5$ in bcc iron demonstrated that different interstitial impurities may occupy different positions at the grain boundaries. However, all these atoms are embrittling elements for GB [15–17]. Several investigations [18–21] were devoted to DFT (density functional theory) modelling of the interaction of hydrogen with $\Sigma 3(111)$ in iron. The authors showed that hydrogen causes strong embrittlement of the considered boundary. The $\Sigma 5(310)$ boundary was also studied [22–24], and it was shown that internodes capture a hydrogen atom. However, only one (and not sufficiently detailed) [25] investigation was devoted to the interaction of hydrogen with the boundary $\Sigma 5(210)$.

So, this work aims to study the effect of light impurities (C, P, H, S) on the grain boundaries $\Sigma 5(310)$, $\Sigma 5(210)$, and $\Sigma 3(111)$. We investigated the structural, electronic, and magnetic properties of these GBs, using the WIEN2k software package [26].

Methods

All calculations were carried out using the full-potential method of linearized augmented plane wave [27] with generalized gradient approximation [28], implemented in the WIEN2k software package [26]. This approach allowed us to obtain high accuracy of the simulation results within the density functional theory. For calculation, we used a powerful computing system “Tornado SUSU”. We considered three symmetric tilt GBs: $\Sigma 3(111)$, $\Sigma 5(310)$, and $\Sigma 5(210)$. The $\Sigma 3(111)$ GB is the most thoroughly studied one [18–21]. So, we used it as a model system of symmetric tilt GB with impurities in iron. The $\Sigma 5(310)$ boundary has the lowest formation energy in bcc iron [23]. Less studied $\Sigma 5(210)$ has a mutual shift of the relaxed grains, which introduces asymmetry to the system. Therefore, it is suitable as a model for an asymmetric tilt boundary in iron.

We constructed the tilt grain boundaries supercells using the coincidence site lattice (CSL) model [29]. Usually, the CSL is characterized by the Σ value, which equals the inverse density of the coincident sites. In the case of grain boundaries $\Sigma 5(210)$ and $\Sigma 5(310)$, we rotated the contacting bcc grains for each other about the common $[001]$ axis by approximately $53,1^\circ$ and $36,9^\circ$, respectively. The planes (210) and (310) were defined as the planes of grain boundaries. Similarly, we constructed the grain boundary $\Sigma 3(111)$. In this case, a rotation angle about the common $[110]$ axis equaled approximately $70,53^\circ$, and the (111) plane was used as the plane of the grain boundary. The models of grain boundaries $\Sigma 5(210)$, $\Sigma 5(310)$, and $\Sigma 3(111)$ have elementary cells of 80, 80, and 96 atoms, respectively (Fig. 1). Note that all substitution positions 1–6 in Fig.1 lie on the grain boundary, although at a quick glance it may seem that some of them lie inside the subsurface layer.

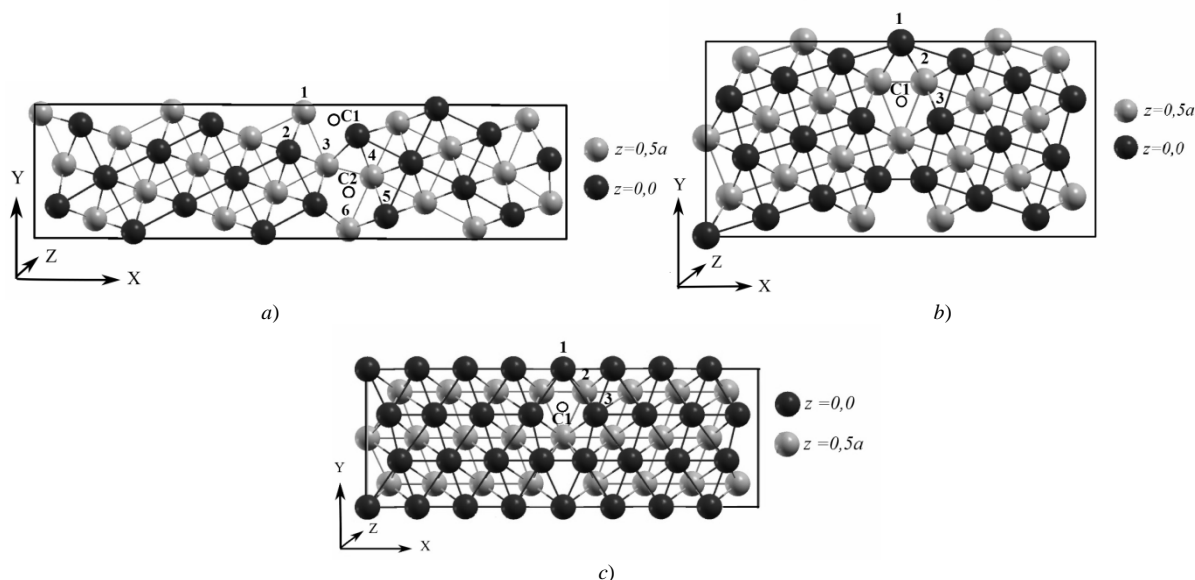


Fig. 1. Structures of a) $\Sigma 5(210)$, b) $\Sigma 5(310)$, and c) $\Sigma 3(111)$ grain boundaries in bcc iron. Dark and light balls represent grain atoms lying in two different planes: $z = 0$ and $z = 0,5a$, respectively (a is the lattice constant). Positions of impurity atoms P and S: a) 1–6; b) 1–3; c) 1–3. Positions of interstitial impurity atoms C and H: a) C1 and C2; b) C1; c) C1

Because of periodic boundary conditions, the constructed cells represent two “grains” and two boundaries. The free surface (FS) supercell was modelled by replacing one of the halves of the cell (grain) with a vacuum of $10\text{--}12 \text{ \AA}$ length. Thus, the FS has 40 (for $\Sigma 5(210)$ and $\Sigma 5(310)$) or 48 (for $\Sigma 3(111)$) atoms, separated from the neighboring cell by a vacuum of $10\text{--}12 \text{ \AA}$ in the direction of the x -axis.

For $\Sigma 5$ (210) and $\Sigma 5$ (310) we used $4 \times 2 \times 1$ Monkhorst-Pack k -point mesh in the Brillouin zone [30], and for $\Sigma 3$ (111) – $6 \times 4 \times 1$. A further increase in k -points led to insignificant changes in the total energy of the systems (no more than 0,01 eV). Muffin-tin sphere radius R_{mt} was equal to 2,0 (iron atom, substitutional impurities P and S), 1,25 (interstitial impurity C), and 0,7 (interstitial impurity H) a.u. We chose cut-off energy of 340 eV for all systems. The supercell dimensions (a, b, c) for $\Sigma 5$ (210), $\Sigma 5$ (310), and $\Sigma 3$ (111) GBs were $(4\sqrt{5}a, \sqrt{5}a, 2a)$, $(2\sqrt{10}a, \sqrt{10}a, 2a)$ and $(4\sqrt{3}a, \sqrt{6}a, 2\sqrt{2}a)$ respectively. GB planes were perpendicular to the x -axis. Here, a is the lattice constant of bcc iron. The calculated equilibrium lattice constant of ferromagnetic bcc iron equals 2,847 Å, which is in good agreement with the experimental value of 2,86 Å [31]. Thus, the supercells had the GB areas of 36,24, 51,26, and 55,88 Å²/cell for $\Sigma 5$ (210), $\Sigma 5$ (310), and $\Sigma 3$ (111), respectively.

For every constructed structure with GB, we optimized the supercell lengths (both along and perpendicular to the GB) to remove stresses that had arisen in the supercell with the introduction of the GB. Subsequently, the relaxation of positions of separate atoms in the supercell was performed (the convergence criteria for Hellmann–Feynman force at each atom was 0,01 eV/Å). We simulated surfaces and hydrogen adsorption, using 40 and 48 layers of metal atoms. Metal atoms on the two lowest layers remained at their equilibrium positions. With the chosen computational parameters calculated energies have a numerical precision of 0,01 eV.

To study the intermolecular interaction and the mechanical properties of GB it is necessary to determine the following energy characteristics:

1) The Griffith work, which is defined according to the thermodynamic theory by Rice and Wang [32] as a work, needed to separate a crystal along a grain boundary:

$$E_{GW} = E_{gb} - 2E_{fs}, \quad (1)$$

where E_{gb} is the total energy of grains at their equilibrium positions for each other, and E_{fs} is the total energy of relaxed free FS supercells, which form the GB. It is measured in eV. A negative value E_{GW} corresponds to a decrease in the free energy of the system due to the elimination of two surfaces, i.e. this process is energetically favourable.

2) The energy of GB formation in the framework of the ab initio approach

$$\gamma_{gb} = \frac{E_{gb} - E_{bulk}}{2S}, \quad (2)$$

where E_{gb} is the total energy of a GB supercell, which contains n Fe atoms; E_{bulk} is the total energy of a bulk crystal supercell, which consists of n Fe atoms and has the same volume and shape as the supercell with the GBs; and S is the area of the grain boundary interface. It is measured in J/m².

The influence of impurity on the properties of the grain boundary can be described by the following quantitative characteristics:

a) The solution energy ΔE , defined as

$$\Delta E = E_{gb}^X - (n - k)E_{gb} - E(X), \quad (3)$$

where E_{gb} is the total energy of a supercell without impurity that consists of n Fe atoms; E_{gb}^X is the total energy of the same supercell with an impurity (for a substitution impurity $k = 1$, for an interstitial impurity $k = 0$); $E(X)$ is the energy of one atom of the impurity ($X = P, C, H, S$). It is measured in eV. A negative sign of the dissolution energy indicates that an impurity is easily dissolved at a grain boundary.

b) Correction to the Griffith work: the cohesive energy, which is defined according to Rice and Wang model. It indicates either an enhancement (negative value) or a weakening of the intermolecular bond between Fe-atoms on the GB in the presence of an impurity [19]:

$$\Delta E_{GW}^X = E_{gb}^X - E_{gb} + E_{fs} - E_{fs}^X, \quad (4)$$

where E_{fs} is the total energy of the supercell of a clean free surface; E_{fs}^X is the total energy of the supercell of the free surface with one impurity ($X = P, C, H, S$).

c) The binding energy of impurity to a grain boundary:

$$E_{gbX}^{bin} = (E_{bulk}^X - E_{bulk}) - (E_{gb}^X - E_{gb}), \quad (5)$$

where E_{bulk} is the energy of the commensurate supercell of bulk Fe, E_{bulk}^X is the total energy of the supercell with one impurity in an equilibrium position. The negative (positive) value of this energy indicates the presence of attraction (repulsion) between the GB and the impurity.

Results and discussion

In our previous works [33] we determined the formation energy of $\Sigma 3(111)$, $\Sigma 5(210)$, and $\Sigma 5(310)$ grain boundaries by formulas (1) and (2). It equals $-4,19$ eV and $1,46$ J/m² for $\Sigma 3(111)$; $-5,24$ eV and $1,83$ J/m² for $\Sigma 5(210)$; $-5,77$ eV and $1,44$ J/m² for $\Sigma 5(310)$. These results are in good agreement with the results of other authors, obtained within the framework of density functional theory ($\Sigma 5(310)$ – $1,48$ J/m² [34], $1,378$ J/m² [35]; $\Sigma 5(210)$ – 2 J/m² [36]; $\Sigma 3(111)$ – $1,52$ J/m² [37], $1,57$ J/m² [36]). However, the experimental values γ_{gb} are about 1,5–2 times smaller than our results ($0,77$ J/m² and $0,985$ J/m² [38, 39]) probably because in experiment it is possible to determine only an average value of γ_{gb} over all GBs in a sample.

We chose the interstitial position for a carbon atom because this position is energetically favourable [13, 16]. Experimental studies show that at low temperatures substitution positions are energetically favourable for phosphorus. The situation changes with heating: interstitial sites become more favourable with the temperature rise [40]. Since we modelled GB at 0 K, we studied the substitution positions of a phosphorus atom in more detail. Similarly, we investigated a sulfur impurity on grain boundaries.

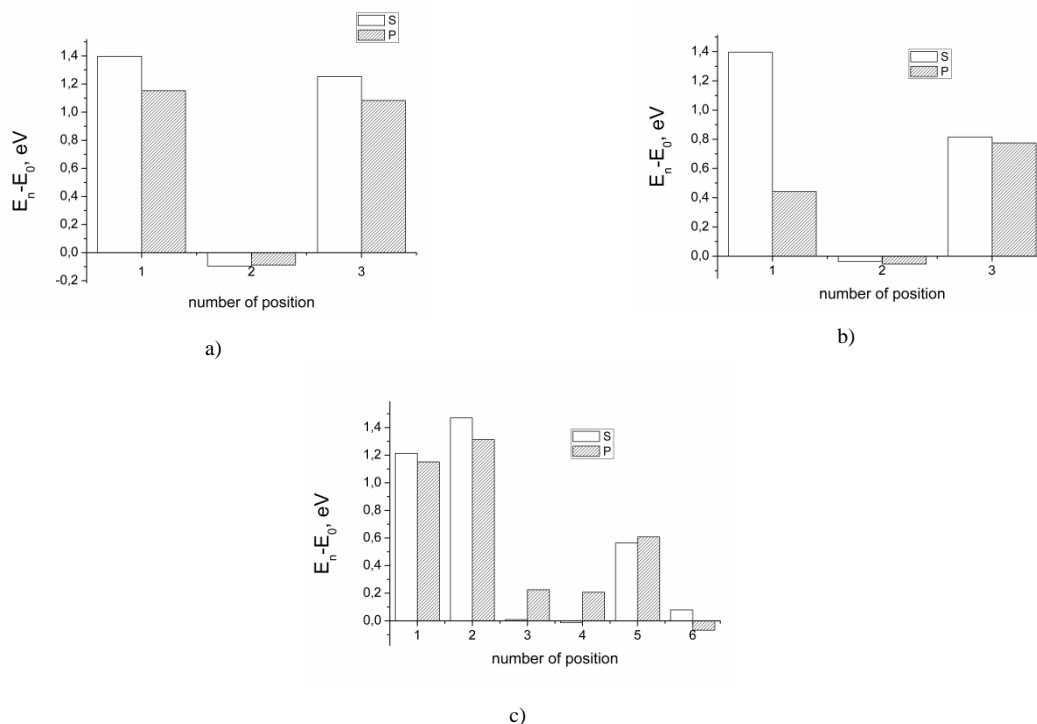


Fig. 2. Graph of the dependence of the relative energy ($E_n - E_0$) of the grain boundary on the impurity position number: a) $\Sigma 5(310)$; b) $\Sigma 3(111)$; c) $\Sigma 5(210)$

For positions of substitutional impurities, we chose atoms with numbers 1–6 for $\Sigma 5(210)$ (Fig. 1, a) and 1–3 for $\Sigma 5(310)$ and $\Sigma 3(111)$ (Fig. 1, b, c). These atoms were replaced one by one. For interstitial positions of C and H atoms, we chose the sites C1 and C2 for $\Sigma 5(210)$ (Fig. 1, a) and C1 for $\Sigma 5(310)$ and $\Sigma 3(111)$ (Fig. 1, b, c). We calculated the total energy of the structure independence on the position of every impurity. Subsequently, we determined the ground state energy (E_0) as the lowest energy of a structure with each impurity (Fig. 2).

Fig. 2 shows that the systems with $\Sigma 5(310)$ and $\Sigma 3(111)$ have the lowest energy when substitutional impurities (both S and P) are located at position 2. In the case of asymmetric grain boundary $\Sigma 5(210)$, sulfur and phosphorus occupy sites 4 and 6, respectively. The position of carbon and hydrogen, which corresponds to the systems with the lowest energy, is C1.

Table 1 indicates that there are fluctuations of both the magnetic moment on the impurity atoms and the volume of the Voronoi polyhedron, constructed for this impurity. And there is no specific dependence for $\Sigma 5(210)$. For example, for the C atom in 2 different positions, the magnetic moment and the volume are the same, though the energies differ substantially ($\sim 0,6$ eV). The possible explanation is that the energy components are influenced by the properties of the surrounding matrix, i. e. the asymmetry of the structure.

Table 1
The values of the magnetic moment and the volume of the Voronoi polyhedron, corresponding to the impurity atom X in different positions on the grain boundaries (X = C, H, P, S).

Type	№	Voronoi polyhedron volume of impurity, Å ³				Magnetic moment X, μ_B			
		S	P	C	H	S	P	C	H
$\Sigma 5(210)$	1	11,99	12,05	7,57	7,11	0,01	-0,08	-0,06	-0,01
	2	10,87	10,88	7,57	6,79	-0,03	-0,09	-0,06	-0,01
	3	11,75	11,62	-	-	-0,03	-0,10	-	-
	4	11,76	11,55	-	-	-0,03	-0,10	-	-
	5	10,60	10,45	-	-	-0,05	-0,09	-	-
	6	11,14	10,92	-	-	0,02	-0,08	-	-
$\Sigma 5(310)$	1	12,06	11,97	7,52	7,22	0,04	-0,07	-0,10	-0,01
	2	10,74	10,70	-	-	-0,04	-0,10	-	-
	3	11,78	11,06	-	-	-0,02	-0,08	-	-
$\Sigma 3(111)$	1	12,74	12,45	7,63	6,72	0,02	-0,06	-0,10	-0,01
	2	10,47	10,45	-	-	-0,04	-0,08	-	-
	3	11,17	11,40	-	-	-0,03	-0,07	-	-

For symmetric boundaries $\Sigma 5(310)$ and $\Sigma 3(111)$ the magnetic moment of the impurities P, S, and H directly depend on the volume of the Voronoi polyhedron: the magnetic moment on the impurity atom increases with the volume increase. With the increase of the plane number, relative to the grain boundary plane, the volume and, consequently, the magnetic moment peak, then, after the decrease, the values slowly grow. Similar behaviour is observed for chromium on $\Sigma 3(111)$ [36]. The changes in interplanar spacings introduced by hydrogen are small enough, in comparison with P and S, which is due to the small ionic radius of hydrogen. When the carbon is located on the GB, the nearest iron atoms move away from each other, at the same time Fe-C-Fe bonds form. Magnetic moments on phosphorus ($-0,09 \mu_B$ for $\Sigma 5(210)$; $-0,07 \mu_B$ for $\Sigma 3(111)$), sulfur ($-0,03 \mu_B$ $\Sigma 5(210)$; $-0,02 \mu_B$ for $\Sigma 3(111)$) and carbon atoms ($-0,06 \mu_B$ for $\Sigma 5(210)$; $-0,10 \mu_B$ for $\Sigma 3(111)$) are in good agreement with the values presented in another theoretical work (P: $-0,07, -0,09 \mu_B$; S: $-0,03, -0,04 \mu_B$; C: $-0,12, -0,14 \mu_B$ at grain boundaries $\Sigma 3(111)$ and $\Sigma 5(210)$, respectively) [16]. For all impurities, a low value of the magnetic moment, oriented antiparallel to the surrounding iron matrix, is observed.

Table 2 presents the energy characteristics of the interaction of impurities with grain boundaries, calculated using formulas (3)–(5).

The negative value of the solution energy indicates that the impurity readily dissolves at the grain boundary. The solution energy of carbon at the GB $\Sigma 5(310)$ is $-0,47$ eV, which is in good agreement with the experimental data for this grain boundary ($-0,45$ eV [41]). And this value agrees with other theoretical data ($-0,29$ eV [42], $-0,23$ eV [43]). The values of the hydrogen solution energy are $-0,48, -0,10,$ and $-0,10$ eV for $\Sigma 5(210), \Sigma 5(310),$ and $\Sigma 3(111),$ respectively. These energies agree with the other theoretical results [21, 22, 24].

Phosphorus and hydrogen have positive cohesion energy at practically all positions on the grain boundaries. So, P and H are embrittling elements for these boundaries. In contrast, carbon in all cases strengthens the interatomic bonds between Fe-atoms on GB, which agrees with other data [16, 35]. In the case of the asymmetric grain boundary $\Sigma 5(210)$ all considered positions of sulfur have the negative cohesive energy, so S, like C, strengthens the Fe interatomic bonds on the GB. Such effect originates from the asymmetry of the surrounding matrix, which leads to the formation of Fe-S bonds. As a consequence, the bonds between the iron atoms belonging to different grains are enhanced. In the case of the boundaries $\Sigma 3(111)$ and $\Sigma 5(310)$ sulfur is an embrittling element stronger than phosphorus. This result agrees well with experimental [44, 45] and theoretical data [14, 16, 17, 37].

Table 2

Energy characteristics of the interaction of impurities with GBs: the solution energy (ΔE), the cohesion energy (ΔE_{GW}^x), and the binding energy (E_{gbX}^{bin})

Type	№	The solution energy, eV				The cohesion energy, eV				The binding energy, eV			
		S	P	C	H	S	P	C	H	S	P	C	H
$\Sigma 5(210)$	1	0,02	-0,95	-0,32	-0,48	-0,27	1,67	-1,38	0,07	0,82	0,79	-1,58	-0,81
	2	0,28	-0,79	0,28	-0,23	-0,02	1,83	-0,79	0,32	1,08	0,95	-0,99	-0,57
	3	-1,18	-1,88	-	-	-1,48	0,75	-	-	-0,38	-0,14	-	-
	4	-1,21	-1,89	-	-	-1,50	0,73	-	-	-0,40	-0,16	-	-
	5	-0,63	-1,49	-	-	-0,92	1,13	-	-	0,17	0,24	-	-
	6	-1,11	-2,17	-	-	-1,41	0,45	-	-	-0,31	-0,43	-	-
$\Sigma 5(310)$	1	0,44	-0,70	-0,32	-0,10	1,24	0,81	-0,07	0,68	1,20	1,00	-1,27	-0,43
	2	-1,05	-1,94	-	-	-0,25	-0,43	-	-	-0,29	-0,24	-	-
	3	0,30	-0,77	-	-	1,10	0,74	-	-	1,06	0,93	-	-
$\Sigma 3(111)$	1	-0,69	-1,61	-0,03	-0,10	2,92	0,51	-0,29	0,41	0,02	0,01	-0,82	-0,49
	2	-1,27	-2,76	-	-	1,49	-0,65	-	-	-1,42	-1,14	-	-
	3	-2,12	-1,93	-	-	2,34	0,18	-	-	-0,57	-0,31	-	-

The negative binding energy indicates that an impurity atom is trapped. The greater the value of binding energy, the higher the activation barrier for impurity migration in the matrix. The higher activation barrier corresponds to the lower rate at which the impurity can accumulate at the tops of the cracks, causing a fracture. The maximum value of the binding energy is observed when a carbon atom is in C1 position at the asymmetric boundary $\Sigma 5(210)$. In the case of hydrogen, the position with the highest value of binding energy is the same. The results are in good agreement with the data available in the literature (for carbon at $\Sigma 5(310)$ GB: -1,77 eV [46] and -1,51 eV [43]; at $\Sigma 5(210)$ GB: -1,62 eV [46], at $\Sigma 3(111)$ GB: -0,8 eV [16]. For hydrogen at $\Sigma 5(310)$ GB: -0,4 eV [22]; at $\Sigma 3(111)$ GB: -0,49 eV [20]; the experimental value of binding energy is -0,51 eV [47]).

Calculated binding energies of phosphorus (-0,43, -0,24, and -1,14 eV for $\Sigma 5(210)$, $\Sigma 5(310)$, and $\Sigma 3(111)$, respectively) also agree with the results presented in other papers (the experimental value is -0,44 eV [48]; at $\Sigma 5(310)$ GB binding energy is -0,4 eV [49]; at $\Sigma 5(210)$ GB: -1,0 eV [16] and -0,275 eV [50]; at $\Sigma 3(111)$: -1,16 eV [50, 51]). For the sulfur impurity the maximum binding energies are -0,40, -0,29 and -1,42 eV for $\Sigma 5(210)$, $\Sigma 5(310)$, and $\Sigma 3(111)$, respectively. These values are in good agreement with the experimental data (-0,77 eV [45]), taking into account the fact that in the experiment the binding energy was averaged over all different orientations of grain boundaries, encountered in the iron.

To summarize, the binding energy of an impurity atom is affected not only by the volume and magnetic properties of the surrounding matrix but also by the asymmetry of the structure.

Summary

Using *ab initio* methods we modelled atomic configurations of fully relaxed grain boundaries $\Sigma 5(310)$, $\Sigma 5(210)$, and $\Sigma 3(111)$ with and without impurity X (X = P, S, C, H) and calculated their energy characteristics.

The obtained results for the grain boundary formation energy are in agreement with existing data. The grain boundaries $\Sigma 5(310)$, $\Sigma 5(210)$, and $\Sigma 3(111)$ trap impurities. Comparing the energy characteristics of three different grain boundaries with impurities, we noticed that many factors affect their values, namely, the volume of the Voronoi polyhedron per one impurity, the magnetic moments, and the symmetry of the surrounding matrix. We found that for symmetric boundaries sulfur is a stronger embrittling element than phosphorus, which agrees with both experimental and theoretical data. In the case of the grain boundary $\Sigma 5(210)$, a negative value of the cohesive energy is observed for all the considered sulfur positions, so S strengthens the Fe interatomic bonds on the GB. This effect stems from the asymmetry of the surrounding matrix.

The work was supported by the Russian Foundation of Basic Research (grant no. 20-43-740004 r_a_Chelyabinsk).

References

1. Jolly P. Discussion of "The Elimination of Oxygen-Induced Intergranular Brittleness in Iron by Addition of Scavengers". *Metallurgical and Materials Transactions B*, 1971, Vol. 2, Iss. 1, pp. 341–342. DOI: 10.1007/BF02662691

2. Ramasubramanian P.V., Stein D.F. An Investigation of Grain-Boundary Embrittlement in Fe-P, Fe-P-S, and Fe-Sb-S Alloys. *Metallurgical Transactions*, 1973, Vol. 4, Iss. 7, pp. 1735–1742. DOI: 10.1007/BF02666204
3. Pichard C., Rieu J., Goux C. The Influence of Oxygen and Sulfur on the Intergranular Brittleness of Iron. *Metallurgical Transactions A*, 1976, Vol. 7, Iss. 12, pp. 1811–1815. DOI: 10.1007/BF02659810
4. Messmer R.P., Briant C.L. The Role of Chemical Bonding in Grain Boundary Embrittlement. *Acta Metallurgica*, 1982, Vol. 30, Iss. 2, pp. 457–467. DOI: 10.1016/0001-6160(82)90226-7
5. Haydock R. The Mobility of Bonds at Metal Surfaces (Heterogeneous Catalysis). *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1981, Vol. 14, Iss. 26, p. 3807. DOI: 10.1088/0022-3719/14/26/016
6. Duscher G., Chisholm M. F., Alber U., Rühle M. Bismuth-Induced Embrittlement of Copper Grain Boundaries. *Nature materials*, 2004, Vol. 3, p. 621–626. DOI:10.1038/nmat1191
7. Schweinfest R., Paxton A.T., Finnis M.W. Bismuth Embrittlement of Copper is an Atomic Size Effect. *Nature*, 2004, Vol. 432, p. 1008–1011. DOI:10.1038/nature03198
8. Krasko G.L., Olson G.B. Effect of Boron, Carbon, Phosphorus and Sulphur on Intergranular Cohesion in Iron. *Solid State Communications*, 1990, Vol. 76, Iss. 3, pp. 247–251. DOI: 10.1016/0038-1098(90)90832-V
9. Tang S., Freeman A.J., Olson G.B. Phosphorus-Induced Relaxation in an Iron Grain Boundary: A Cluster-Model Study. *Physical Review B*, 1993, Vol. 47, Iss. 5, p. 2441. DOI: 10.1103/physrevb.47.2441
10. Tang S., Freeman A.J., Olson G.B. Local-density Studies of the Structure and Electronic Properties of B and S in an Fe Grain Boundary. *Physical Review B*, 1994, Vol. 50, Iss. 1, p. 1–4. DOI: 10.1103/physrevb.50.1
11. Wu R., Freeman A.J., Olson A.J. First Principles Determination of the Effects of Phosphorus and Boron on Iron Grain Boundary Cohesion. *Science*, 1994, Vol. 265, no. 5170, pp. 376–380. DOI: 10.1126/science.265.5170.376
12. Wu R., Freeman A.J., Olson G.B. Nature of Phosphorus Embrittlement of the Fe $3[11\bar{0}](111)$ grain boundary. *Physical Review B*, 1994, Vol. 50, Iss. 1, p. 75–81. DOI: 10.1103/PhysRevB.50.75
13. Wu R., Freeman A.J., Olson G.B. Effects of Carbon on Fe-Grain-Boundary Cohesion: First-Principles Determination. *Physical Review B*, 1996, Vol. 53, Iss. 11, p. 7504. DOI: 10.1103/PHYSREVB.53.7504
14. Braithwaite J.S., Rez P., Grain Boundary Impurities in Iron. *Acta Materialia*, 2005, Vol. 53, Iss. 9, pp. 2715–2726. DOI:10.1016/j.actamat.2005.02.033
15. Wachowicz E., Kiejna A. Effect of Impurities on Grain Boundary Cohesion in BCC Iron. *Computational Materials Science*, 2008, Vol. 43, pp. 736–743. DOI: 10.1016/j.commatsci.2008.01.063
16. Wachowicz E., Kiejna A. Effect of Impurities on Structural, Cohesive and Magnetic Properties of Grain Boundaries in α -Fe. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2011, Vol. 19, no. 2, p. 025001. DOI: 10.1088/0965-0393/19/2/025001
17. Yamaguchi M., Nishiyama Y., Kaburaki H. Decohesion of Iron Grain Boundaries by Sulfur or Phosphorous Segregation: First-Principles Calculations. *Physical Review B*, 2007, Vol. 76, Iss. 3, p. 035418. DOI:10.1103/PhysRevB.76.035418
18. Zhong L., Wu R., Freeman A. J., Olson G. B. Charge Transfer Mechanism of Hydrogen-Induced Intergranular Embrittlement of Iron. *Physical Review B*, 2000, Vol. 62, Iss. 1, p. 13938. DOI:10.1103/PhysRevB.62.13938
19. Tian Z. X., Yan J. X., Hao W., Xiao W. Effect of Alloying Additions on the Hydrogen-Induced Grain Boundary Embrittlement in Iron. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2011, Vol. 23, no. 1, p. 015501. DOI: 10.1088/0953-8984/23/1/015501
20. Matsumoto R., Riku M., Taketomi S., Miyazaki N. Hydrogen-Grain Boundary Interaction in Fe, Fe-C, and Fe-N Systems. *Progress in Nuclear Science and Technology*, 2010, Vol. 2, pp. 9–15. DOI: 10.15669/pnst.2.9
21. Momida H., Asari Y., Nakamura Y., Tateyama Y., Ohno T. Hydrogen-Enhanced Vacancy Embrittlement of Grain Boundaries in Iron. *Physical Review B*, 2013, Vol. 88, Iss. 14, p. 144107. DOI: 10.1103/PhysRevB.88.144107
22. Du Y. A., Ismer L., Rogal J., Hickel T., Neugebauer J., Drautz R. First-Principles Study on the Interaction of H Interstitials with Grain Boundaries in α - and γ -Fe. *Physical Review B*, 2011, Vol. 84, Iss. 14, p. 144121. DOI: 10.1103/PhysRevB.84.144121

23. Gesari S.B., Pronsato M.E., Juan A. The Electronic Structure and Bonding of H Pairs at $\Sigma = 5$ BCC Fe Grain Boundary. *Surface Science*, 2002, Vol. 187, Iss. 3-4, pp. 207–217. DOI: 10.1016/s0169-4332(01)00990-4
24. Tahir A.M., Janisch R., Hartmaier A. Hydrogen embrittlement of a carbon segregated $\Sigma 5(310)[001]$ symmetrical tilt grain boundary in α -Fe. *Material Science and Engineering A*, 2014, Vol. 612, P. 462467. DOI: 10.1016/j.msea.2014.06.071
25. Gesari S.B., Pronsato M.E., Juan A. Grain Boundary Segregation of Hydrogen in BCC Iron: Electronic Structure. *Surface Review and Letters*, 2002, Vol. 9, pp. 1437–1442. DOI: 10.1142/S0218625X02003998
26. Blaha P. *Wien2k. User's Guide*, http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks/usersguide.pdf, 2014.
27. Singh D.J., Nordstrom L. *Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method*. Springer, New York, 2006, 136 p. DOI: 10.1007/978-0-387-29684-5
28. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical review letters*, 1996, Vol. 77, no. 18, pp. 3865–3868.
29. Sutton A.P., Balluffi R.W. *Interfaces in Crystalline Materials*. Oxford University Press: New York, 1995, 819 p.
30. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special Points for Brillouin-Zone Integrations. *Physical Review B*, 1976, Vol. 13, Iss. 12, p. 5188. DOI: 10.1103/PhysRevB.13.5188
31. Emsley J. *The elements*. Oxford, Clarendon Press, 1991, 256 p.
32. Rice J.R., Wang J.-S. Embrittlement of Interfaces by Solute Segregation. *Materials Science and Engineering A – structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 1989, Vol. 107, pp. 23–40. DOI: 10.1016/0921-5093(89)90372-9
33. Mirzaev D.A., Mirzoev A.A., Okishev K. Yu., Verkhovykh A.V. *Ab initio* Modelling of the Interaction of H Interstitials with Grain Boundaries in BCC Fe. *Molecular Physics*, 2016, Vol. 114, Iss. 9, pp. 1502–1512. DOI:10.1080/00268976.2015.1136439
34. Gao N., Fu C.-C., Samaras M., Schäublin R., Victoria M., Hoffelner W. Multiscale Modelling of Bi-Crystal Grain Boundaries in BCC Iron. *Journal of Nuclear Materials*, 2008, Vol. 385, Iss. 2, pp. 262–267. DOI:10.1016/j.jnucmat.2008.12.016
35. Kulkov S.S., Bakulin A.V., Kulkova S.E. Effect of Boron on the Hydrogen-Induced Grain Boundary Embrittlement in α -Fe. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, Vol. 43, Iss. 3, pp. 1909–1925. DOI:10.1016/j.ijhydene.2017.11.083
36. Wachowicz E., Ossowski T., Kiejna A.. Cohesive and Magnetic Properties of Grain Boundaries in BCC Fe With Cr Additions. *Physical Review B*, 2010, Vol. 81, Iss. 9, P. 094104. DOI:10.1103/PhysRevB.81.094104
37. Yamaguchi M. First-Principles Study on the Grain Boundary Embrittlement of Metals by Solute Segregation: Part I. Iron (Fe)-solute (B, C, P, and S) Systems. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2011, Vol. 42, pp. 319–329. DOI:10.1007/s11661-010-0381-5
38. Vlack L.H.V. Intergranular Energy of Iron and Some Iron Alloys, *Transactions. American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers*, 1951, Vol. 191, pp. 251–259.
39. Roth T.A. The Surface and Grain Boundary Energies of Iron, Cobalt and Nickel. *Materials Science and Engineering*, 1975, vol. 18, no. 2, pp. 183–192. DOI: 10.1016/0025-5416(75)90168-8
40. Lejček P., Hofmann S. Interstitial And Substitutional Solute Segregation at Individual Grain Boundaries of α -Iron: Data Revisited. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2016, Vol. 28, no. 6, p. 064001. DOI:10.1088/0953-8984/28/6/064001
41. Lejček P., Adamek J., Hofmann S. Anisotropy of Grain Boundary Segregation in $\Sigma=5$ Bicrystals of α -Iron. *Surface science*, 1992, Vol. 264, pp. 449–454. DOI:10.1016/0039-6028(92)90201-G
42. Hatcher N., Madsen G. K. H., Drautz R. Parameterized Electronic Description of Carbon Cohesion in Iron Grain Boundaries. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2014, Vol. 26, no. 14, p. 145502. DOI:10.1088/0953-8984/26/14/145502
43. Tahir A. M., Janisch R., Hartmaier A. Hydrogen Embrittlement of a Carbon Segregated $\Sigma 5(310)[001]$ Symmetrical Tilt Grain Boundary in α -Fe. *Material Science and Engineering A*, 2014, Vol. 612, pp. 462–467. DOI:10.1016/j.msea.2014.06.071

44. Abiko K., Suzuki S., Kimura H. Effect of carbon on the toughness and fracture mode of Fe–P alloys. *Transactions of the Japan Institute of Metals*, 1982, Vol. 23, Iss. 2, pp. 43–52. DOI: 10.2320/matertrans1960.23.43
45. Suzuki S., Tanii S., Abiko K., Kimura H. Site Competition between Sulfur and Carbon at Grain Boundaries and their Effects on the Grain Boundary Cohesion in Iron. *Metallurgical Transactions A*, 1987, Vol. 18, pp. 1109–1115. DOI:10.1007/BF02668560
46. Wang J., Janisch R., Madsen G.K.H., Drautz R. First-Principles Study of Carbon Segregation in BCC Iron Symmetrical Tilt Grain Boundaries. *Acta Materialia*, 2016, Vol. 115, pp. 259–268. DOI:10.1016/j.actamat.2016.04.058
47. Ono K., Meshii M. Hydrogen Detrapping from Grain Boundaries and Dislocations in High Purity Iron. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1992, Vol. 40, Iss. 6, pp. 1357–1364. DOI: 10.1016/0956-7151(92)90436-I
48. Lejček P. *Grain boundary segregation in metals*, Springer, Berlin, Heidelberg, 2010, 239 p. DOI:10.1007/978-3-642-12505-8
49. Rajagopalan M., Tschopp M.A., Solanki K.N. Grain Boundary Segregation of Interstitial and Substitutional Impurity Atoms in Alpha-Iron. *Jom*, 2014, Vol. 66, pp. 129–138. DOI:10.1007/s11837-013-0807-9
50. He X., Wu S., Jia L., Wang D., Dou Y., Yang W. Grain Boundary Segregation of Substitutional Solutes/Impurities and Grain Boundary Decohesion in BCC Fe. *Energy Procedia*, 2017, Vol. 127, pp. 377–386. DOI:10.1016/j.egypro.2017.08.090
51. Malerba L., Ackland G.J., Becquart C.S., Bonny G., Domain C., Dudarev S.L., Fu C.-C., Hepburn D., Marinica M.C., Olsson P., Pasianot R.C., Raulot J.M., Soisson F., Terentyev D., Vincent E., Willaime F. Ab initio calculations and interatomic potentials for iron and iron alloys: Achievements within the Perfect Project. *Journal of Nuclear Materials*, 2010, Vol. 406, Iss. 1, pp. 7–18. DOI:10.1016/j.jnucmat.2010.05.016

Received September 29, 2021

Information about the authors

Verkhovyykh Anastasiia Vladimirovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Physics of Nanoscale System Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: avverkhovyykh@susu.ru

Mirzoev Alexander Aminulaevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Senior Staff Scientist, Professor Physics of Nanoscale System Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1527-371X>, e-mail: mirzoevaa@susu.ru

Dyuryagina Natalia Sergeevna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Physics of Nanoscale System Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: diuriaginans@susu.ru

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 4, pp. 57–68

УДК 538.915

DOI: 10.14529/mmph210407

AB INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ P, H, C, S С ГРАНИЦАМИ ЗЕРЕН В α -ЖЕЛЕЗЕ

А.В. Верховых, А.А. Мирзоев, Н.С. Дюрягина

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

E-mail: diuriaginans@susu.ru

Представлены результаты моделирования из первых принципов взаимодействия неметаллических примесей внедрения (H, C) и замещения (P, S) с границами зерен в α -железе. Моделирование проводилось в рамках теории функционала плотности (DFT) полнопотенциальным мето-

дом линейризованных присоединенных плоских волн (FP LAPW) с учетом обобщенного градиентного приближения (GGA'96) в программном пакете WIEN2k. Были изучены три межзеренные границы наклона $\Sigma 3(111)$, $\Sigma 5(210)$ и $\Sigma 5(310)$. Построение суперячеек границ зерен наклона осуществлялось с помощью модели решетки совпадающих узлов. На значения энергетических характеристик различных границ зерен с примесями влияет ряд факторов, а именно, объем многогранника Вороного, приходящийся на одну примесь, магнитные моменты и симметрия окружающей матрицы. Результаты показывают, что для симметричных границ зерен $\Sigma 3(111)$ и $\Sigma 5(310)$ фосфор, водород и сера являются охрупчивателями, в то время как углерод усиливает межатомные связи на границе зерна, что хорошо согласуется с имеющимися в литературе данными. В случае асимметричной границы зерна $\Sigma 5(210)$ фосфор и водород также ослабляют связи на границе зерна, а сера усиливает. В первую очередь, это связано с геометрией окружающей матрицы. Магнитные моменты на атомах примесей очень малы и в большинстве случаев антипараллельны магнитным моментам на соседних атомах Fe.

Ключевые слова: *ab initio* моделирование; ОЦК-железо; водород; фосфор; сера; углерод; граница зерна.

Литература

1. Jolly, P. Discussion of "The Elimination of Oxygen-Induced Intergranular Brittleness in Iron by Addition of Scavengers" / P. Jolly // Metallurgical and Materials Transactions B. – 1971. – Vol. 2, Iss. 1. – pp. 341–342.
2. Ramasubramanian, P.V. An Investigation of Grain-Boundary Embrittlement in Fe-P, Fe-P-S, and Fe-Sb-S Alloys / P.V. Ramasubramanian, D.F. Stein // Metallurgical Transactions. – 1973. – Vol. 4, Iss. 7. – P. 1735–1742.
3. Pichard, C. The Influence of Oxygen and Sulfur on the Intergranular Brittleness of Iron / C. Pichard, J. Rieu, C. Goux // Metallurgical Transactions A. – 1976. – Vol. 7, Iss. 12. – P. 1811–1815.
4. Messmer, R.P. The Role of Chemical Bonding in Grain Boundary Embrittlement / R.P. Messmer, C.L. Briant // Acta Metallurgica. – 1982. – Vol. 30. – P. 457–467.
5. Haydock, R. The Mobility of Bonds at Metal Surfaces (Heterogeneous Catalysis). Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1981. – Vol. 14. – P. 3807.
6. Bismuth-Induced Embrittlement of Copper Grain Boundaries / G. Duscher, M.F. Chisholm, U. Alber, M. Rühle // Nature materials. – 2004. – Vol. 3. – P. 621. DOI:10.1038/nmat1191
7. Schweinfest, R. Bismuth Embrittlement of Copper is an Atomic Size Effect / R. Schweinfest, A.T. Paxton, M.W. Finnis // Nature. – 2004. – Vol. 432. – P. 1008–1011.
8. Krasko G.L. Effect of Boron, Carbon, Phosphorus and Sulphur on Intergranular Cohesion in Iron / G.L. Krasko, G.B. Olson // Solid State Communications. – 1990. – Vol. 76, Iss. 3. – P. 247–251.
9. Tang S., Freeman A. J., Olson G. B. Phosphorus-Induced Relaxation in an Iron Grain Boundary: A cluster- model study / S. Tang, A.J. Freeman, G.B. Olson // Physical Review B. – 1993. – Vol. 47, Iss. 5. – P. 2441.
10. Tang, S. Local-Density Studies of the Structure and Electronic Properties of B and S in an Fe Grain Boundary / S. Tang, A.J. Freeman, G.B. Olson // Physical Review B. – 1994. – Vol. 50, Iss. 1. – P. 1–4.
11. Wu, R. First Principles Determination of the Effects of Phosphorus and Boron on Iron Grain Boundary Cohesion / R. Wu, A.J. Freeman, A.J. Olson // Science. – 1994. – Vol. 265, no. 5170. – P. 376–380.
12. Wu, R. Nature of Phosphorus Embrittlement of the Fe $3[11\bar{0}](111)$ Grain Boundary / R. Wu, A.J. Freeman, G.B. Olson // Physical Review B. – 1994. – Vol. 50. – P. 75.
13. Wu, R. Effects of Carbon on Fe-Grain-Boundary Cohesion: First-Principles Determination / R. Wu, A.J. Freeman, G.B. Olson // Physical Review B. – 1996. – Vol. 53, Iss. 11. – P. 7504.
14. Braithwaite, J.S. Grain Boundary Impurities in Iron. / J.S. Braithwaite, P. Rez // Acta Materialia. – 2005. – Vol. 53. – P. 2715–2726.
15. Wachowicz, E. Effect of Impurities on Grain Boundary Cohesion in BCC Iron / E. Wachowicz, A. Kiejna // Computational Materials Science. – 2008. – Vol. 43. – P. 736–743.

16. Wachowicz E., Kiejna A. Effect of Impurities on Structural, Cohesive and Magnetic Properties of Grain Boundaries in α -Fe / E. Wachowicz, A. Kiejna // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2011. – Vol. 19, no. 2. – P. 025001.

17. Yamaguchi, M. Decohesion of Iron Grain Boundaries by Sulfur or Phosphorous Segregation: First-Principles Calculations / M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, H. Kaburaki // Physical Review B. – 2007. – Vol. 76, Iss. 3. – P. 035418.

18. Charge Transfer Mechanism of Hydrogen-Induced Intergranular Embrittlement of Iron / L. Zhong, R. Wu, A.J. Freeman, G.B. Olson // Physical Review B. – 2000. – Vol. 62. – P. 13938.

19. Effect of Alloying Additions on the Hydrogen-Induced Grain Boundary Embrittlement in Iron / Z.X. Tian, J.X. Yan, W. Hao, W. Xiao // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2011. – Vol. 23. – P. 015501.

20. Hydrogen-Grain Boundary Interaction in Fe, Fe-C, and Fe-N systems / R. Matsumoto, M. Riku, S. Taketomi, N. Miyazaki // Progress in Nuclear Science and Technology. – 2010. – Vol. 2. – P. 9–15.

21. Momida, H. Hydrogen-Enhanced Vacancy Embrittlement of Grain Boundaries in Iron / H. Momida, Y. Asari, Y. Nakamura *et al.* // Physical Review B. – 2013. – Vol. 88, Iss. 14. – P. 144107.

22. First-principles study on the interaction of H interstitials with grain boundaries in α - and γ -Fe / Y.A. Du, L. Ismer, J. Rogal *et al.* // Physical Review B. – 2011. – Vol. 84, Iss. 14. – P. 144121.

23. Gesari, S.B. The Electronic Structure and Bonding of H Pairs at $\Sigma = 5$ BCC Fe Grain Boundary / S.B. Gesari, M.E. Pronsato, A. Juan // Surface Science. – 2002. – Vol. 187, Iss. 3-4. – P. 207–217.

24. Tahir, A. M. Hydrogen embrittlement of a carbon segregated $\Sigma 5(310)[001]$ symmetrical tilt grain boundary in α -Fe / A. M. Tahir, R. Janisch, A. Hartmaier // Material Science and Engineering A. – 2014. – Vol. 612. – P. 462467.

25. Gesari, S.B. Grain boundary segregation of hydrogen in bcc iron: electronic structure / S.B. Gesari, M.E. Pronsato, A. Juan // Surface Review and Letters. – 2002. Vol. 9, Pp. 1437–1442.

26. Blaha, P. Wien2k. User's Guide / P. Blaha. – http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks/usersguide.pdf. – 2014.

27. Singh, D.J. Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method / D.J. Singh, L. Nordstrom // Springer, New York, 2006. – 136 p.

28. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Physical review letters. – 1996. – Vol. 77, no. 18. – P. 3865–3868.

29. Sutton, A.P. Interfaces in Crystalline Materials / A.P. Sutton, R.W. Balluffi. – Oxford University Press: New York, 1995. – 819 P.

30. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special Points for Brillouin-Zone Integrations / H.J. Monkhorst, J.D. Pack // Physical Review B. – 1976. – Vol. 13, Iss. 12. – P. 5188.

31. Эмсли, Дж. Элементы / Дж. Эмсли. – М.: Мир, 1993. – 255 с.

32. Rice, J.R. Embrittlement of Interfaces by Solute Segregation / J.R. Rice, J.-S. Wang // Materials Science and Engineering A – structural Materials Properties Microstructure and Processing. – 1989. – Vol. 107. – P. 23–40.

33. Ab initio Modelling of the Interaction of H Interstitials with Grain Boundaries in BCC Fe / D.A. Mirzaev, A.A. Mirzoev, K.Yu. Okishev, A.V. Verkhovyykh // Molecular Physics. – 2016. – Vol. 114, Iss. 9. – P. 1502–1512.

34. Multiscale Modelling of Bi-Crystal Grain Boundaries in BCC Iron / N. Gao, C.-C. Fu, M. Samaras *et al.* // Journal of Nuclear Materials. – 2008. – Vol. 385, Iss. 2. – pp. 262–267.

35. Kulkov, S.S. Effect of Boron on the Hydrogen-Induced Grain Boundary Embrittlement in α -Fe / S.S. Kulkov, A.V. Bakulin, S.E. Kulkova // International Journal of Hydrogen Energy. – 2017. – Vol. 43, Iss. 3. – pp. 1909–1925.

36. Wachowicz, E. Cohesive and Magnetic Properties of Grain Boundaries in BCC Fe with Cr Additions / E. Wachowicz, T. Ossowski, A. Kiejna // Physical Review B. – 2010. – Vol. 81, Iss. 9. – P. 094104.

37. Yamaguchi, M. First-Principles Study on the Grain Boundary Embrittlement of Metals by Solute Segregation: Part I. Iron (Fe)-Solute (B, C, P, and S) Systems / M. Yamaguchi // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2011. – Vol. 42. – P. 319–329.

38. Vlcek L.H.V. Intergranular Energy of Iron and Some Iron Alloys / L.H.V. Vlcek // Transactions. American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers. – 1951. – Vol. 191. – P. 251–259.
39. Roth, T.A. The Surface and Grain Boundary Energies of Iron, Cobalt and Nickel / T.A. Roth // Materials Science and Engineering. – 1975. – Vol. 18, no. 2. – P. 183–192.
40. Lejček, P. Interstitial and Substitutional Solute Segregation at Individual Grain Boundaries of α -Iron: Data Revisited / P. Lejček, S. Hofmann // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2016. – Vol. 28. – P. 064001.
41. Lejček, P. Anisotropy of Grain Boundary Segregation In $\Sigma=5$ Bicrystals of α -Iron / P. Lejček, J. Adamek, S. Hofmann // Surface science. – 1992. – Vol. 264. – P. 449–454.
42. Hatcher, N. Parameterized Electronic Description of Carbon Cohesion in Iron Grain Boundaries / N. Hatcher, G.K.H. Madsen, R. Drautz // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2014. – Vol. 26, no. 14. – P. 145502.
43. Tahir, A.M. Hydrogen Embrittlement of a Carbon Segregated $\Sigma5(310)[001]$ Symmetrical Tilt Grain Boundary in α -Fe / A.M. Tahir, R. Janisch, A. Hartmaier // Material Science and Engineering A. – 2014. – Vol. 612. – P. 462–467.
44. Abiko, K. Effect of Carbon on the Toughness and Fracture Mode of Fe–P Alloys / K. Abiko, S. Suzuki, H. Kimura // Transactions of the Japan Institute of Metals. – 1982. – Vol. 23, Iss. 2. – P. 43–52.
45. Site Competition Between Sulfur and Carbon at Grain Boundaries and Their Effects on the Grain Boundary Cohesion in Iron / S. Suzuki, S. Tanii, K. Abiko, H. Kimura // Metallurgical Transactions A. – 1987. – Vol. 18. – P. 1109–1115.
46. First-Principles Study of Carbon Segregation in BCC Iron Symmetrical Tilt Grain Boundaries / J. Wang, R. Janisch, G.K.H. Madsen, R. Drautz // Acta Materialia. – 2016. – Vol. 115. – pp. 259–268.
47. Ono K., Meshii M. Hydrogen Detrapping from Grain Boundaries and Dislocations in High Purity Iron / K. Ono, M. Meshii // Acta Metallurgica et Materialia. – 1992. – Vol. 40, Iss. 6. – P. 1357–1364.
48. Lejček, P. Grain Boundary Segregation in Metals / P. Lejček. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2010. – 239 p.
49. Rajagopalan, M. Grain Boundary Segregation of Interstitial and Substitutional Impurity Atoms in Alpha-Iron / M. Rajagopalan, M.A. Tschopp, K.N. Solanki // Jom. – 2014. – Vol. 66. – P. 129–138.
50. Grain Boundary Segregation of Substitutional Solutes/Impurities and Grain Boundary Decohesion in BCC Fe / X. He, S. Wu, L. Jia // Energy Procedia. – 2017. – Vol. 127. – P. 377–386.
51. *Ab initio* Calculations and Interatomic Potentials for Iron and Iron Alloys: Achievements within the Perfect Project / L. Malerba, G.J. Ackland, C.S. Becquart *et al.* // Journal of Nuclear Materials. – 2010. – Vol. 406, Iss. 1. – P. 7–18.

Поступила в редакцию 29 сентября 2021 г.

Сведения об авторах

Верховых Анастасия Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: avverkhovuykh@susu.ru

Мирзоев Александр Аминулаевич – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, профессор кафедры физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1527-371X>, e-mail: mirzoevaa@susu.ru

Дюрягина Наталья Сергеевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: diuriaginans@susu.ru

ДИФФУЗИОННЫЙ ПЕРЕНОС В ШАРООБРАЗНОЙ ГРАНУЛЕ С ИДЕАЛЬНЫМ КОНТАКТОМ ДВУХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ РАЗНОПРОНИЦАЕМЫХ ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ ОБЛАСТЕЙ ПРИ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ ПЕРВОГО РОДА

Д.А. Коновалов, А.В. Рязских, А.А. Хвостов, Е.А. Соболева

Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Российская Федерация

E-mail: dmikonov@yandex.ru, ryzhskihav@bk.ru.

Нестационарный перенос вещества по диффузионному механизму в осесимметричной двухслойной шарообразной грануле с разными проницаемостями при идеальном контакте представлен системой параболических уравнений в формате 1-D сферических координат. На внешней поверхности гранулы поддерживается постоянная концентрация диффундирующей среды, а на границе сопряжения слоев применено граничное условие четвертого рода. Попытка решить аналогичную задачу по постановке методом одностороннего полуограниченного интегрального преобразования Лапласа не приводит к физически обоснованному решению, т. к. для малых значений времени решение неустойчиво и не удовлетворяет критерию сходимости с увеличением числа членов получающегося в результате ряда. Однако если применить для интегрирования исходной системы классический метод разделения переменных, то полученное решение, оказывается, удовлетворяет каждому уравнению системы и тождественно выполняет начально-краевые условия. Исследуемая задача имеет важное практическое приложение для оценки кинетического коэффициента постулата Глюкауфа скорости переноса однофазной среды в бидисперсном гранулированном материале в приближении гипотетической линейной модели с сосредоточенными параметрами.

Ключевые слова: двухслойная шарообразная гранула; диффузия; граничные условия четвертого рода; аналитическое решение.

Введение. Аппараты с зернистыми слоями широко распространены в различных предметно-ориентированных областях для проведения массообменных процессов, например, таких как адсорбция, катализ, рекуперация отработанного тепла из высокотемпературных гранулированных материалов, очистка мембранных биореакторов и т. д. [1]. Кинетику этих процессов определяют явления переноса в масштабе дисперсных частиц, имеющих, как правило, неоднородную структуру [2]. Использование осредненных по объему (массе) гранул параметров, характеризующих скорость переноса без учета их внутренней структуры, упрощает математическую формулировку путем сведения ее к классической постановке (постулат Глюкауфа) [3], но получаемые при этом результаты не вполне согласуются с экспериментальными данными [4]. Такой подход может быть использован безальтернативно, если распределение неоднородностей в грануле неизвестно заранее. В практически важных случаях, таких как адсорбция в неподвижном, движущемся или псевдосжиженном слое гранул адсорбента с бидисперсной структурой, неоднородность заранее задана [5], что существенно облегчает идентификацию локальных полей концентрации диффундирующего вещества. В этой связи заслуживает внимания постановка задачи в формате 1-D в сферической системе координат об охлаждении системы двух сфер, одна из которых вложена осесимметрично в другую [6], причем структура математической модели аналогична формулировке модели переноса вещества диффузией с идеальным контактом на границе сопряжения областей из-за одинакового математического представления законов Фурье и Фика:

$$\frac{\partial c_1(r, \tau)}{\partial \tau} = \frac{D_1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial c_1(r, \tau)}{\partial r} \right], \quad 0 \leq r < r_1, \quad \tau > 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_2(r, \tau)}{\partial \tau} = \frac{D_2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial c_2(r, \tau)}{\partial r} \right], \quad r_1 \leq r < r_2, \quad \tau > 0; \quad (2)$$

$$c_1(r, 0) = c_2(r, 0) = c_0 = \text{const}; \quad (3)$$

$$c_1(r_1, \tau) = c_2(r_1, \tau); \quad (4)$$

$$D_1 \frac{\partial c_1(r_1, \tau)}{\partial r} = D_2 \frac{\partial c_2(r_1, \tau)}{\partial r}; \quad (5)$$

$$c_2(r_2, \tau) = c_s = \text{const}; \quad (6)$$

$$c_1(0, \tau) \neq \infty, \quad (7)$$

где τ – время; r – радиальная координата; $r_{1,2}$ – радиусы областей; $c_{1,2}$ и $D_{1,2}$ – локальные концентрации и коэффициенты диффузии в грануле при $0 \leq r \leq r_1$ и $r_1 \leq r < r_2$ соответственно. Явные выражения $c_{1,2}(r, \tau)$, полученные, как и в [6], методом интегрального преобразования Лапласа, тождественно удовлетворяют уравнениям системы и граничным условиям, однако начальные условия не выполняются, поэтому они справедливы для $\tau \gg 0$.

В связи с этим целью исследования является решение системы (1)–(7), справедливое во всем диапазоне изменения τ и применение его для оценки кинетического параметра в постулате Глюкауфа о скорости переноса однокомпонентной среды в линейной модели с сосредоточенными параметрами с учетом внутренней структуры гранулы.

Решение. Система (1)–(7) представлена в безразмерной форме:

$$\frac{\partial C_1(R, \theta)}{\partial \theta} = \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left[R^2 \frac{\partial C_1(R, \theta)}{\partial R} \right], \quad 0 \leq R < 1, \quad \theta > 0; \quad (8)$$

$$\frac{\partial C_2(R, \theta)}{\partial \theta} = \frac{D}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left[R^2 \frac{\partial C_2(R, \theta)}{\partial R} \right], \quad 1 \leq R < \eta, \quad \theta > 0; \quad (9)$$

$$C_1(R, 0) = C_2(R, 0) = 1; \quad (10)$$

$$C_1(1, \theta) = C_2(1, \theta); \quad (11)$$

$$\frac{\partial C_1(1, \theta)}{\partial R} = D \frac{\partial C_2(1, \theta)}{\partial R}; \quad (12)$$

$$C_2(\eta, \theta) = 0; \quad (13)$$

$$C_1(0, \theta) \neq \infty \quad (14)$$

с помощью относительных переменных: $\theta = \tau D_1 / r_1^2$; $R = r / r_1$; $D = D_2 / D_1$; $C_{1,2}(R, \theta) = [c_{1,2}(r, \tau) - c_s] / (c_0 - c_s)$; $\eta = r_2 / r_1$. Следуя адаптированному методу разделения переменных Фурье к подобным постановкам [7], структура решения (8) и (9) выбрана в виде

$$C_{1,2}(R, \theta) = \Psi_{1,2}(R) \cdot \Gamma(\theta), \quad (15)$$

где неизвестные функции $\Psi_{1,2}(R)$ и $\Gamma(\theta)$, как следует из (8)–(15), определяются соответственно из решения краевой задачи:

$$\frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} \left[R^2 \frac{d\Psi_1(R)}{dR} \right] + \mu^2 \Psi_1(R) = 0; \quad (16)$$

$$\frac{D}{R^2} \frac{d}{dR} \left[R^2 \frac{d\Psi_2(R)}{dR} \right] + \mu^2 \Psi_2(R) = 0; \quad (17)$$

$$\Psi_1(1) = \Psi_2(1); \quad (18)$$

$$\frac{d\Psi_1(1)}{dR} = D \frac{d\Psi_2(1)}{dR}; \quad (19)$$

$$\Psi_2(\eta) = 0; \quad (20)$$

$$\Psi_1(0) \neq \infty \quad (21)$$

и задачи Коши

$$\frac{d\Gamma(\theta)}{d\theta} + \mu^2\Gamma(\theta) = 0, \quad (22)$$

$$\Gamma(0) = 1, \quad (23)$$

где μ – собственные значения.

Общие решения (16), (17):

$$\Psi_1(R) = A_1 \sin(\mu R)/R + B_1 \cos(\mu R)/R; \quad (24)$$

$$\Psi_2(R) = A_2 \sin(\mu R/\sqrt{D})/R + B_2 \cos(\mu R/\sqrt{D})/R, \quad (25)$$

причем в силу (21) $B_1 \equiv 0$, а остальные константы интегрирования в соответствии с (18) – (20) должны удовлетворять матричному уравнению

$$[\Lambda][X]^T = [0]^T, \quad (26)$$

$$[\Lambda] = \begin{bmatrix} \sin \mu & -\sin\left(\frac{\mu}{\sqrt{D}}\right) & -\cos\left(\frac{\mu}{\sqrt{D}}\right) \\ \frac{-\sin \mu + \mu \cos \mu}{D} & \sin\left(\frac{\mu}{\sqrt{D}}\right) - \frac{\mu}{\sqrt{D}} \cos\left(\frac{\mu}{\sqrt{D}}\right) & \cos\left(\frac{\mu}{\sqrt{D}}\right) + \frac{\mu}{\sqrt{D}} \sin\left(\frac{\mu}{\sqrt{D}}\right) \\ 0 & \frac{1}{\eta} \sin\left(\frac{\mu\eta}{\sqrt{D}}\right) & \frac{1}{\eta} \cos\left(\frac{\mu\eta}{\sqrt{D}}\right) \end{bmatrix},$$

$$[X] = [A_1, A_2, B_2]; [0] = [0, 0, 0].$$

Собственные значения μ найдены из уравнения $\det[\Lambda] = 0$, которое имеет компонентный вид

$$\left[\left(1 - \frac{1}{D}\right) \sin \mu + \frac{\mu}{D} \cos \mu \right] \sin \left[(1 - \eta) \frac{\mu}{\sqrt{D}} \right] - \frac{\mu}{\sqrt{D}} \sin \mu \cos \left[(1 - \eta) \frac{\mu}{\sqrt{D}} \right] = 0. \quad (27)$$

Положив, например, $A_1 = 1$, из (26) определены остальные постоянные:

$$A_2 = \sin \mu \sin \left(\frac{\mu}{\sqrt{D}} \right) + \frac{\sqrt{D}}{\mu} \left(1 - \frac{1}{D} \right) \sin \mu \cos \left(\frac{\mu}{\sqrt{D}} \right) + \frac{1}{\sqrt{D}} \cos \mu \cos \left(\frac{\mu}{\sqrt{D}} \right); \quad (28)$$

$$B_2 = -\frac{\sqrt{D}}{\mu} \left(1 - \frac{1}{D} \right) \sin \mu \sin \left(\frac{\mu}{\sqrt{D}} \right) - \frac{1}{\sqrt{D}} \cos \mu \sin \left(\frac{\mu}{\sqrt{D}} \right) + \sin \mu \cos \left(\frac{\mu}{\sqrt{D}} \right). \quad (29)$$

Из (22), (23) следует, что $\Gamma(\theta) = \exp(-\mu^2\theta)$, и тогда

$$C_i(R, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Psi_i(R)}{N_n} \left[\int_0^1 \xi^2 \Psi_1(\xi) d\xi + \int_1^{\eta} \xi^2 \Psi_2(\xi) d\xi \right] \exp(-\mu_n^2\theta), \quad i = 1, 2, \quad (30)$$

где

$$N_n = \int_0^1 \xi^2 \Psi_1^2(\xi) d\xi + \int_1^{\eta} \xi^2 \Psi_2^2(\xi) d\xi,$$

μ_n – корни (27).

Детализация (30) с учетом (24), (25) и (28), (29) и выбором направления потока вещества

$$Q_i(R, \theta) = 1 - C_i(R, \theta) \quad (31)$$

позволила записать решение:

$$Q_1(R, \theta) = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \left[F(\mu_n, D, \eta) + \Phi(\mu_n, D, \eta) \right] \sin(\mu_n R) \cdot \exp(-\mu_n^2\theta) / [R\Omega(\mu_n, D, \eta)]; \quad (32)$$

$$Q_2(R, \theta) = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \left[F(\mu_n, D, \eta) + \Phi(\mu_n, D, \eta) \right] \left[A_2 \sin\left(\frac{\mu_n R}{\sqrt{D}}\right) + \right.$$

$$+ B_2 \cos\left(\frac{\mu_n R}{\sqrt{D}}\right) \cdot \exp(-\mu_n^2 \theta) / [R \Omega(\mu_n, D, \eta)], \quad (33)$$

где

$$F(\mu_n, D, \eta) = -\frac{\mu_n \cos \mu_n - \sin \mu_n}{\mu_n^2} + A_2 \left[-\cos\left(\frac{\mu_n \eta}{\sqrt{D}}\right) \mu_n \eta D + \right. \\ \left. + \cos\left(\frac{\mu_n}{\sqrt{D}}\right) \mu_n D + D \sqrt{D} \sin\left(\frac{\mu_n \eta}{\sqrt{D}}\right) - D \sqrt{D} \sin\left(\frac{\mu_n}{\sqrt{D}}\right) \right] / (\mu_n^2 \sqrt{D}); \\ \Phi(\mu_n, D, \eta) = B_2 \left[\sin\left(\frac{\mu_n \eta}{\sqrt{D}}\right) \mu_n D \eta - \sin\left(\frac{\mu_n}{\sqrt{D}}\right) D \mu_n + D \sqrt{D} \cos\left(\frac{\mu_n \eta}{\sqrt{D}}\right) - D \sqrt{D} \cos\left(\frac{\mu_n}{\sqrt{D}}\right) \right] / (\mu_n^2 \sqrt{D}); \\ \Omega(\mu_n, D, \eta) = \left\{ \mu_n - \frac{1}{2} \cos(2\mu_n) + (B_2^2 - A_2^2) \left[\frac{1}{2} \sqrt{D} \sin\left(\frac{2\mu_n \eta}{\sqrt{D}}\right) - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2} \sqrt{D} \sin\left(\frac{2\mu_n}{\sqrt{D}}\right) + \mu_n (1 - \eta) \right] - 2A_2 B_2 \left[\cos^2\left(\frac{\mu_n \eta}{\sqrt{D}}\right) - \cos^2\left(\frac{\mu_n}{\sqrt{D}}\right) \right] \right\} / (2\mu_n).$$

Анализ. Если $(1 - \eta) / \sqrt{D} = p/q$, где p, q – целые, то уравнение (27) имеет дополнительные корни $\lambda_k = q\pi k$, $k = 1, \infty$. Тем не менее, будем считать, что наступление такого события в практических расчетах маловероятно.

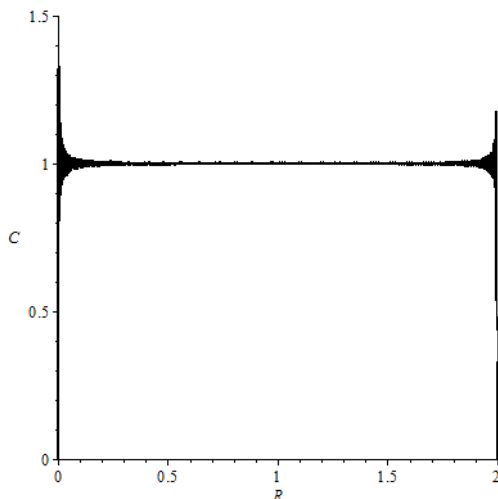


Рис. 1. Выполнение начальных условий при $D=3$ и $\eta=2$

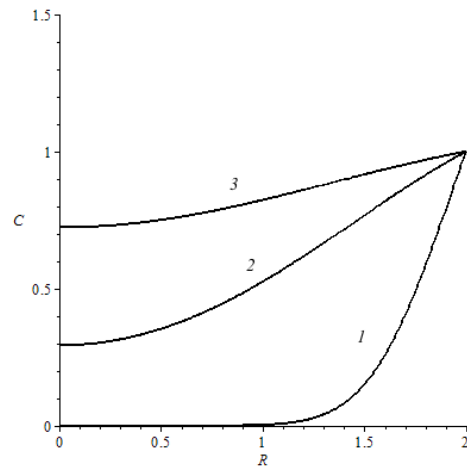


Рис. 2. Профили концентрации при $D=3$, $\eta=2$ и различных θ : 1 – 0,05; 2 – 0,4; 3 – 0,8

Установлено, что начальные условия удовлетворены для любого набора $D > 0$ и $\eta > 1$ (в качестве примера рис. 1). Если $D=1$ (однородный по проницаемости шар), то для любого значения η развитие профилей концентраций в одни и те же моменты времени остается одинаковым (рис. 2). При $D \ll 1$ проникновение вещества лимитируется проницаемостью области, примыкающей к поверхности гранулы (рис. 3, а), а для $D > 1$ наоборот – лимитирует процесс поглощения область, находящаяся в ядре гранулы (рис. 3, б). Следует заметить, что скорость процесса поглощения существенно выше при $D > 1$. Уменьшение радиуса контакта областей с разными проницаемостями уменьшает скорость поглощения вещества гранулой (рис. 3, с, d).

Воспользуемся полученным решением (32), (33) для оценки параметра k линейной модели массообмена с сосредоточенными параметрами

$$\frac{d\bar{Q}(\theta)}{d\theta} = K [1 - \bar{Q}(\theta)], \quad (34)$$

где $\bar{Q}(\theta) = \frac{1}{\eta^3} \bar{Q}_1(\theta) + \left(1 - \frac{1}{\eta^3}\right) \bar{Q}_2(\theta)$; $\bar{Q}_1(\theta) = 3 \int_0^1 R^2 Q_1(R, \theta) dR$; $\bar{Q}_2(\theta) = \frac{3}{\eta^3 - 1} \int_1^\eta R^2 Q_2(R, \theta) dR$;

$$K = kr_1^2 / D_1.$$

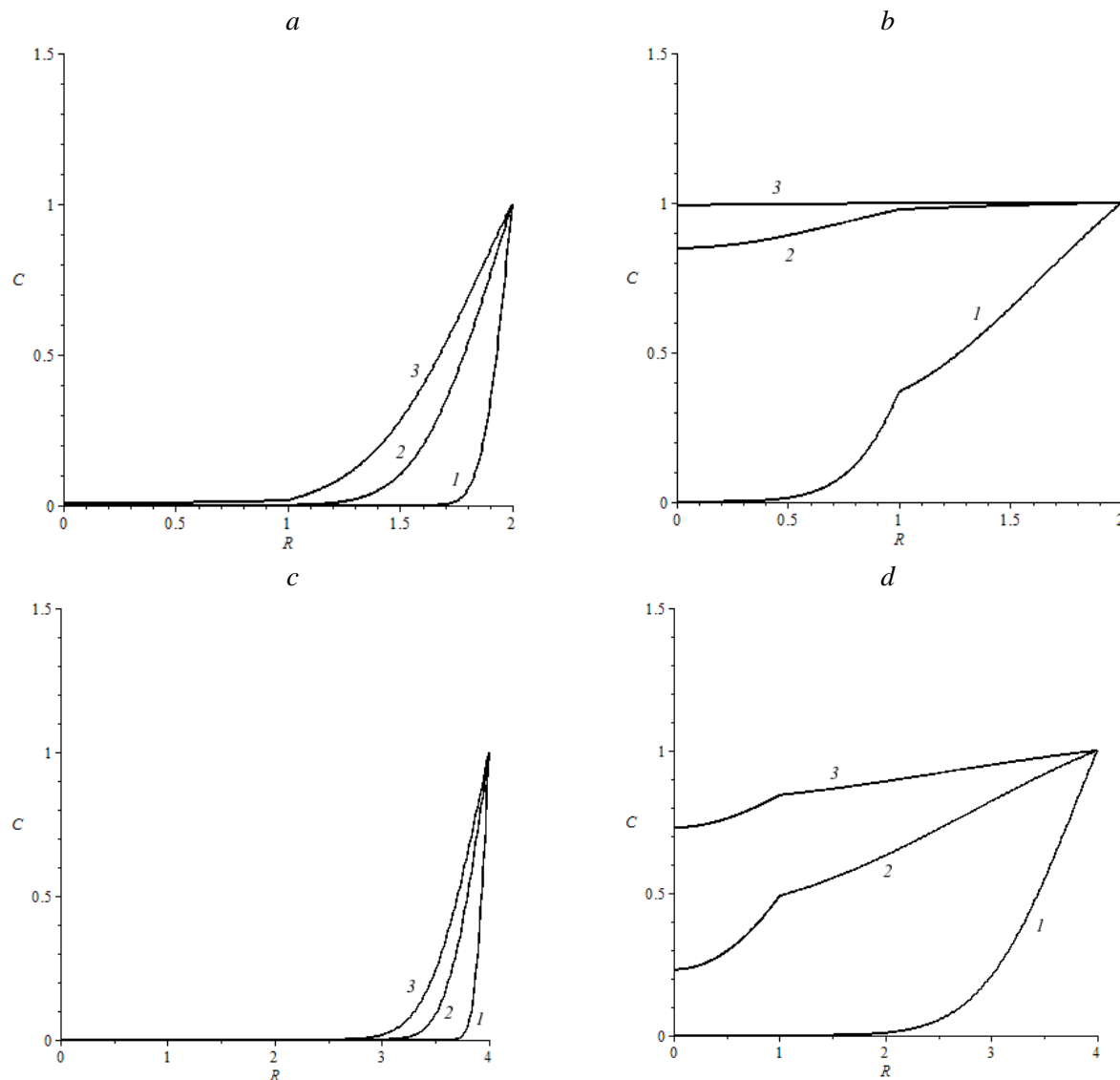


Рис. 3. Профили концентраций при: а – $D=0,1$, $\eta=2$; б – $D=5$, $\eta=2$; в – $D=0,1$, $\eta=4$; д – $D=5$, $\eta=4$; и различных θ : 1 – 0,05; 2 – 0,4; 3 – 0,8

В выражении безразмерной среднеобъемной концентрации

$$\begin{aligned} \bar{Q}(\theta) = & 1 - \frac{3}{\eta^3} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{\mu_n \cos \mu_n - \sin \mu_n}{\mu_n^2} + \frac{A_2}{\mu_n^2 \sqrt{D}} \left[-\mu_n D \eta \cos \left(\frac{\mu_n \eta}{\sqrt{D}} \right) + \right. \right. \\ & + \mu_n D \cos \left(\frac{\mu_n}{\sqrt{D}} \right) + D \sqrt{D} \sin \left(\frac{\mu_n \eta}{\sqrt{D}} \right) - D \sqrt{D} \sin \left(\frac{\mu_n}{\sqrt{D}} \right) \left. \right] + \\ & + \frac{B_2}{\mu_n^2 \sqrt{D}} \left[\mu_n D \eta \sin \left(\frac{\mu_n \eta}{\sqrt{D}} \right) - \mu_n D \sin \left(\frac{\mu_n}{\sqrt{D}} \right) + \right. \\ & \left. + D \sqrt{D} \cos \left(\frac{\mu_n \eta}{\sqrt{D}} \right) - D \sqrt{D} \cos \left(\frac{\mu_n}{\sqrt{D}} \right) \right] \left. \right\} \cdot Z(\mu_n, D, \eta) \exp(-\mu_n^2 \theta) \end{aligned} \quad (35)$$

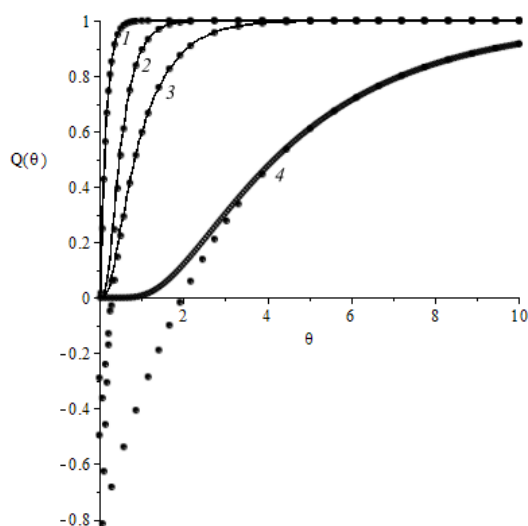


Рис. 4. Кинетика процесса поглощения вещества гранулой: 1 – $D=5$, $\eta=2$; 2 – $D=5$, $\eta=4$; 3 – $D=0,5$, $\eta=2$; 4 – $D=0,5$, $\eta=4$ (сплошные кривые – расчет по (35) с $n=200$; • – расчет по (35) с $n=1$)

можно ограничиться одним членом ряда (рис. 4), тогда из (34) и (35) при $n=1$ следует, что $K = \mu_1^2$, откуда

$$k = \frac{\mu_1^2 \eta D_1}{r_2^2}. \quad (36)$$

В случае однородности гранулы по проницаемости ($D=1$) кинетический параметр равен [8]

$$k_0 = \frac{\pi^2 D}{r_2^2}, \quad (37)$$

$\bar{D} = \frac{1}{\eta^3} D_1 + \left(1 - \frac{1}{\eta^3}\right) D_2$ – среднеобъемный коэффициент диффузии. Расчет показывает, например, для $D=3$ и $\eta=2$: $k=1,21$, $k_0=13,57$. Это означает, что допущение об однородности гранулы может вносить существенную погрешность в оценку скорости поглощения вещества без учета реальной структуры.

Заключение. Показано, что неучёт локальной неоднородности гранулы по проницаемости на основе диффузионного механизма переноса при оценке кинетического параметра линейной модели внутригранулярного массообмена в соответствии с постулатом Глюкауфа существенно завышает скорость поглощения среды, что, в свою очередь, может привести к замыканию массогабаритных характеристик аппаратов с зернистым материалом.

Литература

1. Островский, Г.М. Новый справочник химика и технолога. Процессы и аппараты химических технологий Ч. 1 / Г.М. Островский, Р.Ш. Абиёв. – СПб.: Профессional 2004. – 841 с.
2. Kyzas, G.Z. Composite nanoadsorbents / G.Z. Kyzas, A.C. Mitropoulos. – New York: Elsevier, 2019. – 385p.
3. Карслоу, Г. Теплопроводность твердых тел / Г. Карслоу, Д. Егер. – М.: Наука, 1964. – 487 с.
4. Wankat, P.A. Separation process engineering: including mass transfer analysis / P.A. Wankat. – New York: Prentice-Hall, 2012. – 939 p.
5. Tien, C. Adsorption calculations and modeling / Tien C. – Boston: Butter-Heinemann, 1994. – 288 p.
6. Лыков, А.В. Теория теплопроводности / А.В. Лыков. – М.: Высшая школа, 1967. – 599 с.
7. Ozisik, M.N. Heat conduction / M.N. Ozisik. – New York: Wiley-Interscience Publication, 1993. – 692 p.
8. Largitte, L. A review of the kinetics adsorption models and their application to the adsorption of lead by an activated carbon / L. Largitte, R. Pasquier // Chemical Engineering Research and Design. – 2016. – Vol. 109. – P. 495–504.

Поступила в редакцию 9 октября 2021 г.

Сведения об авторах

Коновалов Дмитрий Альбертович – доктор технических наук, профессор, кафедра теоретической и промышленной теплоэнергетики, Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-4435-1526>, e-mail: dmikonovvalov@yandex.ru

Рязских Александр Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра прикладной математики и механики, Воронежский государственный технический университет,

г. Воронеж, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-9823-3165>, e-mail: ryazhskihav@bk.ru

Хвостов Анатолий Анатольевич – доктор технических наук, профессор, кафедра прикладной математики и механики, Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-3836-9407>, e-mail: khvtol1974@yandex.ru

Соболева Елена Александровна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра прикладной математики и механики, Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-5860-9615>, e-mail: sobol5661@yandex.ru

DOI: 10.14529/mmph210408

DIFFUSION TRANSFER IN A SPHERICAL GRANULE WITH IDEAL CONTACT OF TWO CONSECUTIVE MULTI-PERMEABLE AXISYMMETRIC AREAS UNDER BOUNDARY CONDITIONS OF THE FIRST KIND

D.A. Konovalev, A.V. Ryazhskikh, A.A. Khvostov, E.A. Soboleva
Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
E-mail: dmikonovalev@yandex.ru, ryazhskihav@bk.ru

The unsteady transfer of a substance through diffusion mechanism in an axisymmetric two-layer spherical granule with different permeability with ideal contact is represented by a system of parabolic equations in the format of 1D spherical coordinates. On the outer surface of the granule a constant concentration of diffusing medium is maintained, and at the interface between the layers a boundary condition of the fourth kind is applied. An attempt to solve a similar problem posed by the method of one-sided semi-bounded integral Laplace transform does not lead to a physically justified solution, since for small values of time, the solution is not stable and does not satisfy the criterion of convergence with an increase in the number of terms of the resulting series. However, if the classic method of separation of variables to integrate the original system is applied, the resulting solution satisfies each equation of the system and identically fulfills the initial-boundary conditions. The examined problem has an important practical application for estimating the kinetic coefficient of the Gluckauf postulate of the transfer rate of a single-species medium in a bidisperse granular material in the approximation of a hypothetical linear model with lumped parameters.

Keyword: two-layer spherical granule; diffusion; boundary conditions of the fourth kind; analytical solution.

References

1. Ostrovskiy G.M., Abiev R.Sh. *Novyy spravochnik khimika i tekhnologa. Protsessy i apparaty khimicheskikh tekhnologiy. Ch. 1* (The new handbook of chemist and technologist. Processes and devices of chemical technologies. Part 1). Saint-Petersburg: Professional Publ., 2004, 841 p. (in Russ.).
2. Kyzas G.Z., Mitropoulos A.C. *Composite Nanoadsorbents*. New York, Elsevier, 2019, 385 p. DOI: 10.1016/C2017-0-00861-3
3. Carslaw H.S., Jaeger J.C. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford University Press, USA, 1959, 510 p.
4. Wankat P.A. *Separation Process Engineering: Including Mass Transfer Analysis*. New York, Prentice-Hall, 2012, 939 p.
5. Tien C. *Adsorption Calculations and Modeling*. Boston, Butter-Heinemann, 1994, 288 p. DOI: 10.1016/c2009-0-26911-x
6. Lykov A.V. *Teoriya Teploprovodnosti* (Theory of thermal conductivity). Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1967, 599 p. (in Russ.).
7. Ozisik M.N. *Heat Conduction*. New York, Wiley-Interscience Publication, 1993, 692 p.

8. Largitte L., Pasquier R. A Review of the Kinetics Adsorption Models and their Application to the Adsorption of Lead by an Activated Carbon. *Chem. Eng. Rec. and Design*, 2016, Vol. 109, pp. 495–504. DOI: 10.1016/J.CHERD.2016.02.006

Received October 9, 2021

Information about the authors

Konovalov Dmitriy Al'bertovich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Department of Theoretical and Heat Power Engineering, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-4435-1526>, e-mail: dmikonovalov@yandex.ru

Ryazhskikh Aleksandr Viktorovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Applied Mathematics and Mechanics, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-9823-3165>, e-mail: ryazhskihav@bk.ru

Khvostov Anatoliy Anatol'evich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Department of Applied Mathematics and Mechanics, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-3836-9407>, e-mail: khvtol1974@yandex.ru

Soboleva Elena Aleksandrovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Applied Mathematics and Mechanics, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-5860-9615>, e-mail: sobol5661@yandex.ru

МИНИМАЛЬНЫЕ ВЕРШИННЫЕ РАСШИРЕНИЯ ЦВЕТНЫХ ПОЛНЫХ ГРАФОВ

П.В. Разумовский, М.Б. Абросимов

*Саратовский государственный университет, г. Саратов, Российская Федерация
E-mail: shprotby@gmail.com, mic@rambler.ru*

Предлагаются к рассмотрению результаты поиска минимальных вершинных расширений для неориентированных цветных полных графов. Данная тематика непосредственно связана с моделированием полных отказоустойчивых технических систем с элементами различного типа в терминологии графов. Если описывать техническую систему как Σ , то ей сопоставляется некоторый граф $G(\Sigma)$, в котором вершины соответствуют элементам системы Σ , а ребра – связям между ними. Тип каждого элемента выражается в сопоставлении каждой вершине графа $G(\Sigma)$ некоторого цвета из множества цветов $F = \{1, 2, \dots, i\}$. Вершинным расширением данной системы тогда является некоторый граф $G(\Sigma)$, в котором введены избыточные вершины и при котором система, ему соответствующая, способна продолжать работу в присутствии k отказов любых её элементов. Полным графом называется тогда, когда любые две его вершины соединены ребром. Полные графы не имеют реберных расширений по определению – не существует способа добавить ребро в граф с максимальным количеством ребер. Другими словами, система, представленная полным графом, не способна противостоять отказам связей между своими элементами. Поэтому данная работа целиком посвящена исследованию минимальных вершинных расширений. Описываются условия существования минимальных вершинных расширений для цветных полных графов, приводятся схемы построения и формулы, по которым можно вычислить необходимое количество дополнительных ребер для построения минимального вершинного расширения цветного полного графа.

Ключевые слова: вершинные расширения графов; полные графы; минимальные расширения графов; расширения цветных графов; цветные графы.

Введение

При проектировании технических систем особое внимание уделяется свойству отказоустойчивости. Отказоустойчивость как свойство дискретной системы впервые была введена А. Авиженисом [1] и трактуется как обеспечение системы способностью противостоять ошибке и возможностью продолжать работу в присутствии этой ошибки.

Следующим шагом в исследовании данной проблемы стало переложение Д. Хейзом в 1976 году [2] задачи построения отказоустойчивых дискретных систем на модель, основанную на графах. В этой модели технической системе сопоставляется граф. Элементам системы соответствуют вершины графа, а связям между элементами – ребра (или дуги) графа. Отказом элемента системы является удаление вершины из графа со всеми инцидентными ребрами.

Позднее Джон Хейз в 1990-х годах совместно с американским математиком Фрэнком Харари обобщили модель на случай отказов связей между элементами [3]. При этом модель с рассматриваемым отказом элементов было предложено называть системой с вершинной отказоустойчивостью [4].

М.Б. Абросимов в своих работах [5] предложил использовать термины «вершинное расширение графа» и «реберное расширение графа» для модели вершинной отказоустойчивости и реберной отказоустойчивости соответственно.

На практике технические системы состоят из элементов различного типа. В контексте переложения подобных систем на графовую модель предлагается рассматривать расширения для

Краткие сообщения

цветных графов. В данном случае элементу системы заданного типа сопоставляется вершина с заданным на ней цветом. Таким образом, рассмотрение расширений цветных графов позволит конструировать отказоустойчивые технические системы с комбинацией элементов различных типов.

Первыми результатами исследования заданной проблемы стали алгоритмы построения всех неизоморфных цветных графов заданного количества вершин, ребер и цветов [6].

Следующим этапом в исследовании цветных графов и их расширений стал поиск решения задачи минимальных вершинных и реберных расширений для найденных неизоморфных цветных графов. Был разработан алгоритм поиска всех неизоморфных минимальных расширений для заданного цветного графа. Результаты были опубликованы в работе [7]. Цветные минимальные расширения, полученные после запуска реализации данного алгоритма, позволили проанализировать различные классы графов и найти для них общие схемы построения.

Данная работа содержит схемы построения минимальных вершинных расширений для цветных полных графов всех возможных конфигураций. Предварительные результаты для минимальных вершинных 1-расширений были представлены на конференции «Ломоносов 2021» [8]. В настоящей работе публикуются законченные результаты исследования цветных полных графов.

Определения и обозначения

Для начала дадим основные определения и обозначения, которые будут использоваться в настоящей работе. Основные понятия теории графов даны в соответствии с [9]. Определения минимальных расширений графов даны в соответствии с [5].

Определение 1. Граф $K_n = (V, \alpha)$, где $|V| = n$, называется *полным*, если у него любые две вершины смежны: $u, v \in V, u \neq v: (u, v) \in \alpha$.

Определение 2. Пусть $G = (V, \alpha)$ – граф, а $i \in \mathbb{N}$. Функция вида $f: V \rightarrow \{1, \dots, i\}$ называется *вершинной i -раскраской графа G* , а $f(v), v \in V$ – цветом вершины v . При этом граф называется *графом с цветными вершинами*, или *цветным графом*. Для таких графов вводится следующее обозначение: $G = (V, \alpha, f)$.

Введем несколько дополнительных обозначений. Пусть множество цветов будет обозначаться как $F = \{1, \dots, i\}$. Тогда цвет будет иметь обозначение $f_i \in F$. Множество $V_{f_i} = \{v \mid v \in V, f(v) = f_i\}$ – набор вершин цвета f_i . Множество $W = \{V_{f_i} \mid f_i \in F\}$ содержит все множества наборов вершин по цветам. $W^1 = \{V_{f_i} \mid V_{f_i} \in W, |V_{f_i}| = 1\}$ – множества вершин с цветами, встречающимися в графе только единожды. Тогда $W^2 = \{V_{f_i} \mid V_{f_i} \in W, |V_{f_i}| \geq 2\}$ содержит множества вершин с неуникальными цветами, то есть встречающимися два и более раз в графе.

Определение 3. Граф $G^* = (V^*, \alpha^*, f^*)$ называется *вершинным k -расширением* (где $k \in \mathbb{N}$) i -цветного графа $G = (V, \alpha, f)$, если граф G вкладывается с учетом цветов в каждый граф, получающийся из G^* удалением любых его k вершин.

Определение 4. Граф $G^* = (V^*, \alpha^*, f^*)$ называется *минимальным вершинным k -расширением* (где $k \in \mathbb{N}$) i -цветного графа $G = (V, \alpha, f)$, если выполняются следующие условия:

- 1) граф G является вершинным k -расширением цветного графа G ;
- 2) граф G содержит $|V| + ik$ вершин, то есть $|V^*| = |V| + ik$;
- 3) α^* содержит минимальную мощность среди всех графов, удовлетворяющих условиям 1) и 2).

Для удобства термин «минимальное вершинное k -расширение» будем сокращать до МВ- k Р.

Минимальные вершинные 1-расширения двухцветных полных графов

Сначала рассмотрим частный случай минимальных вершинных 1-расширений двухцветных полных графов. Данный случай позволит в дальнейшем обобщить данную модель для k -расширений многоцветных графов.

Теорема 1. Для полного графа $K_n = (V, \alpha, f)$ с $F = \{f_0, f_1\}$, $|F| = 2$, $|V_{f_0}| = 1$, $|V_{f_1}| > 1$ найдется минимальное вершинное 1-расширение с количеством дополнительных ребер, равным $2n - 1$. (1)

Схема построения минимального вершинного 1-расширения заключается в следующем:

1. Из дополнительной вершины цвета f_0 проводятся ребра во все исходные вершины цвета f_1 .
2. Из дополнительной вершины цвета f_1 проводятся ребра во все исходные вершины.

Пример графа, удовлетворяющего условиям теоремы 1, и его МВ-1Р, построенного по представленной схеме, изображен на рис. 1 и 2 соответственно.

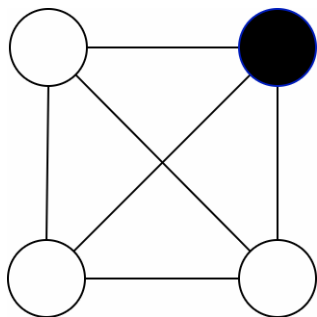


Рис. 1. Граф K_4 , удовлетворяющий условиям теоремы 1

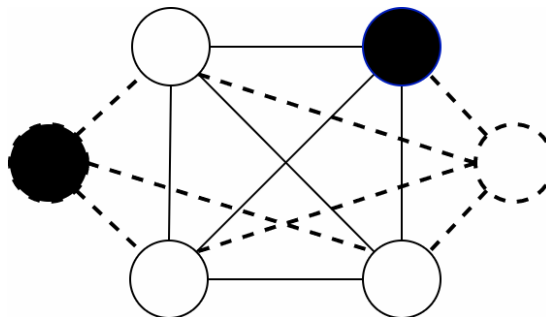


Рис. 2. МВ-1Р представленного графа K_6 . Пунктиром изображены дополнительные вершины и ребра

Доказательство. Рассмотрим оба пункта схемы по отдельности.

При удалении исходной вершины цвета f_0 все исходные вершины цвета f_1 теряют свою связь с вершинами цвета f_0 . Таким образом, исходный граф становится одноцветным. Для того чтобы восстановить исходный граф, необходимо соединить ребрами дополнительную вершину цвета f_0 со всеми исходными вершинами цвета f_1 . Количество дополнительных ребер в данном случае будет равным $n - 1$.

При отказе исходной вершины цвета f_1 граф превращается в полный двухцветный граф K_{n-1} . Чтобы вернуть возможность вложить исходный граф в расширение, необходимо соединить дополнительную вершину цвета f_1 со всеми исходными вершинами со степенью $n - 1$ (вершины, потерявшие ребро после отказа рассматриваемой вершины). С учетом условия вершинного расширения, при котором может быть удалена любая вершина f_1 , ребра будут проведены ко всем исходным вершинам. Их общее количество будет равно n .

Итоговая сумма дополнительных ребер будет $n - 1 + n = 2n - 1$.

Теорема 2. Для полного графа $K_n = (V, \alpha, f)$ с $F = \{f_0, f_1\}$, $|F| = 2$, $|V_{f_0}| > 1$, $|V_{f_1}| > 1$ найдется минимальное вершинное 1-расширение с количеством дополнительных ребер, равным: $2n$. (2)

Схема построения минимального 1-расширения:

1. Из дополнительной вершины цвета f_0 проводятся ребра во все исходные вершины.
2. Из дополнительной вершины цвета f_1 проводятся ребра во все исходные вершины.

Пример графа, удовлетворяющего условиям теоремы 2, и его МВ-1Р, построенного по представленной схеме, изображен на рис. 3 и 4 соответственно.

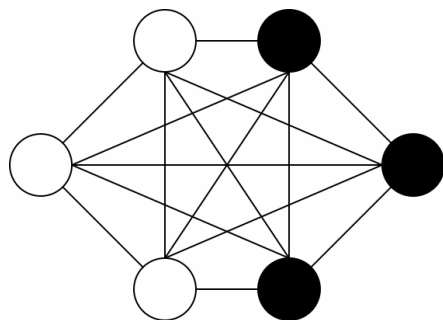


Рис. 3. Граф K_6 , удовлетворяющий условиям теоремы 2

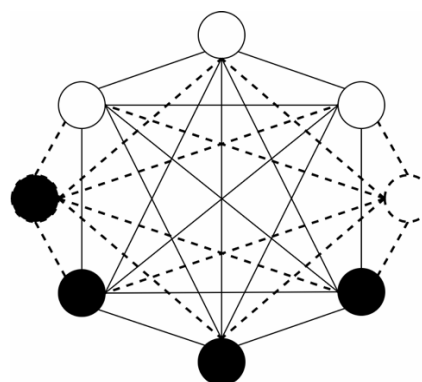


Рис. 4. МВ-1Р представленного графа K_6 . Пунктиром изображены дополнительные вершины и ребра

Доказательство. Аналогично предыдущей теореме при удалении вершины цвета f_0 $n-1$ исходных вершин теряют связь с данной вершиной, поэтому необходимо добавить $n-1$ ребер между исходными вершинами и дополнительной вершиной цвета f_0 . Поскольку отказать может любая вершина цвета f_0 , то дополнительная вершина цвета f_0 должна быть соединена со всеми исходными вершинами. При этом количество дополнительных ребер будет равно n .

Аналогичным образом дополнительная вершина цвета f_1 должна быть соединена со всеми исходными вершинами.

Итоговое количество дополнительных ребер будет равно $n + n = 2n$.

Минимальные вершинные k -расширения двухцветных полных графов

Теперь перейдем к общему случаю минимальных вершинных k -расширений двухцветных полных графов. Данные теоремы дадут понимание, как строятся k -отказоустойчивые вершинные реализации для цветных полных графов.

Введем следующие обозначения. Исходные вершины из V цвета f_0 и цвета f_1 будем обозначать за v_{f_0} и v_{f_1} соответственно, а дополнительные из V^* – за $v_{f_0}^+$ и $v_{f_1}^+$.

Теорема 3. Для полного графа $K_n = (V, \alpha, f)$ с $F = \{f_0, f_1\}$, $|F| = 2$, $|V_{f_0}| = 1$, $|V_{f_1}| > 1$ найдется минимальное вершинное k -расширение с количеством дополнительных ребер, равным

$$k(n-1) + kn + (k-1)(k-1) + \frac{k(k-1)}{2}. \quad (3)$$

Минимальное вершинное k -расширение строится по следующей схеме:

1. Из k дополнительных вершин цвета f_0 проводятся ребра во все исходные вершины цвета f_1 : $k(n-1)$.

2. Из k дополнительных вершин цвета f_1 проводятся ребра во все исходные вершины: kn .

3. Из $k-1$ дополнительной вершины цвета f_0 проводится $k-1$ ребро в одни и те же дополнительные вершины цвета f_1 : $(k-1)(k-1)$.

4. Из k дополнительных вершин цвета f_1 строится полный граф: $K_k = \frac{k(k-1)}{2}$.

Пример графа, удовлетворяющего условиям теоремы 3, и его МВ-2Р, построенного по представленной схеме, изображен на рис. 5 и 6 соответственно.

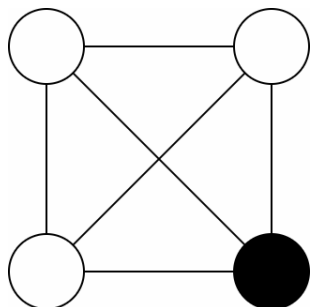


Рис. 5. Граф K_4 , удовлетворяющий условиям теоремы 3

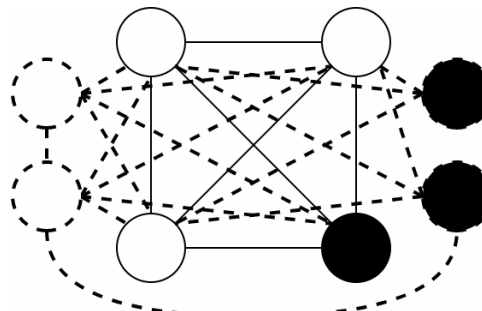


Рис. 6. МВ-2Р представленного графа K_4 . Пунктиром изображены дополнительные вершины и ребра

Доказательство. Рассмотрим на примере МВ-2Р, какие случаи отказа могут присутствовать в графе:

1. Удалены вершины v_{f_0} и v_{f_1} .
2. Удалены две вершины v_{f_1} .
3. Удалены вершины v_{f_0} и $v_{f_0}^+$.
4. Удалены вершины v_{f_0} и $v_{f_1}^+$.
5. Удалены вершины v_{f_1} и $v_{f_1}^+$.
6. Удалены вершины v_{f_1} и $v_{f_0}^+$.
7. Удалены две вершины $v_{f_0}^+$.
8. Удалены две вершины $v_{f_1}^+$.

Последние два случая рассматривать смысла нет, поскольку в графе, полученном удалением любых двух дополнительных вершин, уже содержится исходный граф.

Случаи с 3) по 6) сводятся к теореме 1, поэтому количество дополнительных ребер будет равно $2n-1$. Поскольку по условию вершинного расширения в МВ-2Р могут быть удалены любые два ребра – дополнительные ребра необходимо провести из каждой вершины $v_{f_0}^+$ и $v_{f_1}^+$: $2(2n-1) = 2(n-1) + 2n$. В общем случае в МВ- k Р могут быть удалены любые k ребер, поэтому формула для общего случая будет равна $k(2n-1) = k(n-1) + kn$.

Теперь рассмотрим случай 2), когда удаляются две любые исходные вершины цвета f_1 . В данном случае получившийся исходный граф становится полным графом K_{n-2} . Если рассматривать граф таким образом, это означает, что полный граф K_n являлся соединением графов $K_2 + K_{n-2}$. Значит, чтобы вложить исходный граф в получившийся, необходимо восстановить соединение графа K_{n-2} с графом K_2 , состоящим из вершин f_1 . Это значит, что нам необходимо создать из вершин $v_{f_1}^+$ граф K_2 с количеством ребер $\frac{2(2-1)}{2}$ и соединить его с K_{n-2} , состоящим из оставшихся вершин исходного графа. Поскольку данное соединение уже присутствует в решении для случаев 3)–6), то общее количество дополнительных ребер для случаев 2)–6) будет равно $2(n-1) + 2n + \frac{2(2-1)}{2}$.

Очевидно, при рассмотрении общего случая при удалении любых k исходных вершин цвета f_1 исходный полный граф становится K_{n-k} . Это значит, что необходимо восстановить соедине-

Краткие сообщения

ние $K_k + K_{n-k}$. Исходя из рассуждений выше, в общем случае количество дополнительных ребер будет равно $k(n-1) + kn + \frac{k(k-1)}{2}$.

Рассмотрим оставшийся случай 1). При удалении вершины v_{f_1} и v_{f_0} получившийся исходный граф является K_{n-2} , состоящий только из вершин цвета f_1 . Как и в случае 2), необходимо восстановить соединение K_{n-2} с K_2 , причем K_2 должно включать вершину цвета f_0 . Случаи с 3) по 6) уже имеют достаточные ребра, соединяющие v_{f_1} с $v_{f_1}^+$ и v_{f_1} с $v_{f_0}^+$ (а также K_1 , состоящее из вершин цвета f_1 с количеством ребер $\frac{1(1-1)}{2} = 0$). Общее число ребер будет равным $\frac{(n-2)(n-2-1)}{2} + (n-2)2 + \frac{1(1-1)}{2}$.

В общем случае при удалении k вершин исходный граф становится K_{n-k} , причем он состоит только из вершин цвета f_1 . Следовательно, необходимо восстановить соединение K_{n-k} с K_k . Случаи с 3) по 6) уже имеют достаточные ребра, соединяющие v_{f_1} с $v_{f_1}^+$ и v_{f_1} с $v_{f_0}^+$ (а также K_{k-1} , состоящее из вершин цвета f_1). Общее число ребер будет равным

$$\frac{(n-k)(n-k-1)}{2} + (n-k)k + \frac{(k-1)(k-2)}{2} : \frac{(n-k)(n-k-1)}{2} + (n-k)k + \frac{(k-1)(k-2)}{2} = \frac{n^2 - n - 2k + 2}{2} = \frac{n(n-1)}{2} - \frac{2k-2}{2} = \frac{n(n-1)}{2} - (k-1).$$

Несложно заметить, что данное число меньше $\frac{n(n-1)}{2}$ на $k-1$, а значит, чтобы вписать исходный полный граф в получившийся, нужно добавить $k-1$ ребер между вершинами цвета f_0 и цвета f_1 . Эти ребра можно получить путем их добавления между дополнительными вершинами цвета f_0 и f_1 . Поскольку должно быть выполнено условие вершинного расширения, и максимальное количество удаленных вершин цвета f_1 в первом случае может быть только $k-1$, то для минимального вершинного k расширения достаточно провести $k-1$ дополнительных ребер из $k-1$ дополнительных вершин цвета f_1 в дополнительные вершины цвета f_0 : $(k-1)(k-1)$.

Теорема 4. Для полного графа $K_n = (V, \alpha, f)$ с $F = \{f_0, f_1\}$, $|F| = 2$, $|V_{f_0}| > 1$, $|V_{f_1}| > 1$ найдется минимальное вершинное k -расширение с количеством дополнительных ребер, равным:

$$2nk + \sum_{j=1}^{k-1} (k-j) + k(k-1). \quad (4)$$

Схема построения минимального вершинного расширения:

1. Из каждой $v_{f_0}^+$ проведем ребра во все исходные вершины: kn .
2. Из каждой $v_{f_1}^+$ проведем ребра во все исходные вершины: kn .
3. Из дополнительной вершины цвета f_1 проведем ребра в $(k-1)$ дополнительную вершину цвета f_0 . Далее из дополнительной вершины цвета f_0 проведем $(k-2)$ вершин в дополнительные вершины цвета f_1 . Данная операция повторяется при увеличении степени k расширения, постепенно уменьшая количество дополнительных ребер. Таким образом, общее число ребер будет равно: $\sum_{j=1}^{k-1} (k-j)$.

4. Из множества $v_{f_0}^+$ и множества $v_{f_1}^+$ построим два полных графа $K_k : 2 \frac{k(k-1)}{2}$.

Пример графа, удовлетворяющего условиям теоремы 4, и его МВ-2Р, построенного по представленной схеме, изображен на рис. 7 и 8 соответственно.

Доказательство. Рассмотрим случаи отказа 2 вершин на примере расширения с $k = 2$. Большинство случаев аналогичны случаям из теоремы 3, однако здесь появляется еще один дополнительный: когда удаляются 2 вершины v_{f_0} . Поскольку отказ двух вершин v_{f_0} аналогичен удалению двух v_{f_1} , то будем рассматривать этот случай как вариант случая 2).

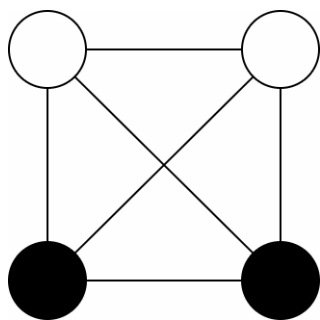


Рис. 7. Граф K_4 , удовлетворяющий условиям теоремы 4

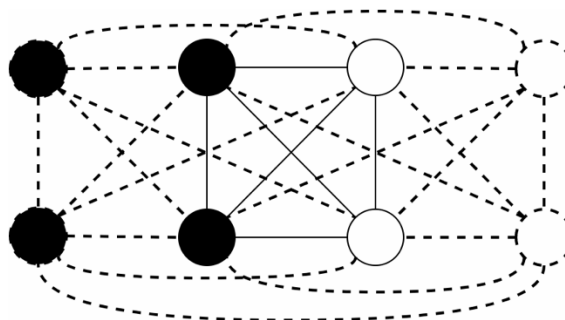


Рис. 8. МВ-2Р представленного графа K_4 . Пунктиром изображены дополнительные вершины и ребра

Случаи 7) и 8) так же, как и в теореме 3, не имеет смысла рассматривать.

Случаи 3)–6) сводятся к теореме 2, поэтому количество дополнительных ребер будет равно $2n$. По условию вершинного расширения в графе могут отказаться любые две вершины, поэтому дополнительные ребра необходимо построить из каждой дополнительной вершины: $2 \cdot 2n$. В общем случае $k \cdot 2n$.

Рассмотрим теперь удаление k исходных вершин одинакового цвета. Для v_{f_0} он аналогичен предыдущей теореме. Также и для v_{f_1} . Это означает, что необходимо построить $|F|$ полных графов $K_k : 2 \frac{k(k-1)}{2}$. Для $k = 2$ количество дополнительных ребер будет равно двум – для двух полных графов K_2 .

Перейдем к оставшемуся случаю, когда удаляются вершины v_{f_0} и v_{f_1} . Полученный граф содержит K_{n-2} (в общем случае K_{n-k}) исходных вершин различных цветов. Это означает, что нам необходимо добавить K_2 , состоящий из вершин цвета f_0 и f_1 .

Чтобы вложить граф в дополнительные вершины, необходимо добавить $(k-1)$ ребер между вершинами $v_{f_0}^+$ и $v_{f_1}^+$, в случае $k = 2$ требуется добавить одно ребро.

При увеличении k растет число вариантов, вершины каких цветов могут быть удалены. Другими словами, растет количество вариантов, из вершин каких цветов может состоять K_k , которую необходимо добавить. Например, при $k = 3$ могут быть удалены две вершины цвета f_0 и одна цвета f_1 , а также могут быть удалена одна вершина цвета f_0 и две – цвета f_1 . При этом добавление $k-1$ ребер между дополнительными вершинами заданных цветов дают возможность вложить только один из вариантов K_k . Для того чтобы иметь возможность вложить оба варианта, а также выполнить условие минимальности, необходимо дополнительно добавить $k-2$ ребер между данными дополнительными вершинами разных цветов. Итоговое количество добавленных ребер будет равно $(k-1) + (k-2)$.

При $k > 3$ данная логика распространяется следующим образом: при увеличении степени расширения увеличивается количество вариантов отказов вершин, следовательно, необходимо

Краткие сообщения

покрывать все случаи увеличением количества ребер. Так, для $k = 4$ количество ребер будет равным $(k-1) + (k-2) + (k-3)$, поскольку существует три варианта удаления вершин цвета f_1 и f_2 . Для $k = 5$ таких вариантов четыре, и так далее. Соответственно, для покрытия всех вариантов общее число ребер будет равно $\sum_{j=1}^{k-1} (k-j)$.

Таким образом, мы рассмотрели все случаи отказов вершин.

4. Минимальные вершинные расширения трехцветных полных графов

Увеличим количество цветов в графе до трех и исследуем представленную модель построения минимальных вершинных k -расширений.

Введем функцию $F(W)$ – набор цветов, которые присутствуют в множествах вершин из W . Для удобства повествования обозначим вершины цвета из множества $F(W^1)$ за v_{W^1} и $v_{W^1}^+$ – исходные и дополнительные соответственно. Аналогично обозначим v_{W^2} и $v_{W^2}^+$.

Теорема 5. Для полного графа $K_n = (V, \alpha, f)$ с $|F| = 3$, $|W^1| > 1$, $(W^2 = 1)$ найдется минимальное вершинное k -расширение с количеством дополнительных ребер, равным:

$$2(n-2)k + nk + |W^1|(k-1)(k-1) + \frac{k(k-1)}{2} + k \quad (5)$$

Схема построения данного минимального вершинного расширения:

1. Из k вершин $v_{W^1}^+$ (для каждого цвета из $F(W^1)$) проводится $(n-2)$ ребер в вершины исходного графа v_{W^2} – во все вершины, кроме вершин цвета из $F(W^1)$: $2(n-2)k$ (в общем случае $|W^1|(n-|W^1|)k$).
2. Из k дополнительных вершин $v_{W^2}^+$ проводятся ребра во все вершины исходного графа: nk .
3. Из $k-1$ дополнительной вершины $v_{W^1}^+$ для каждого цвета из $F(W^1)$ проводится $k-1$ ребро в одни и те же дополнительные вершины цвета из $F(W^2)$. Количество ребер: $|W^1|(k-1)(k-1)$.
4. Каждая пара дополнительных вершин разного цвета из $F(W^1)$ соединяется ребром k .
5. Строится полный граф из дополнительных вершин цвета из $F(W^2)$: $\frac{k(k-1)}{2}$.

Доказательство. Следует из теоремы 3. Четвертый пункт схемы обосновывается тем фактом, что при удалении любого набора, состоящего из вершин из W^1 , теряется связь между вершинами данного цвета, поэтому его нужно сконструировать из дополнительных вершин.

Теорема 6. Для полного графа $K_n = (V, \alpha, f)$ с $|F| = 3$, $|W^1| = 1$, $|W^2| > 1$ найдется минимальное вершинное k -расширение с количеством дополнительных ребер, равным

$$(n-1)k + 2nk + (k-1)(k-1) + 2\frac{k(k-1)}{2} + \sum_{j=1}^{k-1} (k-j). \quad (6)$$

Схема построения данного минимального вершинного расширения:

1. Из k дополнительных вершин $v_{W^1}^+$ проводятся ребра во все вершины v_{W^2} : $(n-1)k$.

2. Из k вершин $v_{W^2}^+$ каждого цвета из $F(W^2)$ проводятся ребра во все вершины исходного графа: $2nk$.
3. Из $k-1$ дополнительной вершины $v_{W^1}^+$ для каждого цвета из $F(W^1)$ проводится $k-1$ ребро в одни и те же дополнительные вершины цвета из $F(W^2)$. Количество ребер: $2(k-1)(k-1)$.
4. Из дополнительной вершины $v_{W^2}^+$ цвета $c_1 \in F(W^2)$ проведем ребра в $(k-1)$ дополнительную вершину цвета $c_2 \in F(W^2)$. Далее из дополнительной вершины цвета c^2 проведем $(k-2)$ вершин в дополнительные вершины цвета c_1 . Данная операция повторяется при увеличении степени k расширения, постепенно уменьшая количество дополнительных ребер. Таким образом, общее число ребер будет равно $\sum_{j=1}^{k-1} (k-j)$.
5. Для каждого цвета из $F(W^2)$ построим полный граф из $v_{W^2}^+$: $2 \frac{k(k-1)}{2}$.

Доказательство. Данную схему можно разбить на две – схема построения расширения для графа с $|W^1|=1, |W^2|>1$ и схема для $|W^1|>1, |W^2|=1$. Пункты 1–3 следуют из теоремы 3. Последние два пункта следуют из теоремы 4.

Теорема 7. Для полного графа $K_n = (V, \alpha, f)$ с $|F|=3, |W^1|=0, |W^2|>1$ найдется минимальное вершинное k -расширение с количеством дополнительных ребер, равным

$$3nk + 3 \frac{k(k-1)}{2} + 3 \left(\sum_{j=1}^{k-1} (k-j) \right) \quad (7)$$

Схема построения:

1. Для каждого цвета из $F(W^2)$ из k дополнительных вершин $v_{W^2}^+$ проводятся ребра во все вершины исходного графа: $3nk$ (в общем случае $|W^2|nk$).
2. Для каждой пары цветов $c_1, c_2 \in F(W^2)$ из дополнительной вершины цвета c_1 проводятся $k-1$ ребер в вершины цвета c_2 , а из дополнительной вершины цвета c_2 ребра в $k-2$ дополнительные вершины цвета c_1 и так далее при увеличении степени расширения: $3 \left(\sum_{j=1}^{k-1} (k-j) \right)$. Несложно заметить, что все рассматриваемые пары образуют полный $|W^2|$ -вершинный граф. Таким образом, в общем случае количество дополнительных ребер будет равным $\frac{|W^2|(|W^2|-1)}{2} \left(\sum_{j=1}^{k-1} (k-j) \right)$.
3. Для каждого цвета из $F(W^2)$ строится полный граф из $v_{W^2}^+$: $3 \frac{k(k-1)}{2}$ (в общем случае $|W^2| \frac{k(k-1)}{2}$).

Доказательство. Следует из предыдущих теорем.

Теорема 8. Для полного графа $K_n = (V, \alpha, f)$ с $|F|=3, |W^1|>1, |W^2|=0$ найдется минимальное вершинное k -расширение с количеством дополнительных ребер, равным

$$k \frac{|W^1|(|W^1|-1)}{2} \quad (8)$$

Схема построения заключается в том, чтобы построить k полных графов из вершин $v_{w^1}^+$.

Пример графа, удовлетворяющего условиям теоремы 8, и его МВ-1Р, построенного по представленной схеме, изображен на рис. 9 и 10 соответственно.

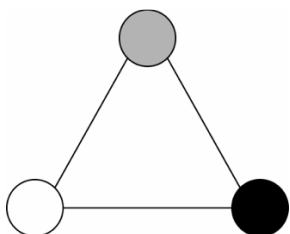


Рис. 9. Граф K_3 , удовлетворяющий условиям теоремы 8

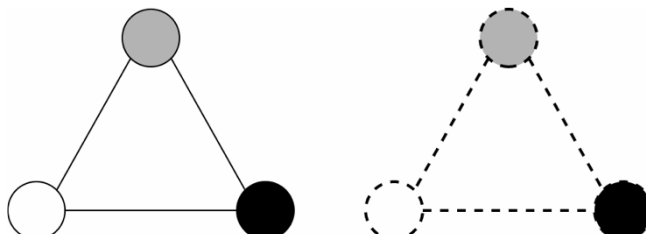


Рис. 10. МВ-1Р представленного графа K_3 . Пунктиром изображены дополнительные вершины и ребра

Доказательство. При удалении любой вершины любого цвета граф K_n превращается в K_{n-1} , поэтому необходимо соединить K_{n-1} с K_1 , построенный из дополнительной вершины удаленного цвета. Поскольку может быть удалена вершина любого цвета и для каждого цвета необходимо соединять K_1 удаленного цвета с K_{n-1} , то нужно провести $n-1$ ребер из каждой дополнительной вершины. Очевидно, что условие минимальности расширения достигается тогда, когда каждая дополнительная вершина соединена с остальными дополнительными: $\frac{n(n-1)}{2}$. С

учетом степени расширения k необходимо построить k полных графов из k дополнительных вершин.

Замечание. Условия теоремы 8 справедливы и для графов с $|F| = 2$.

Рассматривая представленные теоремы, можно обнаружить некоторую закономерность в построении схемы минимального вершинного k -расширения для различных конфигураций графов. В действительности, все описанные выше схемы можно свести к единой и обобщить все теоремы выше к общей теореме для цветных полных графов любой конфигурации.

5. Минимальные вершинные k -расширения цветных полных графов

Следующая теорема является следствием закономерного развития идеи построения схем минимального вершинного k -расширения для цветных полных графов, рассмотренных в теоремах 1–8.

Теорема 9. Для полного графа $K_n = (V, \alpha, f)$ с $|F| > 1$ найдется минимальное вершинное k -расширение с количеством дополнительных ребер, равным

$$|W^1| \left((n - |W^1|)k + |W^2|nk + \sum_0^{|W^2|} |W^1| (k-1)(k-1) + \frac{|W^2|(|W^2|-1)}{2} \left(\sum_{j=1}^{k-1} (k-j) \right) + |W^2| \frac{k(k-1)}{2} + k \frac{|W^1|(|W^1|-1)}{2} \right) \quad (9)$$

Схема построения данного минимального вершинного расширения заключается в следующем:

1. Для каждого цвета из $F(W^1)$ проводятся ребра из k дополнительных вершин $v_{w^1}^+$ во все вершины $v_{w^2} : |W^1| \left((n - |W^1|)k \right)$.

2. Для каждого цвета из $F(W^2)$ из k дополнительных вершин $v_{W^2}^+$ проводятся ребра во все вершины исходного графа: $|W^2|nk$.

3. Из $k-1$ дополнительной вершины $v_{W^2}^+$, для каждого цвета из $F(W^2)$ проводится $k-1$ ребро в одни и те же дополнительные вершины цвета из $F(W^1)$. Количество ребер:

$$\sum_0^{|W^2|} |W^2| (k-1)(k-1).$$

4. Для каждой пары цветов $c_1, c_2 \in F(W^2)$ из дополнительной вершины цвета c_1 проводятся $k-1$ ребер в вершины цвета c_2 , а из дополнительной вершины цвета c_2 ребра в $k-2$ дополнительные вершины цвета c_1 и так далее при увеличении количества вариантов

удаления исходных вершин различного цвета: $\frac{|W^2|(|W^2|-1)}{2} \left(\sum_{j=1}^{k-1} (k-j) \right)$.

5. Для каждого цвета из $F(W^2)$ строится полный граф из $v_{W^2}^+$: $|W^2| \frac{k(k-1)}{2}$.

6. Каждая пара дополнительных вершин разного цвета из $F(W^1)$ соединяется ребром:

$$k \frac{|W^1|(|W^1|-1)}{2}.$$

В работе М.Б. Абросимова [5] приводится теорема о минимальном вершинном k -расширении полного графа $K_n = (V, \alpha)$. В ней говорится, что полный граф имеет единственное с точностью до изоморфизма МВ- k Р, и этим расширением является полный граф K_{n+k} .

Полный граф без введенной на нем функции раскраски можно рассматривать как граф $K_n = (V, \alpha, f)$ с $|F| = 1$, $|W^1| = 0$, $|W^2| = 1$. Посчитаем количество дополнительных ребер в расширении K_{n+k} :

$$\frac{(n+k)(n+k-1) - n(n-1)}{2} = \frac{n^2 + kn - n + kn + k^2 - k - n^2 + n}{2} = \frac{2kn + k^2 - k}{2} = kn + \frac{k(k-1)}{2}$$

Теперь посчитаем количество дополнительных ребер по теореме 9.

$$0(n-0)k + nk + 0 + \frac{1 \cdot 0}{2} \left(\sum_{j=1}^{k-1} (k-j) \right) + \frac{k(k-1)}{2} + k \frac{0 \cdot (-1)}{2} = kn + \frac{k(k-1)}{2}.$$

Следствие 1. Схема построения минимального вершинного k -расширения с заданным по формуле количеством дополнительных ребер справедлива и для полных графов с $|F| = 1$.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения государственного задания (проект № FSRR-2020-0006).

Литература

1. Avižienis, A. Fault-tolerance and fault-intolerance: Complementary approaches to reliable computing / A. Avižienis // ACM SIGPLAN Notices. – 1975. – Vol. 10, Iss. 6. – P. 458–464.
2. Hayes, J.P. A graph model for fault-tolerant computing system / J.P. Hayes // IEEE Trans. Comput. – 1976. – Vol. C-25, no. 9. – P. 875–884.
3. Harary, F. Edge fault tolerance in graphs / F. Harary, J.P. Hayes // Networks. – 1993, Vol. 23, Iss. 2. – P. 135–142.
4. Harary, F. Node fault tolerance in graphs / F. Harary, J.P. Hayes // Networks. – 1996, vol. 27, Iss. 1. – P. 19–23.

Краткие сообщения

5. Абросимов, М.Б. Графовые модели отказоустойчивости / М.Б. Абросимов. – Саратов: Изд-во Саратов. Ун-та, 2012. – 189 с.

6. Разумовский, П.В. Построение цветных графов без проверки на изоморфизм / П.В. Разумовский, М. Б. Абросимов // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. – 2021. – Т. 21, № 2. – С. 267–277.

7. Razumovsky, P.V. The search for minimal edge 1-extension of an undirected colored graph / P.V. Razumovsky // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Математика. Механика. Информатика. – 2021. – Т. 21, № 3. – Р. 400–407.

8. Разумовский, П.В. О минимальных вершинных 1-расширениях двухцветных полных графов / П.В. Разумовский // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2021». – М.: МАКС Пресс, 2021. https://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2021/data/22112/124513_uid563707_report.pdf

9. Богомолов, А.М. Алгебраические основы теории дискретных систем / А.М. Богомолов, В.Н. Салий. – М.: Наука, 1997. – 367 с.

Поступила в редакцию 28 октября 2021 г.

Сведения об авторах

Разумовский Пётр Владимирович – аспирант кафедры теоретических основ компьютерной безопасности и криптографии, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, г. Саратов, Российская Федерация, <https://orcid.org/0000-0003-3648-3166>, e-mail: shprotby@gmail.com

Абросимов Михаил Борисович – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой теоретических основ компьютерной безопасности и криптографии, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, г. Саратов, Российская Федерация, <https://orcid.org/0000-0002-4473-8790>, e-mail: mic@rambler.ru

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2021, vol. 13, no. 4, pp. 77–89*

DOI: 10.14529/mmph210409

THE MINIMAL VERTEX EXTENSIONS FOR COLORED COMPLETE GRAPHS

P.V. Razumovsky, M.B. Abrosimov

Saratov State University, Saratov, Russian Federation

E-mail: shprotby@gmail.com, mic@rambler.ru

The article proposes the results of the search for minimal vertex extensions of undirected colored complete graphs. The research topic is related to the modelling of full fault tolerant technical systems with a different type of their objects in the terminology of graph theory. Let a technical system be Σ , then there is a graph $G(\Sigma)$, which vertices reflects system's objects and edges reflects connections between these objects. Type of each object reflected in a mapping of some color from $F = \{1, 2, \dots, i\}$ to the corresponding vertex. System's Σ vertex extension is a graph $G(\Sigma)$ which contains additional vertices. System reflected by graph $G(\Sigma)$ can work even if there are k faults of its objects. Complete graph is a graph where each two vertices have an edge between them. Complete graphs have no edge extensions because there is no way to add additional edge to the graph with a maximum number of edges. In other words, the system reflected by some complete graph cannot be able to resist connection faults. Therefore the article research is focused on vertex extensions only. There is a description of vertex extensions existence condition for those colored complete graphs. This paper considers generating schemes for such minimal vertex extensions along with formulas, which allows to calculate number of additional edges to have an ability to construct minimal vertex extension.

Keywords: graph vertex extensions; complete graphs; graph minimal extensions, colored graph extensions, colored graphs.

References

1. Avižienis A. Fault-tolerance and fault-intolerance: Complementary approaches to reliable computing. *ACM SIGPLAN Notices*, 1975, Vol. 10, Iss. 6, pp. 458–464. DOI: 10.1145/390016.808469
2. Hayes J.P. A Graph Model for Fault-Tolerant Computing System. *IEEE Trans. Comput.*, 1976, Vol. C-25, no. 9, pp. 875–884. DOI: 10.1109/TC.1976.1674712
3. Harary F., Hayes J.P. Edge Fault Tolerance in Graph. *Networks*, 1993, Vol. 23, Iss. 2, pp. 135–142. DOI: 10.1002/net.3230230207
4. Harary F., Hayes J.P. Node Fault Tolerance in Graphs. *Networks*, 1996, Vol. 27, Iss. 1, pp. 19–23. DOI: 10.1002/(sici)1097-0037(199601)27:1<19::aid-net2>3.0.co;2-h
5. Abrosimov M.B. *Grafovye modeli otkazoustoychivosti* (Graph Models of Fault Tolerance). Saratov, Izd-vo Sarat. Un-ta Publ., 2012, 189 p. (in Russ.).
6. Razumovsky P.V., Abrosimov M.B. Generation of Colored Graphs with Isomorphism Rejection. *Izv. Sarat. Univ. Math. Mech. Inform.*, 2021, Vol. 21, Iss. 2, pp. 267–277. (in Russ.). DOI: 10.18500/1816-9791-2021-21-2-267-277
7. Razumovsky P.V. The Search for Minimal Edge 1-Extension of an Undirected Colored Graph. *Izv. Sarat. Univ. Math. Mech. Inform.*, 2021, Vol. 21, Iss. 3, pp. 400–407. DOI: 10.18500/1816-9791-2021-21-3-400-407
8. Razumovskiy P.V. O minimal'nykh verшинnykh 1-rasshireniyakh dvukhtsvetnykh polnykh grafov (On Minimal Vertex 1-Extensions of Two-Color Complete Graphs). *Materialy Mezhdunarodnogo molodezhnogo nauchnogo foruma "LOMONOSOV-2021"* (Proc. Int. Youth Scientific Forum "LOMONOSOV-2021"), Moscow, MAKS Press Publ., 2021. https://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2021/data/22112/124513_uid563707_report.pdf
9. Bogomolov A.M., Saliy V.N. *Algebraicheskie osnovy teorii diskretnykh sistem* (Algebraic Foundations of the Theory of Discrete Systems). Moscow, Nauka Publ., 1997, 367 p. (in Russ.).

Received October 28, 2021

Information about the authors

Razumovskiy Pyetr Vladimirovich, Postgraduate Student of the Department of Theoretical Foundations of Computer Security and Cryptography, Saratov State University named after N.G. Chernyshevsky, Saratov, Russian Federation, <https://orcid.org/0000-0003-3648-3166>, e-mail: shprotby@gmail.com

Abrosimov Mikhail Borisovich, Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Head of the Department of Theoretical Foundations of Computer Security and Cryptography, Saratov State University named after N.G. Chernyshevsky, Saratov, Russian Federation, <https://orcid.org/0000-0002-4473-8790>, e-mail: mic@rambler.ru

Информация

ЕВГЕНИЙ АНАТОЛЬЕВИЧ БЕЛЕНКОВ (21.01.1964 – 28.10.2021)



28 октября 2021 года ушел из жизни Евгений Анатольевич Беленков, профессор, доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики конденсированного состояния Челябинского государственного университета.

Евгений Анатольевич родился 21 января 1964 в городе Первоуральске Свердловской области. В 1986 году окончил Челябинский государственный университет и получил диплом с присвоением квалификации «Физик. Преподаватель». После окончания университета служил полтора года в рядах Советской армии. В 1988 году начал работать младшим научным сотрудником в Челябинском государственном университете. В период с 1992 по 1997 постепенно рос в должности от научного сотрудника до доцента, а с 2003 года начал работать профессором на кафедре физики конденсированного состояния ЧелГУ. Кроме того, Евгений Анатольевич работал по совместительству профессором в Южно-Уральском государственном университете в 2005–2012 и Магнитогорском государственном университете в 2003–2011 гг.

Евгений Анатольевич всю свою жизнь посвятил науке. В 1995 году он защитил кандидатскую диссертацию «Формирование кристаллов в ультрадисперсных системах С и С-Si, стимулированное фазовым превращением» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, а в 2002 году успешно защитил диссертацию по теме «Формирование кристаллической структуры углеродных и карбидкремниевых материалов» на соискание степени доктора физико-математических наук. Начиная с 2002 года, Евгений Анатольевич был бессменным ученым секретарем докторского диссертационного совета Д 212.296.03 при ЧелГУ по теоретической физике и физике конденсированного состояния. В 2006 году ему было присуждено ученое звание профессора. Евгений Анатольевич являлся экспертом в области исследования углеродных наноструктур и основоположником научного направления в ЧелГУ по моделированию атомной структуры углеродных соединений. Он был неоднократным победителем грантов всероссийских и региональных конкурсов. Результатом его активной научной работы являются более 300 опубликованных научных и методических работ и три монографии. Под руководством Евгения Анатольевича подготовлены и защищены десять кандидатских диссертаций.

Также Евгений Анатольевич вел активную преподавательскую деятельность. Много лет читал лекции по основным разделам физики конденсированного состояния и программированию. В ЧелГУ он организовал учебную лабораторию нанотехнологий и руководил спецсеминаром по физике углеродных материалов. Евгений Анатольевич был председателем учебно-методической комиссии физического факультета ЧелГУ. За многолетнюю плодотворную работу по развитию учебного процесса и подготовки специалистов ему было присуждено звание «Почетный работник высшего профессионального образования РФ» (2016 год). Также научно-педагогическая работа была отмечена грамотой Министерства образования и науки РФ (2012 год) и Благодарностью Губернатора Челябинской области (2021 год).

Евгений Анатольевич был трудолюбивым человеком и яркой личностью. Отличался внимательностью и отзывчивостью к коллегам и студентам, обладал удивительной остротой ума и чувством юмора. Коллеги и ученики всегда будут помнить его как доброго и принципиального человека, увлеченного наукой.

Коллеги и друзья глубоко скорбят и выражают искренние соболезнования семье и близким Евгения Анатольевича. Светлая память о нем навсегда останется в наших сердцах и в истории Челябинского государственного университета.

Ученики, члены редакционной коллегии и редакционного совета журнала

НАТАЛИЯ БОРИСОВНА МЕДВЕДЕВА (24.10.1960 – 2.08.2021)



2 августа 2021 года на 61-м году ушла из жизни Наталья Борисовна Медведева, доктор физико-математических наук, профессор кафедры дифференциальных и стохастических уравнений факультета математики, механики и компьютерных наук, профессор кафедры вычислительной математики ЧелГУ.

Наталья Борисовна родилась 24 декабря 1960 года в г. Хабаровске. Окончила механико-математический факультет МГУ и аспирантуру Отделения математики в 1987 г. В этом же году приступила к работе в Челябинском государственном университете в должности ассистента. За время работы прошла путь от ассистента до профессора.

Круг научных интересов Н.Б. Медведевой – проблема различения центра и фокуса в пространстве векторных полей с фиксированной диаграммой Ньютона, аналитическая разрешимость проблемы устойчивости в некоторых классах векторных полей на плоскости со сложной монодромной особой точкой. Ею получены содержательные результаты в этой области, признанные значительными в нашей стране и за рубежом.

В 1988 г. Наталья Борисовна защитила кандидатскую диссертацию на тему «О проблеме устойчивости монодромных особых точек на плоскости» под руководством Ю.С. Ильяшенко. В 2005 г. защитила докторскую диссертацию в математическом институте им. В.А. Стеклова (г. Москва) на тему «Устойчивость монодромных особых точек на плоскости».

В 2007 году Н.Б. Медведевой было присвоено ученое звание профессора.

С 2014 года Наталья Борисовна совмещала работу в ЧелГУ с работой в должности профессора кафедры дифференциальных и стохастических уравнений ЮУрГУ.

Уделяя значительное внимание учебной работе, Н.Б. Медведева подготовила и прочитала большое количество фундаментальных математических курсов, формирующих мировоззрение будущего математика: уравнения математической физики, уравнения с частными производными, комплексный анализ, непрерывные математические модели, численные методы, математический анализ и др.

Ею опубликовано более 60 научных, учебных и учебно-методических работ.

Научные и методические достижения Натальи Борисовны высоко оценены и были поддержаны грантом фонда Дж. Сороса и фонда «Культурная инициатива» по программе «Университеты России» (1993–1995), стипендией Дж. Сороса (1993–1994), грантами Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ), грантом гражданского фонда исследований и развития США (CRDF). Она была удостоена звания «Соросовский доцент» трижды – в 1997, 1998 и 1999 г.

В 2013 году Н.Б. Медведева была награждена Почетной грамотой Министерства образования и науки РФ.

Наталию Борисовну всегда отличали доброжелательность, интеллигентность, отзывчивость. Она была талантливым математиком, высококвалифицированным и добросовестным преподавателем. Добрый, жизнерадостный, принципиальный и бескомпромиссный человек – такой останется Наталья Борисовна в памяти знавших её друзей, коллег и учеников.

Друзья и коллеги

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, № 4
2021

16+

Редактор *С.И. Уварова*
Техн. редактор *А.В. Миних*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 29.10.2021. Дата выхода в свет 12.11.2021.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 11,16.

Тираж 500 экз. Заказ 336/388. Цена свободная.

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