

ВЕСТНИК

**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

**2013
Т. 5, № 1**

ISSN 2075-809X

СЕРИЯ

**«МАТЕМАТИКА.
МЕХАНИКА.
ФИЗИКА»**

Решением ВАК России включен в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий

**ПОСВЯЩАЕТСЯ
70-ЛЕТИЮ ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА**

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

Редакционная коллегия серии:

д.ф.-м.н., профессор **Бескачко В.П.**
(отв. редактор),

к.ф.-м.н., доцент **Голубев Е.В.**
(отв. секретарь),

д.т.н., профессор **Гуревич С.Ю.**,

к.ф.-м.н., профессор **Заляпин В.И.**,

д.ф.-м.н., профессор **Менихес Л.Д.**,

д.т.н., профессор **Садаков О.С.**,

д.т.н., профессор **Сапожников С.Б.**,

д.т.н., профессор **Чернявский А.О.**

Серия основана в 2009 году.

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-26455 выдано 13 декабря 2006 г. Федеральной службой по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия.

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международной справочной системе по периодическим и продолжающимся изданиям «Ulrich's Periodicals Directory».

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».

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России».

Периодичность выхода – 2 номера в год.

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

АЗОВ Д.Г. Оценка области однозначной проекции поверхности отрицательной кривизны	4
АКИМОВА А.А. Классификация узлов в утолщенном торе, минимальные диаграммы которых не лежат в кольце и имеют пять перекрёстков	8
ГЕРЕНШТЕЙН А.В., ХАЙРИСЛАМОВ М.З. Явная разностная схема решения одномерного квазилинейного уравнения теплопроводности	12
ЗИМОВЕЦ А.А. Метод приграничного слоя для приближенного построения множеств достижимости управляемых систем	18
КАМАЛТДИНОВА Т.С. Приближенное решение обратной граничной задачи для уравнения теплопроводности нелинейным методом проекционной регуляризации	26
КАРАЧИК В.В. Об одном обобщении теоремы о среднем для гармонических функций	34
ЛЕБЕДЕВ П.Д., УШАКОВ В.Н. Об одном варианте метрики для неограниченных выпуклых множеств	40
МЕНИХЕС Л.Д. О связи достаточных условий регуляризуемости интегральных уравнений..	50
ПАСИКОВ В.Л. Экстремальные стратегии в игровых задачах для линейных интегродифференциальных систем Вольтерра, II.....	55
ПАТРУШЕВ А.А., ПАТРУШЕВА Е.В. Один из случаев решения задачи Маркушевича в замкнутой форме.....	63
ЮЛДАШЕВ Т.К. Обратная задача для нелинейного интегро-дифференциального уравнения с гиперболическим оператором высокой степени.....	69

Физика

ВЕРХОВЫХ А.В., МИРЗОЕВ А.А. Ab initio моделирование энергии формирования границы зерна в ОЦК-железе	76
ГРОМОВ В.Е., РАЙКОВ С.В., ШЕРСТОБИТОВ Д.А., ИВАНОВ Ю.Ф., ХАИМЗОН Б.Б., КОНОВАЛОВ С.В. Анализ растворения углерода в титане при электронно-пучковой обработке.....	82
РЕЧКАЛОВ В.Г., БЕСКАЧКО В.П. Моделирование экспериментов по измерению поверхностного натяжения по форме поверхности капли при наличии несовершенств в ее подвесе или опоре	88
СОЗЫКИН С.А., СОКОЛОВА Е.Р., ТЕЛЬНОЙ К.А., БЕСКАЧКО В.П., ВЯТКИН Г.П. Квантово-химическое моделирование процессов деформации хиральных углеродных нанотрубок	95
ШЕВЯКОВ И.А., ТАМБОВЦЕВ В.И., КУЧУРКИН А.А. Радиофизические свойства столкновительной плазмы газового разряда	100

Краткие сообщения

АЛЬ-ДЕЛФИ Д.К. Квазисоболевы пространства ℓ_p^m	107
РЫБИНА Э.Н., БРЫЗГАЛОВ А.Н., СВИРСКАЯ Л.М., ВИКТОРОВ В.В., ВОЛКОВ П.В., ЖИВУЛИН Д.Е. Магнитные свойства твёрдых растворов $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$	110
ЧИРКОВ П.В., МИРЗОЕВ А.А. Межчастичный потенциал в системе железо–углерод и проблема мартенситного перехода	114

CONTENTS

Mathematics

AZOV D.G. Estimation of bijective projection area of a surface with negative curvature	4
AKIMOVA A.A. Classification of knots in the thickened torus with minimal diagrams which are not in a circle and have five crossings	8
HERREINSTEIN A.V., KHAYRISLAMOV M.Z. Explicit difference scheme for the solution of one-dimensional quasi-linear heat conductivity equation.....	12
ZIMOVETS A.A. A boundary layer method for the construction of approximate attainability sets of control systems	18
KAMALTDINOVA T.S. Approximate solution of inverse boundary problem for the heat conductivity equation by nonlinear method of projection regularity	26
KARACHIK V.V. On one generalized mean theorem for harmonic functions	34
LEBEDEV P.D., USHAKOV V.N. A variant of a metric for unbounded convex sets.....	40
MENIKHES L.D. On connection between sufficient conditions of regularizability of integral equations.....	50
PASIKOV V.L. Extreme strategies in game-theory problems for linear integral differential Volterra systems, II.....	55
PATRUSHEV A.A., PATRUSHEVA E.V. A variant of the solution of Markushevich boundary problem	63
YULDASHEV T.K. Inverse problem for nonlinear integral differential equation with hyperbolic operator of a high degree	69

Physics

VERKHOVYKH A.V., MIRZOEV A.A. Ab initio modeling of the grain boundary formation energy in BCC iron.....	76
GROMOV V.E., RAYKOV S.V., SHERSTOBITOV D.A., IVANOV Yu.F., KHAIMZON B.B., KONOVALOV S.V. Analysis of carbon dissolution in titanium under electron beam treatment	82
RECHKALOV V.G., BESKACHKO V.P. Simulation of experiments to measure surface tension by the shape of a drop surface at the existence of irregularity in its hanger or bearing.....	88
SOZYKIN S.A., SOKOLOVA E.R., TELNOY K.A., BESKACHKO V.P., VYATKIN G.P. Quantum-chemical modeling of deformation processes of chiral carbon nanotubes	95
SHEVYAKOV I.A., TAMBOVCEV V.I., KUCHURKIN A.A. Radio physical properties of collisional plasma in gas discharge	100

Short communications

AL-DELFI J.K. Quasi-Sobolev spaces ℓ_p^m	107
RYBINA E.N., BRYZGALOV A.N., SVIRSKAYA L.M., VIKTOROV V.V., VOLKOV P.V., ZHIVULIN D.E. The magnetic properties of solid solutions $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$	110
CHIRKOV P.V., MIRZOEV A.A. Interatomic potential for iron-carbon system and martensitic phase transition problem	114

ОЦЕНКА ОБЛАСТИ ОДНОЗНАЧНОЙ ПРОЕКЦИИ ПОВЕРХНОСТИ ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ КРИВИЗНЫ

Д.Г. Азов¹

Рассматривается поверхность с отрицательной гауссовой кривизной, которая однозначно проектируется на круг. Получены достаточные условия, при которых существует оценка для радиуса круга.

Ключевые слова: поверхности отрицательной гауссовой кривизны, уравнение Монжа–Ампера гиперболического типа, оценка области однозначной проекции.

Пусть поверхность

$$z = f(x, y) \quad (1)$$

имеет гауссову кривизну $K(x, y)$. Известно, что если

$$K(x, y) \leq -\alpha^2 < 0, \quad (2)$$

то поверхность (1) не может проектироваться на всю плоскость. Имеет место теорема Н.В. Ефимова [1]: существует $a_0 > 0$ такое, что если C^2 -гладкая функция $f(x, y)$ задана на квадрате со стороной a и ее график (1) имеет кривизну (2), то $a \leq a_0 / \alpha$. Е. Хайнц [2] получил оценку для радиуса круга, на который может проектироваться поверхность с улучшением оценки Н.В. Ефимова: существует $r_0 > 0$ такое, что если C^2 -гладкая поверхность (1) с кривизной (2) задана на круге радиуса r , то $r < r_0 / \alpha$. Е. Хайнц доказал, что $r_0 \leq e\sqrt{3}$. Пример гиперболического параболоида дает оценку снизу: $r_0 \geq 0,5$. Точные значения констант r_0 и a_0 неизвестны. В работе [3] Н.В. Ефимов получил оценки для сторон прямоугольника, на который проектируется поверхность (1). Данные результаты были обобщены в работах [4–7].

Учитывая известную формулу

$$z_{xx}z_{yy} - z_{xy}^2 = K(x, y)(1 + z_x^2 + z_y^2)^2, \quad (3)$$

результаты Н.В. Ефимова и Е. Хайнца можно сформулировать следующим образом: гиперболическое уравнение Монжа–Ампера (3) не имеет C^2 -гладких решений в круге радиуса $r > r_0 / \alpha$ или на квадрате со стороной $a > a_0 / \alpha$, если $K(x, y)$ удовлетворяет условию (2).

В настоящей работе рассматриваются достаточные условия существования оценки радиуса круга, на который однозначно проектируется поверхность (1).

Теорема 1. Пусть поверхность $z = z(x, y) \in C^2$ с отрицательной кривизной $K(x, y) < 0$ определена на круге $x^2 + y^2 \leq R^2$. Если существует постоянная $C > 0$, такая, что

$$\iint_{x^2 + y^2 \leq r^2} \frac{dx dy}{|K(x, y)|} \leq Cr^m, \quad 0 < m < 4, \quad r > 0, \quad (4)$$

то

$$R \leq \begin{cases} \left(\frac{4-m}{2} \right)^{\frac{2}{2-m}} \cdot \left(\frac{3C}{\pi} \right)^{\frac{1}{4-m}}, & \text{если } m \neq 2; \\ e\sqrt{\frac{3C}{\pi}}, & \text{если } m = 2. \end{cases} \quad (5)$$

¹ Азов Дмитрий Георгиевич – доцент, кафедра общей математики, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail. azykl@rambler.ru

Доказательство теоремы 1. Для доказательства используем интегральную формулу С.Н. Бернштейна:

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \int_0^{2\pi} (\bar{z}_\varphi(\rho, \varphi))^2 d\varphi \right) = \int_0^{2\pi} (\bar{z}_\rho(\rho, \varphi))^2 d\varphi - 2 \iint_{x^2+y^2 \leq r^2} (z_{xx}z_{yy} - z_{xy}^2) dx dy. \quad (6)$$

Здесь $z(x, y) \in C^2$, $\bar{z}(\rho, \varphi) = z(\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi)$, ρ , φ – полярные координаты.

Введем вспомогательную функцию

$$g(r) = \int_0^r \rho d\rho \int_0^{2\pi} \left(1 + \frac{1}{\rho^2} (\bar{z}_\varphi(\rho, \varphi))^2 \right) d\varphi.$$

Тогда $g(0) = 0$, $g(r) \geq \pi r^2$ и $g'(r) > 0$ при $0 < r < R$. Оценим $g(r)$ сверху, используя неравенство Буняковского:

$$g^2(r) \leq \left(\iint_{x^2+y^2 \leq r^2} (1 + z_x^2 + z_y^2) dx dy \right)^2 \leq \iint_{x^2+y^2 \leq r^2} \frac{dx dy}{|K(x, y)|} \cdot \iint_{x^2+y^2 \leq r^2} |K(x, y)| (1 + z_x^2 + z_y^2)^2 dx dy. \quad (7)$$

Используя (4), (6) и (7), получаем неравенство

$$g''(r) \geq \frac{2g^2(r)}{Cr^m}. \quad (8)$$

Интегрируя неравенство (8) по $\rho \in (0, R)$, получим

$$g'(\rho) g^{-\frac{3}{2}}(\rho) \geq \frac{2}{\sqrt{3C}} r^{-\frac{m}{2}}.$$

Переходя к пределу при $\rho \rightarrow r$ и интегрируя по r от R_1 до R_2 ($0 < R_1 < R_2 < R$) при $m \neq 2$, получаем

$$g^{-\frac{1}{2}}(R_1) - g^{-\frac{1}{2}}(R_2) \geq \frac{2}{(2-m)\sqrt{3C}} (R_2^{\frac{2-m}{2}} - R_1^{\frac{2-m}{2}}).$$

Так как $g(r) \geq \pi r^2$, то

$$\frac{1}{\sqrt{\pi} R_1} \geq \frac{2}{(2-m)\sqrt{3C}} \left(R_2^{\frac{2-m}{2}} - R_1^{\frac{2-m}{2}} \right). \quad (9)$$

Пусть $2 < m < 4$. Устремляя в неравенстве (9) R_2 к R , получим

$$R^{\frac{2-m}{2}} \geq \frac{2-m}{2} \sqrt{\frac{3C}{\pi}} + R_1^{\frac{2-m}{2}}. \quad (10)$$

Максимальное значение правой части неравенства (10) достигается при $R_1 = \left(\frac{3C}{\pi} \right)^{\frac{1}{4-m}}$ и равно $\frac{4-m}{2} \left(\frac{3C}{\pi} \right)^{\frac{2-m}{2(4-m)}}$. Поэтому $R^{\frac{2-m}{2}} \geq \frac{4-m}{2} \left(\frac{3C}{\pi} \right)^{\frac{2-m}{2(4-m)}}$ и, следовательно,

$$R \leq \left(\frac{4-m}{2} \right)^{\frac{2}{2-m}} \left(\frac{3C}{\pi} \right)^{\frac{1}{4-m}}. \quad (11)$$

При $0 < m < 2$ в (10) изменится знак неравенства:

$$R^{\frac{2-m}{2}} \leq \frac{2-m}{2} \sqrt{\frac{3C}{\pi}} + R_1^{\frac{2-m}{2}}.$$

И в этом случае правая часть неравенства достигает минимальное значение при $R = \left(\frac{3C}{\pi}\right)^{\frac{1}{4-m}}$. Отсюда снова получим неравенство (11).

При $m = 2$ неравенство (9) будет иметь вид $\frac{1}{\sqrt{\pi}R_1} \geq \frac{1}{\sqrt{3C}} \ln \frac{R_2}{R_1}$. Поэтому $\ln R \leq \sqrt{\frac{3C}{\pi}} \frac{1}{R_1} + \ln R_1$ и $\ln R \leq 1 + \ln \sqrt{\frac{3C}{\pi}}$. Но тогда

$$R \leq e \sqrt{\frac{3C}{\pi}}. \quad (12)$$

Оценка (12) получается из (11) предельным переходом при $m \rightarrow 2$. Теорема 1 доказана.

Замечание 1. Если $K(x, y) \leq -\alpha^2 < 0$, то $\iint_{x^2+y^2 \leq r^2} \frac{dx dy}{|K(x, y)|} \leq \frac{\pi r^2}{\alpha^2}$ и при $m = 2$ из (5) следует

$$\text{оценка Е. Хайнца } R \leq \frac{e\sqrt{3}}{\alpha}.$$

Замечание 2. Теорема 1 останется верной, если условие (4) выполняется при $r \geq r_0$, где r_0 – некоторая постоянная. В этом случае при доказательстве нужно рассматривать $r > r_0$. При необходимости r_0 можно уменьшить, увеличивая значение постоянной C .

Замечание 3. Если в условии (4) убрать ограничения на m , то существуют поверхности, которые проектируются на круг любого радиуса. Например, пусть $K(x, y) = -\frac{1}{(1+x^2+y^2)^n}$.

Тогда при $n < 1$ выполняется неравенство $\iint_{x^2+y^2 \leq r^2} \frac{dx dy}{|K(x, y)|} \leq Cr^m$, где $0 < m < 4$. По теореме 1

существует оценка для радиуса круга над которым задана поверхность. А при $n > 1$ имеем $m > 4$ и существует поверхность, которая проектируется на круг любого радиуса. В самом де-

ле, если $A = 1 + (1 + R^2)^{1-n}$, то поверхность $z = \int_0^r \sqrt{\frac{1}{A - (1+t^2)^{1-n}}} - 1 dt$, где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, проекти-

руется на круг любого радиуса R и ее кривизна равна $K(x, y) = \frac{1-n}{(1+x^2+y^2)^n}$.

Результаты этой работы можно сформулировать и для более общего уравнения Монжа–Ампера. Рассмотрим уравнение

$$z_{xx}z_{yy} - z_{xy}^2 = F(x, y, z, z_x, z_y). \quad (13)$$

Пусть $F(x, y, z, z_x, z_y) \leq K(x, y) \cdot (1 + z_x^2 + z_y^2)^2$, $K(x, y) < 0$ – гиперболическое уравнение.

Тогда верна теорема 2. Сформулируем ее.

Теорема 2. Если уравнение (13) имеет в круге C^2 -регулярное решение в круге $x^2 + y^2 \leq R^2$ и функция $K(x, y)$ удовлетворяет условию (4), то R удовлетворяет условию (5).

Доказательство теоремы 2 повторяет доказательство теоремы 1.

Литература

1. Ефимов, Н.В. Исследование полной поверхности отрицательной кривизны / Н.В. Ефимов. – М.: Докл. АН СССР, 1953. – 640 с.
2. Heinz, E. Über Flächen mit eindeutiger Projektion auf eine Ebene, deren Krümmungen durch Ungleichungen eingeschränkt sind / E. Heinz // Math. Ann. – 1955. – V. 129, № 5. – P. 451–454.

3. Ефимов, Н.В. Оценки размеров области регулярности решений некоторых уравнений Монжа–Ампера / Н.В. Ефимов // Математический сборник. – 1976. – Т. 100(142), № 3(7). – С. 356–363.
4. Азов, Д.Г. Об одном классе гиперболических уравнений Монжа–Ампера / Д.Г. Азов // Успехи математических наук. – 1983. – Т. 38, № 1. – С. 153–154.
5. Брысьев, А.Б. Оценка области регулярности решений некоторых нелинейных дифференциальных неравенств / А.Б. Брысьев // Украинский геометрический сборник. – 1985. – Вып. 28. – С. 19–21.
6. Азов, Д.Г. Изометрическое погружение n -мерных метрик в евклидовы и сферические пространства / Д.Г. Азов // Вестник Челябинского государственного университета. – 1994. – № 1(2). – С. 12–17.
7. Азов, Д.Г. Погружение методом Д. Блануши некоторых классов полных n -мерных римановых метрик в евклидовы пространства / Д.Г. Азов // Вестник Московского университета. – 1985. – № 5. – С. 72–74.

ESTIMATION OF BIJECTIVE PROJECTION AREA OF A SURFACE WITH NEGATIVE CURVATURE

D.G. Azov¹

The article deals with a surface of negative Gaussian curvature which is bijectively projected onto a circle. It provides sufficient conditions of existence of an estimate for the circle radius.

Keywords: surfaces with negative Gaussian curvature, hyperbolic Monge–Ampère equation, estimation of bijective projection area.

References

1. Efimov N.V. Issledovanie polnoj poverkhnosti otricatelnoj krivizny [Research of a complete surface with negative curvature]. *Dokl. AN SSSR*. 1953. 640 p. (in Russ.).
2. Heinz E. Über Flächen mit eineindeutiger Projektion auf eine Ebene, deren Krümmungen durch Ungleichungen eingeschränkt sind. *Math. Ann.* 1955. Vol. 129, no. 5. pp. 451–454.
3. Efimov N.V. Ocenki razmerov oblasti regulyarnosti reshenij nekotorykh uravnenij Monzha–Ampera [Estimation of the range of domain of regularity for the solution of Monge–Ampère equations]. *Matematicheskij sbornik*. 1976. Vol. 100(142), no. 3(7). pp. 356–363. (in Russ.).
4. Azov D.G. On a class of hyperbolic Monge–Ampère equations. *Russian Mathematical Surveys*. 1983. Vol. 38. p. 170. DOI:10.1070/RM1983v038n01ABEH003390
5. Brys'ev A.B. Ocenka oblasti regulyarnosti reshenij nekotorykh nelinejnykh differencial'nykh neravenstv [Estimation of the range of domain of regularity for the solution of nonlinear differential inequality]. *Ukrainskij geometricheskij sbornik*. 1985. Issue. 28. p. 19–21. (in Russ.).
6. Azov D.G. *Vestnik Chelyabinskogo gosudarstvennogo universiteta*. 1994. no. 1(2). pp. 12–17. (in Russ.).
7. Azov D.G. *Vestnik Moskovskogo universiteta*. 1985. no. 5. pp. 72–74.

Поступила в редакцию 7 ноября 2012 г.

¹ Azov Dmitry Georgievich is Associate Professor, Department of General Mathematics, South Ural State University.
E-mail: azykl@rambler.ru

КЛАССИФИКАЦИЯ УЗЛОВ В УТОЛЩЕННОМ ТОРЕ, МИНИМАЛЬНЫЕ ДИАГРАММЫ КОТОРЫХ НЕ ЛЕЖАТ В КОЛЬЦЕ И ИМЕЮТ ПЯТЬ ПЕРЕКРЁСТКОВ¹

А.А. Акимова²

Построена таблица узлов в утолщенном торе $T \times I$, минимальные диаграммы которых не лежат в кольце и имеют пять перекрестков.

Ключевые слова: узел, утолщенный тор, таблица узлов.

Введение

Усиление интереса к узлам в многообразиях типа $F \times I$, где F – замкнутая ориентируемая поверхность, привело к задаче табулирования узлов в этих многообразиях. Естественным образом возникло продолжение теории узлов в S^3 на узлы в утолщенном торе $T \times I$, где $T = S^1 \times S^1$ – самая простая замкнутая ориентируемая поверхность после сферы. Узлы в $T \times I$ можно задавать диаграммами, аналогичными сферическим диаграммам классических узлов. При этом роль преобразований Рейдемейстера сохраняется: они реализуют изотопии узлов. Из немногих работ по табулированию узлов в других многообразиях упомянем работы [1, 2] по узлам в проективном пространстве и [3] по узлам в полном торе. Эффективный метод табулирования тэнглов описан в [4]. Настоящая статья продолжает исследование, начатое в работе [5], руководствуясь её основными идеями. Автор выражает благодарность профессору С.В. Матвееву за постановку задачи и помощь в её решении.

Основной результат

Будем рассматривать узлы (т.е. простые замкнутые кривые) в утолщенном торе с точностью до эквивалентности в смысле гомеоморфизма. Проекция узла $K \subset T \times I$ представляет собой регулярный граф $G \subset T$ степени 4, для которого прохождение вершин по правилу «прямо вперед» определяет полный обход, отвечающий узлу. Диаграмма узла K получается из этого графа указанием (путем разрывов обхода), какой из проходящих через каждую вершину участков узла расположен выше, какой – ниже другого в смысле величины координаты $t \in I$. Две проекции считаются эквивалентными, если одна получается из другой гомеоморфизмом тора на себя. Эквивалентность диаграмм имеет тот же смысл, но дополнительно разрешается одновременно изменять типы всех перекрестков.

Определение 1. Диаграмма узла K называется минимальной, если ее сложность (число перекрестков) не превосходит сложности любой диаграммы любого узла, эквивалентного узлу K . Проекция $G \subset T$ называется минимальной, если минимальна хотя бы одна из отвечающих ей диаграмм.

Мы будем рассматривать только примарные узлы, т.е. узлы, отличные от локальных и составных. Локальный узел отвечает узлу в сфере, а составной является либо нетривиальной связной суммой узлов в сфере с уже табулированными узлами в $T \times I$, либо круговой связной суммой табулированных узлов [6]. Кроме того, мы не включаем в таблицу узлы, минимальные диаграммы которых можно расположить в некотором кольце на T . Дело в том, что такие узлы близки к узлам в полном торе, табулированным в [3]. Аналогичным образом определяются понятия примарных, локальных, составных проекций и диаграмм на торе.

Следующая теорема является основным результатом статьи.

Теорема 1. Существуют ровно 69 различных примарных узла в $T \times I$, минимальные диаграммы которых не лежат в кольце и имеют пять перекрестков. Эти диаграммы изображены на рис. 1.

Доказательство теоремы 1 состоит из четырех частей и аналогично доказательству соответствующей теоремы, подробно описанному в [5]. Сначала мы перебираем все абстрактные регулярные графы с 5 вершинами, потом – все минимальные проекции с 5 перекрестками на торе, не лежащие в кольце, затем – отвечающие им минимальные диаграммы. При этом дубликаты от-

¹ Исследования были поддержаны грантом РФФИ 12-01-00748, грантом ИШ-1414 2012 1 по государственной поддержке ведущих научных школ, а также грантом 12-Г1-1003/2 ОМН РАН

² Акимова Алена Андреевна – студент, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: akimova_susu@mail.ru

брасываются. На последнем этапе мы доказываем, что отвечающие этим диаграммам узлы в $T \times I$ различны. Для этого мы используем обобщенные полиномы Кауфмана [7, 8].

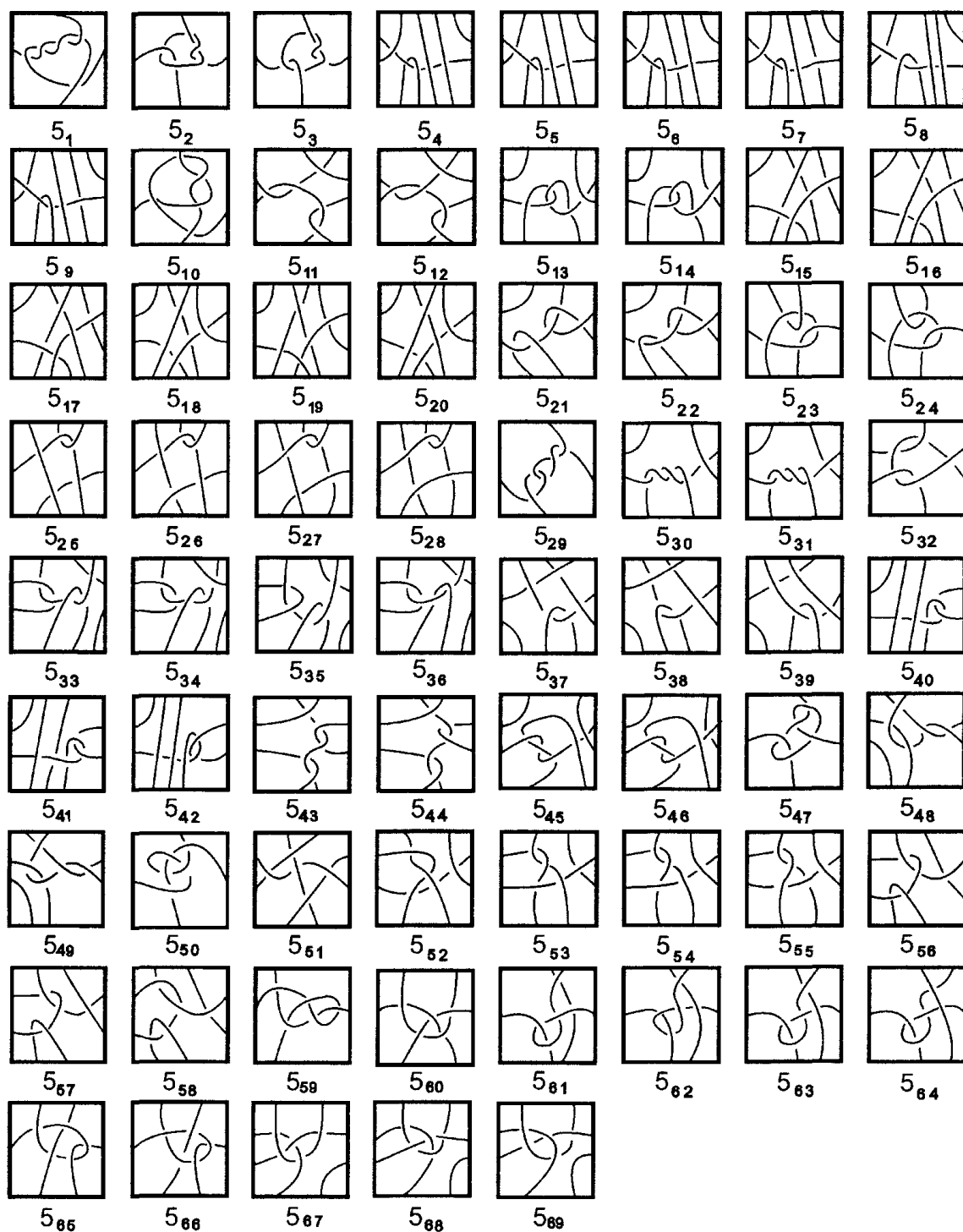


Рис. 1. Диаграммы с 5 перекрестками узлов на торе T , не лежащие в кольце. Тор T представлен в виде квадрата с отождествленными противоположными сторонами

Перечисление графов и проекций

Отметим, что минимальная проекция узла в $T \times I$, не лежащая в кольце, не может иметь петлю.

Лемма 1. Существуют ровно 6 регулярных графов без петель, имеющих пять вершин (рис. 2).

Доказательство леммы 1 аналогично доказательству леммы 2 работы [5], в которой был рассмотрен случай графов с $n \leq 4$ вершинами.

Теорема 2. Существуют ровно 34 различные примарные проекции узлов в $T \times I$, которые имеют 5 перекрестков, не имеют тривиальных петель и не лежат в кольце (рис. 3).

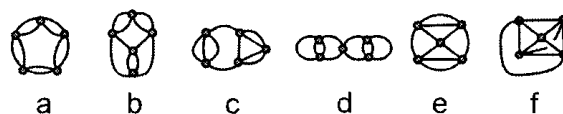


Рис. 2. Регулярные графы степени 4 с пятью вершинами, не имеющие петель

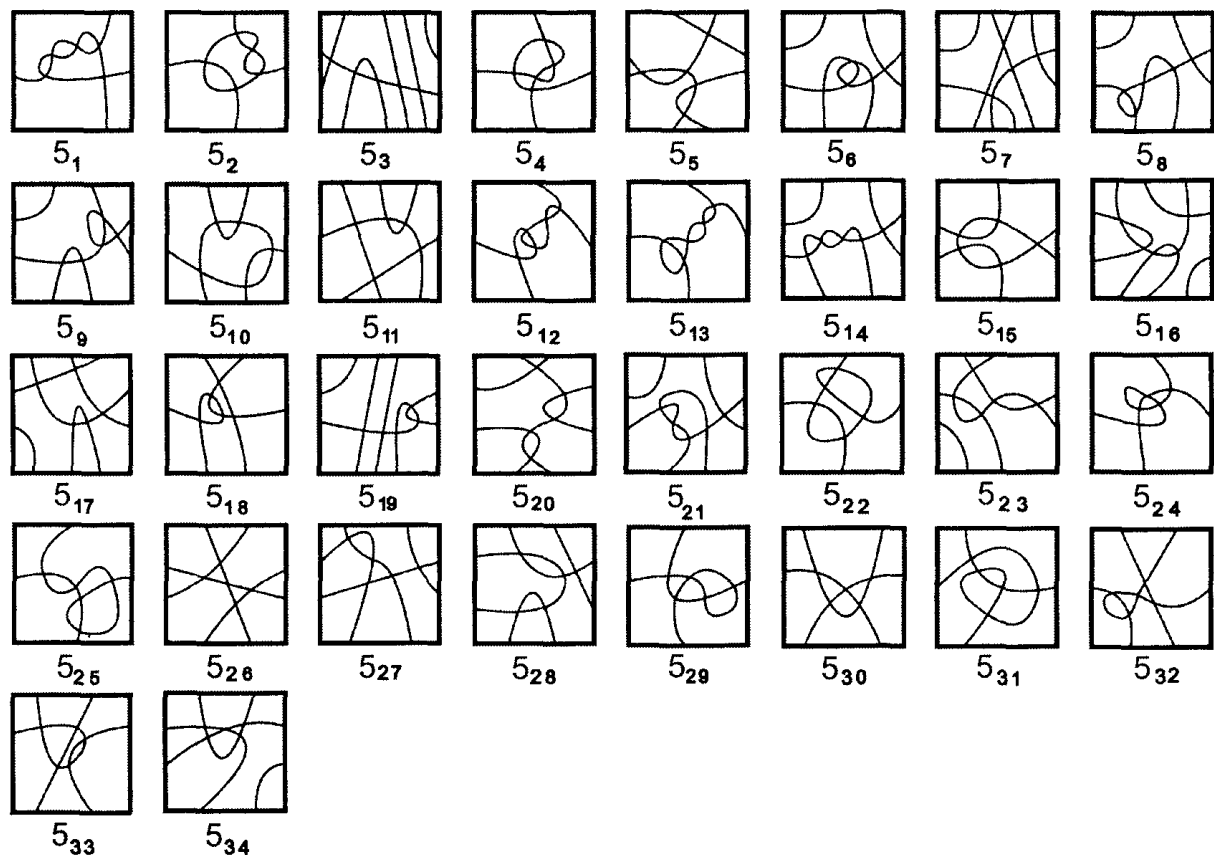


Рис. 3. Проекция с 5 перекрестками узлов на торе T , не лежащие в кольце.
Тор T представлен в виде квадрата с отождествленными противоположными сторонами

Доказательство теоремы 2 аналогично доказательству теоремы 2 работы [5], в которой был рассмотрен случай проекций с $n \leq 4$ перекрестками.

Доказательство теоремы 1

Восстановим по проекциям, описанным в теореме 2 (см. рис. 3), диаграммы узлов на T , указав тип каждого перекрестка. Для проекции с n вершинами это можно сделать 2^n , то есть в нашем случае 32 способами. Однако перебор можно существенно сократить за счет соображений, описанных в [5]. Например, тип одной вершины можно зафиксировать. Только две, а не четыре, разметки вершин двугульной грани могут дать минимальную диаграмму. Кроме того, только две разметки вершин треугольной грани, имеющей общее ребро с двугульной гранью, могут дать минимальную диаграмму.

Различность всех приведенных в таблице узлов доказывается с помощью вычисления их обобщенных полиномов Кауфмана [7, 8]. Точная формула такова:

$$X(K) = (-a)^{-3\omega(K)} \sum_s a^{\alpha(s)-\beta(s)} (-a^2 - a^{-2})^{\gamma(s)} x^{\delta(s)},$$

где $\alpha(s)$ и $\beta(s)$ – числа маркеров A и B в состоянии s , а $\gamma(s)$ и $\delta(s)$ – числа тривиальных и нетривиальных окружностей в торе, полученных в результате разрешения всех перекрестков, которое соответствует состоянию s . Разумеется, сумма берется по всем возможным состояниям, а $\omega(K)$ обозначает число скручивания диаграммы.

Все полиномы оказались различными. Отсюда следует, что все узлы, приведенные на рис. 1, различны. Попутно мы получаем доказательство минимальности каждой из 34 проекций, указанных в теореме 2.

Заключительные замечания

1. Таблица содержит ровно 5 гомологически тривиальных узлов: 5_{21} , 5_{22} , 5_{56} – 5_{58} .
2. Таблица содержит ровно 13 альтернированных диаграмм: 5_6 , 5_{12} , 5_{13} , 5_{17} , 5_{21} , 5_{31} , 5_{44} , 5_{46} , 5_{49} , 5_{51} , 5_{53} , 5_{56} , 5_{68} .
3. Максимальное число различных узлов, имеющих одну и ту же проекцию, равно 6. Этим свойством обладают проекции 5_3 и 5_7 .

Литература

1. Дроботухина, Ю.В. Аналог полинома Джонса для зацеплений в RP^3 и обобщение теоремы Кауфмана–Мурасуги / Ю.В. Дроботухина // Алгебра и анализ. – 1990. – Т. 2, № 3. – С. 171–191.
2. Drobotukhina, Yu.V. Classification of links in RP^3 with at most six crossings / Yu.V. Drobotukhina // Advances in Soviet Mathematics. – 1994. – V. 18, № 1. – P. 87–121.
3. Gabrovshek, B. Knots in the solid torus up to 6 crossings / B. Gabrovshek, I.M. Mroczkowski // J. Knot Theory Ramifications. – 2012. – V. 21. – 1250106. [43 c.] DOI: 10.1142/S0218216512501064
4. Enumerating the k-tangle projections / A. Bogdanov, V. Meshkov, A. Omelchenko, M. Petrov // J. Knot Theory Ramifications. – 2012. – V. 21, № 7. – 1250069. [17 c.] DOI: 10.1142/S0218216512500691
5. Акимова, А.А. Классификация узлов малой сложности в утолщённом торе / А.А. Акимова, С.В. Матвеев // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Математика, механика, информатика. – 2012. – Т. 12. – Вып. 3. – С. 10–21.
6. Matveev, S.V. Prime decompositions of knots in $T \times I$ / S.V. Matveev // Topology and its Applications. – 2012. – V. 159, № 7. – С. 1820–1824. DOI: 10.1016/j.topol.2011.04.022
7. Kauffman, L. State models and the Jones polynomial // Topology. – 1987. – V. 26, № 3. – P. 395–407.
8. Прасолов, В.В. Узлы, зацепления, косы и трёхмерные многообразия / В.В. Прасолов, А.Б. Сосинский. – М.: МЦНМО, 1997. – 352 с.

CLASSIFICATION OF KNOTS IN THE THICKENED TORUS WITH MINIMAL DIAGRAMS WHICH ARE NOT IN A CIRCLE AND HAVE FIVE CROSSINGS

A.A. Akimova¹

We compose the table of knots in the thickened torus $T \times I$ with minimal diagrams which are not in a circle and have five crossing intersections.

Keywords: knot, thickened torus, knot table.

References

1. Drobotukhina Yu.V. Analog polinoma Dzhonsa dlya zaceplenij v RP^3 i obobshhenie teoremy Kaufmana–Murasugi [An analogue of the Jones polynomial for links in RP^3 and a generalization of the Kauffman–Murasugi theorem]. *Leningrad Mathematical Journal*. 1991. Vol. 2, Issue 3. pp. 613–630.
2. Drobotukhina Yu.V. Classification of links in RP^3 with at most six crossings. *Advances in Soviet Mathematics*. 1994. Vol. 18, no. 1. pp. 87–121.
3. Gabrovshek B., Mroczkowski I.M. Knots in the solid torus up to 6 crossings. *J. Knot Theory Ramifications*. 2012. Vol. 21. 1250106. [43 pages] DOI: 10.1142/S0218216512501064.
4. Bogdanov A., Meshkov V., Omelchenko A., Petrov M. Enumerating the k-tangle projections // J. Knot Theory Ramifications. 2012. Vol. 21, no. 7. 1250069. [17 pages] DOI: 10.1142/S0218216512500691
5. Akimova A.A., Matveev S.V. Klassifikaciya uzlov maloj slozhnosti v utolshhennom tore [Classification of Low Complexity Knots in the Thickened Torus]. *Vestnik Novosibirskogo gosudarstvennogo universiteta*. Seriya: Matematika, mekhanika, informatika. 2012. Vol. 12. Issue. 3. pp. 10–21. (in Russ.).
6. Matveev S.V. Prime decompositions of knots in $T \times I$. *Topology and its Applications*. 2012. Vol. 159, no. 7. pp. 1820–1824. DOI: 10.1016/j.topol.2011.04.022
7. Kauffman L. State models and the Jones polynomial. *Topology*. 1987. Vol. 26, no. 3. pp. 395–407.
8. Prasolov V.V., Sosinskij A.B. Uzly, zacepleniya, kosy i tryokhmernye mnogoobraziya [Knots, linkage, braids and three-dimensional manifold]. Moscow: MCNMO, 1997. 352 p. (in Russ.).

Поступила в редакцию 24 октября 2012 г.

¹ Akimova Alyona Andreevna is Student, South Ural State University
E-mail akimova_susu@mail.ru

ЯВНАЯ РАЗНОСТНАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНОГО КВАЗИЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

А.В. Геренштейн¹, М.З. Хайрисламов²

Предлагается численный метод решения третьей смешанной задачи для одномерного квазилинейного уравнения теплопроводности параболического типа, основанный на использовании явной разностной схемы. Зависимость коэффициентов уравнения от температуры преодолевается введением новой искомой функции – первообразной теплопроводности.

Ключевые слова: теплопроводность, квазилинейное уравнение теплопроводности, явные разностные схемы, аппроксимация.

В настоящей работе используются идеи, изложенные в работах [1, 2], в которых была предложена и обоснована явная устойчивая схема для линейного уравнения теплопроводности.

Постановка задачи

Рассмотрим следующую постановку третьей смешанной задачи для одномерного однородного квазилинейного уравнения [3]:

$$\begin{cases} c(u) \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(q(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right), & 0 < t \leq T, \quad 0 < x < L, \\ u(x, 0) = \varphi(x), \\ - \left(q(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_{x=0} = \lambda_l(u(0, t)) (\theta_l - u(0, t)) + Q_l, \\ \left(q(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_{x=L} = \lambda_r(u(L, t)) (\theta_r - u(L, t)) + Q_r, \end{cases} \quad (1)$$

где $u = u(x, t)$ – искомая функция (температура стержня), $0 \leq x \leq L$, $0 \leq t \leq T$; L – длина стержня; T – конечный момент времени; $c(u)$ – заданная объемная теплоемкость материала стержня; $q(u)$ – заданная теплопроводность материала стержня; $\varphi(x)$ – заданная функция начального распределения температуры стержня; $\lambda_l(u)$ – коэффициент теплоотдачи на левом конце стержня; $\lambda_r(u)$ – коэффициент теплоотдачи на правом конце стержня; θ_l – температура внешней среды на левом конце стержня; θ_r – температура внешней среды на правом конце стержня; Q_l – мощность потока тепла на левом конце стержня; Q_r – мощность потока тепла на правом конце стержня. Функции $c = c(u)$, $q = q(u)$, $\lambda_l = \lambda_l(u)$ и $\lambda_r = \lambda_r(u)$ предполагаются непрерывными функциями температуры, заданными для всех значений температуры.

Замена искомой функции

Поскольку в уравнении присутствует член $q(u) \frac{\partial u}{\partial x}$, то удобно сделать следующую замену:

$$G(u) = \int_0^u q(\xi) d\xi.$$

Тогда для функции G получим уравнение

$$\frac{\partial G}{\partial t} = a^2(u) \frac{\partial^2 G}{\partial x^2}, \quad (2)$$

¹ Геренштейн Аркадий Васильевич – доцент, кандидат физико-математических наук, кафедра прикладной математики, Южно-Уральский государственный университет

² Хайрисламов Михаил Зинатуллаевич – аспирант, кафедра прикладной математики, Южно-Уральский государственный факультет
E-mail: zinatmk@gmail.com

где $a(u) = \sqrt{\frac{q(u)}{c(u)}}$ – коэффициент температуропроводности.

Функция $G(u)$ является строго монотонной функцией температуры.

Вывод рабочих формул

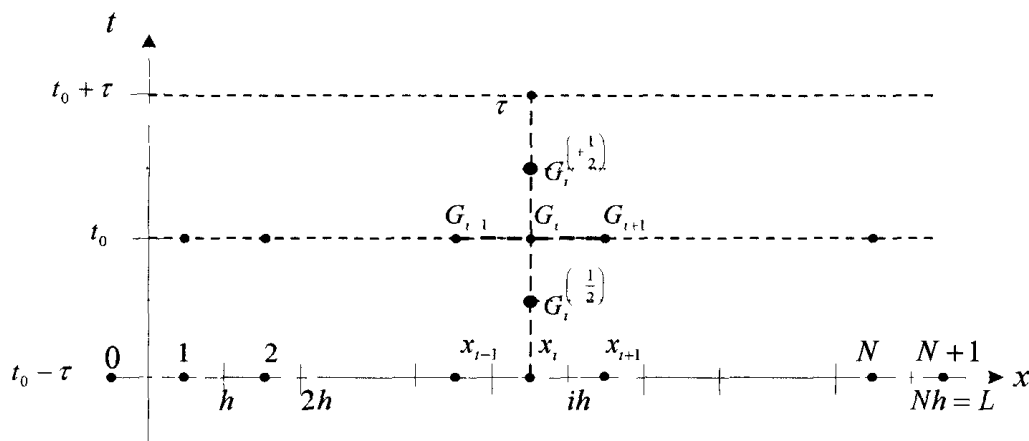
На плоскости (x, t) используется равномерная сетка [2]

$$\omega_{ht} = \omega_h \times \omega_\tau, \quad \omega_h = \left\{ x_i = \left(i - \frac{1}{2} \right) h, \quad i = 1, 2, \dots, N \right\},$$

$$\omega_\tau = \{ t_j = j\tau, \quad j = 0, 1, \dots \},$$

где $h = \frac{L}{N}$ – шаг по переменной x , τ – шаг по переменной t . Шаблон предлагаемой схемы представлен на рисунке.

Пусть $G_i(t) = G\left(\left(i - \frac{1}{2}\right)h, t\right)$ – значения функции G в сечении $x = \left(i - \frac{1}{2}\right)h$. Запишем уравнение (2) для точки $\left(\left(i - \frac{1}{2}\right)h, t\right)$, заменив вторую производную по пространственной координате на соответствующее разностное соотношение:



Шаблон разностной схемы

$$\frac{dG_i(t)}{dt} = a^2(u_i) \frac{G_{i-1}(t) - 2G_i(t) + G_{i+1}(t)}{h^2}, \quad t \in [0; \tau], \quad i = 2, \dots, N-1. \quad (3)$$

Аппроксимируем значения $G_{i-1}(t)$ и $G_{i+1}(t)$ с точностью до членов первого порядка малости:

$$G_{i-1}(t) \approx G_{i-1}(0) + \frac{dG_{i-1}}{dt}(0)t, \quad G_{i+1}(t) \approx G_{i+1}(0) + \frac{dG_{i+1}}{dt}(0)t.$$

В результате уравнение (3) преобразуется к виду

$$\frac{dG_i(t)}{dt} + \frac{2a^2(u_i)}{h^2} G_i(t) = \frac{a^2(u_i)}{h^2} \left(G_{i-1}(0) + G_{i+1}(0) + \left(\frac{dG_{i-1}}{dt}(0) + \frac{dG_{i+1}}{dt}(0) \right) t \right). \quad (4)$$

Погрешность аппроксимации оказывается равной $O\left(\frac{\tau^2}{h^2}\right)$, даже если производные $\frac{dG_{i-1}}{dt}(0)$ и

$\frac{dG_{i+1}}{dt}(0)$ вычисляются по формулам первого порядка точности.

Решением уравнения (4) является функция

$$G_i(t) = (G_i(0) - B)e^{-\frac{2a^2(u_i)}{h^2}t} + At + B, \quad t \in [0; \tau],$$

где $A = \frac{1}{2} \left(\frac{dG_{i-1}}{dt}(0) + \frac{dG_{i+1}}{dt}(0) \right)$, $B = \frac{G_{i-1}(0) + G_{i+1}(0)}{2} - A \cdot \frac{h^2}{2a^2(u_i)}.$

Для обозначения значений сеточной аппроксимации функции G на следующем временном слое будем использовать верхний индекс $(+1)$, а на предыдущем – верхний индекс (-1) , на следующем полуцелом временном слое – $\left(+\frac{1}{2}\right)$, а на предыдущем полуцелом временном слое – $\left(-\frac{1}{2}\right)$ (см. рисунок). Запишем теперь разностные аппроксимации для производных $\frac{dG_{i-1}}{dt}(0)$ и $\frac{dG_{i+1}}{dt}(0)$:

$$\frac{dG_{i-1}}{dt}(0) = \frac{G_{i-1}^{(+1)} - G_{i-1}^{(-1)}}{\tau}, \quad \frac{dG_{i+1}}{dt}(0) = \frac{G_{i+1}^{(+1)} - G_{i+1}^{(-1)}}{\tau}.$$

Окончательно расчетная формула приобретает вид

$$G_i^{(+1)} = (G_i - B)e^{-\frac{2a^2(u_i)\tau}{h^2}} + A\tau + B, \quad (5)$$

$$\text{где } A = \frac{1}{2\tau} \left(G_{i-1}^{(+1)} - G_{i-1}^{(-1)} + G_{i+1}^{(+1)} - G_{i+1}^{(-1)} \right), \quad B = \frac{G_{i-1} + G_{i+1}}{2} - A \cdot \frac{h^2}{2a^2(u_i)}.$$

Для расчета значений функции G на временном слое $t = \tau$, а также для вычисления значений функции в полуцелых слоях по времени можно воспользоваться формулами:

$$G_i(\tau) = G_i e^{-\frac{2a^2(u_i)\tau}{h^2}} + \left(1 - e^{-\frac{2a^2(u_i)\tau}{h^2}} \right) \frac{G_{i-1} + G_{i+1}}{2}, \quad (6)$$

$$G_i^{(+1/2)} = G_i e^{-\frac{a^2(u_i)\tau}{h^2}} + \left(1 - e^{-\frac{a^2(u_i)\tau}{h^2}} \right) \frac{G_{i-1} + G_{i+1}}{2}. \quad (7)$$

Для применения формул (5)–(7) необходимо по данному значению G_i найти температуру u_i такую, что $G_i = \int_0^{u_i} q(\xi) d\xi$. В силу монотонности функции $G(u)$ эту задачу можно решить методом деления отрезка пополам (дихотомии).

Аппроксимация краевых условий

Для выполнения краевых условий введены фиктивные узлы с номерами 0 и $N+1$ (см. рисунок): сначала рассчитываются значения искомой функции во внутренних точках, после чего исходя из краевых условий задаются ее значения в фиктивных узлах.

Перепишем краевое условие на левом конце в задаче (1) с учетом замены искомой функции:

$$-\frac{\partial G}{\partial x} \Big|_{x=0} = \lambda_l(u(0, t))(\theta_l - u(0, t)) + Q_l. \quad (8)$$

Обозначим через G^{-1} функцию, обратную к функции G , производную $\frac{\partial G}{\partial x} \Big|_{x=0}$ аппроксимируем разделенной разностью $\frac{\partial G}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{G_1 - G_0}{h}$, а значение $G(0, t)$ – полусуммой $G(0, t) = \frac{G_0 + G_1}{2}$. Тогда условие (8) может быть записано в виде

$$-\frac{2G_1}{h} + \frac{2}{h} G \left(G^{-1} \left(\frac{G_0 + G_1}{2} \right) \right) = \lambda_l \left(G^{-1} \left(\frac{G_0 + G_1}{2} \right) \right) \left(\theta_l - G^{-1} \left(\frac{G_0 + G_1}{2} \right) \right) + Q_l. \quad (9)$$

Обозначив $z = G^{-1}\left(\frac{G_0 + G_1}{2}\right)$, из (9) получим уравнение относительно z :

$$\frac{2}{h} \cdot G(z) - \lambda_l(z)(\theta_l - z) = \frac{2G_1}{h} + Q_l. \quad (10)$$

Считаем, что функции $q(u)$, $c(u)$, $\lambda_l(u)$ и $\lambda_r(u)$ заданы таблично на некотором конечном множестве точек оси температур. Пусть это множество точек есть множество чисел $\{z_1 = 0, z_2, \dots, z_m\}$. Для вычисления функций в остальных точках температуры используется кусочно-линейная аппроксимация. Поэтому уравнение (10) на каждом промежутке $[z_i; z_{i+1}]$, $i = \overline{1, m-1}$ является в общем случае квадратным. Несложные выкладки позволяют записать его в виде

$$Az^2 + Bz + C = 0, \quad (11)$$

где

$$A = \frac{q(z_{i+1}) - q(z_i)}{(z_{i+1} - z_i)h} + \frac{\lambda_l(z_{i+1}) - \lambda_l(z_i)}{z_{i+1} - z_i},$$

$$B = \frac{2}{h} \cdot \frac{q(z_i)z_{i+1} - q(z_{i+1})z_i}{z_{i+1} - z_i} - \frac{\lambda_l(z_{i+1}) - \lambda_l(z_i)}{z_{i+1} - z_i} \theta_l + \frac{\lambda_l(z_i)z_{i+1} - \lambda_l(z_{i+1})z_i}{z_{i+1} - z_i},$$

$$C = \frac{2}{h} \cdot \left(\int_0^{z_i} q(\xi) d\xi - q(z_i)z_i + \frac{q(z_{i+1}) - q(z_i)}{z_{i+1} - z_i} \cdot \frac{z_i^2}{2} \right) - \frac{\lambda_l(z_i)z_{i+1} - \lambda_l(z_{i+1})z_i}{z_{i+1} - z_i} \theta_l - \frac{2G_1}{h} - Q_l.$$

Если z^* – корень уравнения (11), принадлежащий промежутку $[z_i; z_{i+1}]$, то искомое значение G_0 в фиктивном узле с номером 0 будет равно

$$G_0 = 2G(z^*) - G_1.$$

Рассуждения для правого конца стержня аналогичны.

Результаты численных расчетов

Для проведения расчетов взята следующая третья смешанная задача:

$$\begin{cases} c(u) \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(q(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right), & 0 < t \leq T, \quad 0 < x < L, \\ u(x, 0) = \varphi_0, \\ - \left(q(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_{x=0} = \lambda_l(u(0, t))(\theta_l - u(0, t)) + Q_l, \\ \left(q(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_{x=L} = \lambda_r(u(L, t))(\theta_r - u(L, t)) + Q_r, \end{cases} \quad (12)$$

где $T = 100$ с, $L = 1$ м, $\varphi_0 = 22^\circ\text{C}$, $\theta_l = 1400^\circ\text{C}$, $\theta_r = 1400^\circ\text{C}$, $Q_l = 10^5$ Дж/(м²с), $Q_r = 0$ Дж/(м²с), а функции $c(u)$, $q(u)$, $\lambda_l(u)$ и $\lambda_r(u)$ заданы в табл. 1.

Таблица 1

Значения входных параметров задачи, являющихся функциями температуры

Параметр	Температура, °C									
	0	100	200	300	400	500	600	700	800	1000
$c(u)$, 10^6 Дж/(м ³ ·°C)	3,414	3,568	4,040	4,347	4,812	5,272	5,886	7,286	7,218	7,218
$q(u)$, Дж/(м ³ ·°C)	22,5	23,4	24,8	26,7	27,2	27,7	28,1	28,6	27	27
$\lambda_l(u)$, Дж/(м ² ·с·°C)	100	100	110	120	130	140	150	160	170	170
$\lambda_r(u)$, Дж/(м ² ·с·°C)	100	120	130	140	150	150	150	150	150	150

Результаты численных расчетов по предложенной схеме приведены в табл. 2. В связи с тем, что точное решение задачи (12) неизвестно, проводилось сравнение решения, полученного по предложенной схеме, с решением, полученным по чисто неявной схеме, которая является безусловно сходящейся [3, 5].

Таблица 2

Максимальная относительная погрешность решения в сравнении с решением по чисто неявной схеме

Число узлов N	Величина шага по времени τ , с			
	0,01	0,05	0,1	0,5
40	$4,7 \cdot 10^{-4}$	$4,5 \cdot 10^{-4}$	$1,52 \cdot 10^{-3}$	$1,72 \cdot 10^{-3}$
60	$1,12 \cdot 10^{-3}$	$1,12 \cdot 10^{-3}$	$1,19 \cdot 10^{-3}$	$2,18 \cdot 10^{-3}$
80	$9,9 \cdot 10^{-4}$	$1,0 \cdot 10^{-3}$	$1,06 \cdot 10^{-3}$	$2,15 \cdot 10^{-3}$
100	$7,5 \cdot 10^{-4}$	$7,7 \cdot 10^{-4}$	$8,7 \cdot 10^{-4}$	$2,25 \cdot 10^{-3}$
150	$4,2 \cdot 10^{-4}$	$4,7 \cdot 10^{-4}$	$5,9 \cdot 10^{-4}$	$2,43 \cdot 10^{-3}$
200	$2,7 \cdot 10^{-4}$	$3,4 \cdot 10^{-4}$	$5,0 \cdot 10^{-4}$	$2,67 \cdot 10^{-3}$

Литература

1. Геренштейн, А.В. Нагревание круга движущимся теплоисточником / А.В. Геренштейн, Н. Машрабов // Обзорение прикладной и промышленной математики. – 2008. – Т. 15, № 5. – С. 870–871.
2. Геренштейн, А.В. Устойчивые явные схемы для уравнения теплопроводности / А.В. Геренштейн, Е.А. Геренштейн, Н. Машрабов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2008. – Вып. 1. – № 15(115). – С. 9–11.
3. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
4. Годунов, С.К. Разностные схемы / С.К. Годунов, В.С. Рябенский. – М.: Наука, 1977. – 440 с.
5. Калиткин, Н.Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин; под. ред. А.А. Самарского. – М.: Наука, 1978. – 512 с.
6. Шуп, Т. Решение инженерных задач на ЭВМ / Т. Шуп. – М.: Мир, 1982. – 235 с.
7. Геренштейн, А.В. Расчет температурных полей в цилиндре при действии поверхностных тепловых источников «Тепло 4.0» / А.В. Геренштейн, Н. Машрабов, Е.А. Геренштейн // Государственная регистрация в Отраслевом фонде алгоритмов и программ № 9776, 20.02.2008. – М.: ФГНУ ГКЦИТ, 2008.
8. Машрабов, Н. Расчет температурных полей в цилиндре при действии поверхностных тепловых источников «Тепло 5.0» / Н. Машрабов, А.В. Геренштейн, Е.А. Геренштейн // Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2008612210, 30.04.2008, РОСПАТЕНТ.

EXPLICIT DIFFERENCE SCHEME FOR THE SOLUTION OF ONE-DIMENSIONAL QUASI-LINEAR HEAT CONDUCTIVITY EQUATION

A.V. Herreinstein¹, M.Z. Khayrislamov²

Numerical method for the solution of the third mixed boundary value problem for one-dimensional quasi-linear heat conductivity equation of a parabolic type based on the use of explicit difference scheme is given. Dependence of coefficients on temperature is overcome by the introduction of the new required function that is a primitive integral of conductivity.

Keywords: thermal conductivity, quasi-linear heat conductivity equation, explicit difference schemes, approximation.

References

1. Herreinstein A.V., Mashrabov N. Nagrevanie kruga dvizhushhimsya teploistochnikom [Circle heating by moving heat source]. *Obozrenie prikladnoj i promyshlennoj matematiki*. 2008. Vol. 15, no. 5. pp. 870–871. (in Russ.).
2. Herreinstein A.W., Herreinstein E.A., Mashrabov N. Ustojchivye yavnye skhemy dlya uravneniya teploprovodnosti [Steady Obvious Schemes for Equation of Heat Conductivity]. *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematicheskoe modelirovanie i programmirovaniye»*. 2008. Issue 1. no. 15(115). pp. 9–11. (in Russ.).
3. Samarskij A.A. *Teoriya raznostnykh skhem* [Theory of difference schemes]. Moscow: Nauka, 1989. 616 p. (in Russ.).
4. Godunov S.K., Ryaben'kij B.C. *Raznostnye skhemy* [Difference schemes]. M.: Nauka, 1977. 440 p. (in Russ.).
5. Kalitkin N.N. *Chislennyye metody* [Numerical methods]. M.: Nauka, 1978. 512 p. (in Russ.).
6. Shup T. Reshenie inzhenernykh zadach na EVM [The solution of engineering problems with a computer]. Moscow: Mir, 1982. 235 p. (in Russ.).
7. Herreinstein A.V., Mashrabov N., Herreinstein E.A. Raschet temperaturnykh polej v cilindre pri dejstvii poverxnostnykh teplovykh istochnikov «Teplo 4.0» [Calculation of temperature patterns in a cylinder at surface heat sources “Teplo 4.0” effect]. *Gosudarstvennaya registraciya v Otrasevom fonde algoritmov i programm № 9776*. 20.02.2008. Moscow: FGNU GKCIT, 2008. (in Russ.).
8. Mashrabov N., Herreinstein A.V., Herreinstein E.A. Raschet temperaturnykh polej v cilindre pri dejstvii poverkhnostnykh teplovykh istochnikov «Teplo 5.0» [Calculation of temperature patterns in a cylinder at surface heat sources “Teplo 5.0” effect]. *Svidetel'stvo o gosudarstvennoj registracii programm dlya EVM №2008612210*. 30.04.2008. ROSPATENT [Certificate of state registration of computer program No. 2008612210. 30.04.2008. ROSPATENT]. (in Russ.).

Поступила в редакцию 27 декабря 2012 г.

¹ Herreinstein Arcady Vasilevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Applied Mathematics Department, South Ural State University.

² Khayrislamov Mikhail Zinatullaevich is Post-Graduate student, Applied Mathematics Department, South Ural State University.
E-mail. zinatmk@gmail.com

МЕТОД ПРИГРАНИЧНОГО СЛОЯ ДЛЯ ПРИБЛИЖЕННОГО ПОСТРОЕНИЯ МНОЖЕСТВ ДОСТИЖИМОСТИ УПРАВЛЯЕМЫХ СИСТЕМ¹

А.А. Зимовец²

Приводится описание метода приграничного слоя, предназначенного для приближенного построения множеств достижимости некоторой динамической системы в n -мерном евклидовом пространстве при наличии фазовых ограничений. Предложенный метод относится к классу сеточных методов и использует подход, при котором в ходе итерационного процесса используются не все точки уже построенных множеств, а лишь точки из их приграничных слоев. Такой подход дает существенный выигрыш во времени счета по сравнению с классическими сеточными методами.

Ключевые слова: управляемая система, дифференциальное включение, множество достижимости, сеточный метод.

Введение

Представленная работа посвящена разработке эффективного численного метода построения множеств достижимости в задачах управления динамическими системами. Задача построения множеств достижимости возникает, прежде всего, в теории оптимального управления, а также в робототехнике, в экономике и т.д. Одной из труднорешаемых проблем, с которой сталкиваются математики при разработке алгоритмов численного построения множеств достижимости, является проблема их быстродействия. Дело в том, что численные методы базируются как на дискретном представлении времени, так и, в случае сеточных методов, на дискретном представлении пространства. При этом, чтобы вычислять множества достижимости динамических систем с приемлемой точностью, необходимо уменьшать данные дискреты до достаточно малых величин. Это приводит к быстрому росту количества обсчитываемых точек и, как следствие, к росту времени вычислений на рабочих ЭВМ. В связи с этим особенно актуальными стали методы, которые позволяют существенно сократить время вычислений. Одним из таких методов является предложенный в данной работе метод приграничного слоя, являющийся дальнейшим развитием идей и подходов, описанных в работах [1–6].

Постановка задачи

В работе рассматривается некоторая динамическая система, чья динамика описывается векторным дифференциальным уравнением вида

$$\dot{x} = f(t, x, u), \quad t \in [t_0, \vartheta], \quad u \in P, \quad (1)$$

где x – n -мерный фазовый вектор системы в евклидовом пространстве R^n , u – вектор управляющих воздействий, P – компакт в евклидовом пространстве R^p .

Будем считать, что для системы (1) выполнены следующие условия.

Условие А. Вектор-функция $f(t, x, u)$ непрерывна по совокупности переменных (t, x, u) в области $[t_0, \vartheta] \times R^n \times P$, а также для любой ограниченной замкнутой области $D \subset [t_0, \vartheta] \times R^n$ существует такая константа $L = L(D) \in (0, \infty)$, что

$$\|f(t, x^*, u) - f(t, x_*, u)\| \leq L \|x^* - x_*\|$$

для всех $(t, x, u) \in D \times P$.

Условие В. Существует такая константа $\mu \in (0, \infty)$, что

$$\|f(t, x, u)\| \leq \mu(1 + \|x\|)$$

¹ Работа выполнена в рамках программы Президиума РАН «Динамические системы и теория управления» при финансовой поддержке УрО РАН (проект 12-П-1-1002), а также при поддержке гранта Президента Российской Федерации по поддержке ведущих научных школ № ИПП-5927 2012 1

² Зимовец Артём Анатольевич – старший преподаватель, кафедра информационных технологий, Институт радиоэлектроники и информационных технологий – РГФ, Уральский федеральный университет. E-mail: aazimovets@gmail.com

для всех $(t, x, u) \in [t_0, \vartheta] \times R^n \times P$.

На систему (1) наложено фазовое ограничение $\Phi \subset [t_0, \vartheta] \times R^n$, имеющее в каждый момент времени $t \in [t_0, \vartheta]$ непустые сечения $\Phi(t)$ и удовлетворяющее условию С.

Условие С. Выполняется неравенство

$$\sup_{t_*, t^* \text{ из } [t_0, \vartheta] \mid |t_* - t^*| \leq \rho} d(\Phi(t_*), \Phi(t^*)) \leq \chi(\rho),$$

где $\chi(\rho)$ – монотонно убывающая при $\rho \downarrow 0$ функция, удовлетворяющая предельному соотношению $\lim_{\rho \downarrow 0} \chi(\rho) = 0$. Это условие не позволяет множеству Φ (а точнее его сечениям $\Phi(t)$) изменяться скачкообразно с изменением t . Кроме фазового ограничения для системы (1) задано множество стартовых позиций $X_0 \neq \emptyset: X_0 \subset \Phi(t_0)$.

Определение 1. Множеством достижимости $Y(t^*, t_*, x_*)$ в момент времени t^* системы (1), чья динамика стеснена фазовым ограничением Φ , с начальным условием $x(t_*) = x_*$ будем называть множество всех точек $x^* \in R^n$, для которых существует решение $x(t)$ системы (1), порожденное допустимым управлением $u(t)$, такое, что $x(t_*) = x_*$, $x(t^*) = x^*$ и $x(t) \in \Phi(t)$ при всех $t \in [t_*, t^*]$.

Под допустимым управлением $u(t)$ будем понимать любую измеримую по Лебегу функцию $u(t)$, удовлетворяющую включению $u(t) \in P$, $t \in [t_0, \vartheta]$.

Обозначим

$$Y(t^*, t_*, X_*) = \bigcup_{x_* \in X_*} Y(t^*, t_*, x_*), \quad X_* \in R^n.$$

Задача 1. Необходимо построить множество достижимости $Y(\vartheta, t_0, X_0)$ системы (1), чья динамика стеснена фазовым ограничением Φ .

Помимо системы (1) будем рассматривать дифференциальные включения (д.в.)

$$\dot{x} \in F(t, x), \quad t \in [t_0, \vartheta], \quad (2)$$

где $F(t, x) = co\{f(t, x, u): u \in P\}$ – выпуклая оболочка множества $\{f(t, x, u): u \in P\}$ в R^n .

Определение 2. Множеством достижимости $X(t^*, t_*, x_*)$ в момент времени t^* д.в. (2), чья динамика стеснена фазовым ограничением Φ , с начальным условием $x(t_*) = x_*$ будем называть множество всех точек $x^* \in R^n$, для которых существует решение $x(t)$ д.в. (2), такое, что $x(t_*) = x_*$, $x(t^*) = x^*$ и $x(t) \in \Phi(t)$ при всех $t \in [t_*, t^*]$.

Обозначим

$$X(t^*, t_*, X_*) = \bigcup_{x_* \in X_*} X(t^*, t_*, x_*), \quad X_* \in R^n.$$

Можно показать, что множества достижимости $Y(t^*, t_0, x_0)$ и $X(t^*, t_0, x_0)$ системы (1) и д.в. (2) соответственно связаны соотношением

$$X(t^*, t_0, x_0) = cl Y(t^*, t_0, x_0), \quad t \in [t_0, \vartheta],$$

где $cl Y(t^*, t_0, x_0)$ – замыкание множества $Y(t^*, t_0, x_0)$ в R^n .

Приближенное построение множеств достижимости с помощью метода Эйлера

Получение точного аналитического решения поставленной задачи представляется возможным далеко не всегда, поэтому значительное развитие получили численные методы приближенного решения задачи, среди которых можно выделить класс методов, называемых сеточными методами. Основная идея этих методов состоит в том, что в фазовом пространстве R^n вводится «кубическая» сетка Λ_h с шагом h , один из узлов которой совмещен с началом координат, а на промежутке времени $[t_0, \vartheta]$ вводится конечное разбиение $\Gamma = \{t_0, t_1, \dots, t_N = \vartheta\}$, $N < \infty$ с диамет-

ром разбиения $\Delta = \max_{i=0, N-1} \Delta_i$, $\Delta_i = t_{i+1} - t_i$, $i = \overline{0, N-1}$ и затем последовательно, шаг за шагом, строятся аппроксимации множеств достижимости д.в. (2), состоящие из конечного числа узлов X_i^h , $i = \overline{0, N}$ сетки Λ_h , сходящиеся в хаусдорфовой метрике с уменьшением шага h и диаметра Δ к множествам достижимости $X(t_i, t_0, X_0)$. Для простоты будем считать, что разбиение Γ равномерно, т.е. $\Delta_i = \Delta$, $i = \overline{0, N-1}$.

Для более детального описания сеточных методов введем отображение $\Lambda^n(X, \delta_n)$ ставящее в соответствие каждой точке x из $X \subset R^n$ ближайший к ней узел сетки Λ_{δ_n} в R^n с шагом δ_n , и отображение $\Lambda^p(P, \delta_p)$, ставящее в соответствие каждой точке u из $P \subset R^p$ ближайший к ней узел сетки Λ_{δ_p} в R^p с шагом δ_p . В случае ограниченности множеств X и P данные операции позволяют перейти от бесконечных наборов точек к конечным и реализовать приближенные вычисления на ЭВМ.

Поставим в соответствие стартовому множеству X_0 и множеству управляющих воздействий P с помощью отображений Λ^n и Λ^p соответственно множества $X_0^h = \Lambda^n(X_0, h)$ и $P^{\delta_p} = \Lambda^p(P, \delta_p)$, где $\delta_p = \delta_p(\Delta)$, $\delta_p(\Delta)$ – некоторая положительная функция переменной $\Delta > 0$, монотонно убывающая к нулю при $\Delta \rightarrow 0$. Далее введем обозначение

$$F^{\delta_p}(t, x) = co\{f(t, x, u) : u \in P^{\delta_p}\}, (t, x) \in [t_0, \vartheta] \times R^n. \quad (3)$$

Сопоставим каждой точке $(t, x) \in [t_0, \vartheta] \times R^n$ множество

$$\hat{F}(t, x) = \Lambda^n(F^{\delta_p}(t, x), \delta_n), \quad (4)$$

где $\delta_n = h/\Delta$. В соответствии с (3)–(4) можем записать

$$d(F(t, x), \hat{F}(t, x)) \leq d(F(t, x), F^{\delta_p}(t, x)) + d(F^{\delta_p}(t, x), \hat{F}(t, x)), \quad (5)$$

где

$$d(F^{\delta_p}(t, x), \hat{F}(t, x)) \leq \delta_n \frac{\sqrt{n}}{2}.$$

Из соотношения (5) и условия непрерывности функции $f(t, x, u)$ по совокупности переменных (t, x, u) на любой ограниченной замкнутой области D следует, что существует такая монотонная функция $\varphi^*(\delta)$ переменной $\delta = (\delta_n, \delta_p)$ ($\varphi^*(\delta) \downarrow 0$ при $\|\delta\| \downarrow 0$), что $d(F(t, x), \hat{F}(t, x)) \leq \varphi^*(\delta)$ при любых $(t, x) \in D$.

Предположим, что мы построили множество $X_i^h = \{x_1^i, x_2^i, \dots, x_{N_i}^i\}$. Тогда опишем один из простейших сеточных методов построения множества X_{i+1}^h по X_i^h .

1. Вычисление для каждой точки $x_j^i \in X_i^h$, $j = \overline{1, N_i}$ с помощью метода Эйлера множества $\hat{X}(t_{i+1}, t_i, x_j^i)$:

$$\hat{X}(t_{i+1}, t_i, x_j^i) = x_j^i + \Delta \hat{F}(t_i, x_j^i). \quad (6)$$

2. Объединение всех полученных множеств $\hat{X}(t_{i+1}, t_i, x_j^i)$ в множество

$$\hat{X}(t_{i+1}, t_i, X_i^h) = \bigcup_{x_j^i \in X_i^h} \hat{X}(t_{i+1}, t_i, x_j^i).$$

3. Построение пересечения множества $\hat{X}(t_{i+1}, t_i, X_i^h)$ с сечением $\Phi(t_{i+1})$ фазового ограничения Φ :

$$X_{i+1}^h = \hat{X}(t_{i+1}, t_i, X_i^h) \cap \Phi(t_{i+1}).$$

Данный метод будем называть методом «грубой силы», поскольку для расчета X_{i+1}^h рассматриваются все точки x'_j из X_i^h . Следует отметить, что при выборе $\delta_n = h/\Delta$ точки множества $\hat{X}(t_{i+1}, t_i, X_i^h)$ будут совпадать с узлами сетки Λ_h . Из результатов работы [3] следует, что при выборе шага $h = h(\Delta)$, где $h(\Delta) = \Delta h^*(\Delta)$, $h^*(\Delta)$ – некоторая положительная функция переменной $\Delta > 0$, монотонно убывающая к нулю при $\Delta \rightarrow 0$, построенные таким образом множества X_i^h , $i = \overline{0, N}$ сходятся в хаусдорфовой метрике к соответствующим множествам достижимости $X(t_i, t_0, X_0)$ д.в. (2) при $\Delta \rightarrow 0$.

Метод приграничного слоя

Основной недостаток метода «грубой силы» состоит в том, что для построения множества достижимости с приемлемой точностью требуется очень большой объем вычислений, существенно увеличивающийся с уменьшением шага сетки h и диаметра разбиения Δ . С целью сокращения времени счета в ряде исследований, например [5, 6], были предложены подходы, позволяющие при соблюдении определенных условий построить множества X_{i+1}^h , сходящиеся к соответствующим множествам достижимости $X(t_{i+1}, t_0, X_0)$, без полного перебора точек $x'_j \in X_i^h$. Для описания этих методов введем ряд определений.

Определение 3. Ячейкой Ξ сетки Λ_h будем называть множество точек, расположенных в узлах сетки Λ_h , составляющих вершины n -мерного куба с ребрами длиной h , ориентированными по осям соответствующей декартовой системы координат.

Пусть y_* – некоторый узел сетки Λ_h . Тогда символом $\Xi(y_*)$ будем обозначать множество ячеек сетки Λ_h , содержащих узел y_* .

Определение 4. Соседними узлами сетки Λ_h будем называть узлы, которые расположены в одной ячейке сетки Λ_h . Два соседних узла сетки Λ_h будем называть непосредственными соседями, если соединяющая их прямая параллельна одной из осей координат.

Пусть $X^h \subset \Lambda_h$ – некоторое множество точек, состоящее из узлов сетки Λ_h .

Определение 5. Точку $x^h \in X^h$ будем называть внутренней точкой множества X^h , если все ее непосредственные соседи также принадлежат множеству X^h .

Определение 6. Точку $x^h \in X^h$ будем называть граничной точкой множества X^h , если у нее есть хотя бы один непосредственный сосед, не принадлежащий множеству X^h .

Определение 7. Множество всех граничных точек множества X^h будем называть границей множества X^h и обозначать ∂X^h .

Основная идея методов, предложенных в исследованиях [5, 6], состоит в построении границы множества X_{i+1}^h с использованием лишь граничных точек множества X_i^h и дальнейшем заполнении области, ограниченной построенными граничными точками. Существенное ускорение в этих методах достигается за счет того, что алгоритм заполнения работает во много раз быстрее непосредственных вычислений точек x_j^{i+1} с использованием формулы (6).

Однако на практике при выполнении вычислений с помощью изложенного выше подхода зачастую возникает ряд проблем, среди которых можно выделить проблему рассеивания облаков точек, получающихся путем расчетов с использованием формулы (6), и проблему существенного изменения структуры границы с течением времени. Эти и другие проблемы были причинами того, что в предыдущих исследованиях (например, в [5]) не всегда корректно удавалось строить множества достижимости. В частности, при переходе к рассмотрению границы множеств достижимости терялась информация о так называемых дырах внутри множеств. В ряде случаев потеря информации о дырах была недопустима. Кроме того, выделение границы множества, представляющего из себя рассеянный набор точек, представляется нетривиальной задачей.

Для решения описанных выше проблем в представленной работе при построении границы множества X_{i+1}^h предлагается использовать не только граничные точки множества X_i^h , но и точ-

ки приграничного слоя. При этом проблема рассеивания облаков точек будет решаться путем построения выпуклой оболочки облаков, выбираемых по определенному правилу, а проблема существенного изменения структуры границы будет решаться путем построения процедуры выделения граничных точек, основанной на рассмотрении не только границы, но и приграничного слоя точек множества X_i^h .

Пусть $\partial_\varepsilon X_i^h$ – приграничный слой множества X_i^h толщины ε , определяемый соотношением

$$\partial_\varepsilon X_i^h = X_i^h \cap (X_i^h)_\varepsilon,$$

где $(X_i^h)_\varepsilon$ – множество узлов сетки Λ_h , расположенных в ε -окрестности границы множества X_i^h . Тогда процедура построения множества X_{i+1}^h по X_i^h состоит из следующих этапов.

1. Выделение приграничного слоя $\partial_{\varepsilon_i^*} X_i^h$ толщины $\varepsilon_i^* = 2\varepsilon_i$ множества X_i^h , где параметр ε_i определяется на основе вида системы (1).

2. Построение множества $X_{\varepsilon_i^*}^\Xi = \Lambda^n \left(\tilde{X}^\Xi(t_{i+1}, t_i, \partial_{\varepsilon_i^*} X_i^h), h \right)$, где

$$\tilde{X}^\Xi(t_{i+1}, t_i, \partial_{\varepsilon_i^*} X_i^h) = \bigcup_{x^h \in \partial_{\varepsilon_i^*} X_i^h} \tilde{X}^\Xi(t_{i+1}, t_i, x^h), \quad (7)$$

$$\tilde{X}^\Xi(t_{i+1}, t_i, x^h) = \bigcup_{\Xi \in \Xi(x^h)} co\hat{X}(t_{i+1}, t_i, \Xi \cap \partial_{\varepsilon_i^*} X_i^h). \quad (8)$$

3. Выделение границы $\partial X_{\varepsilon_i^*}^\Xi$ множества $X_{\varepsilon_i^*}^\Xi$.

4. Выделение внешнего приграничного слоя $\partial^h X_{\varepsilon_i^*}^\Xi = \Lambda^n \left((\partial X_{\varepsilon_i^*}^\Xi)_h \setminus X_{\varepsilon_i^*}^\Xi, h \right)$ толщины h множества $X_{\varepsilon_i^*}^\Xi$.

5. Выделение множества точек $S_{i+1} \subset \partial^h X_{\varepsilon_i^*}^\Xi$, каждая из которых имеет хотя бы одного непосредственного соседа $\bar{x}_* \in \partial^h X_{\varepsilon_i^*}^\Xi$, для которого выполняется

$$\hat{Z}(t_{i+1}, t_i, \bar{x}_*) \cap (X_i^h \setminus \partial_{\varepsilon_i^*} X_i^h) = \emptyset,$$

где $\hat{Z}(t_{i+1}, t_i, \bar{x}_*) = \bar{x}_* - \Delta \hat{F}(t_i, \bar{x}_*)$.

6. Построение множества X_{i+1}^h путем заполнения области, ограниченной множеством S_{i+1} , точками, пересекающимися с сечением $\Phi(t_{i+1})$ фазового ограничения Φ .

Описанный метод будем называть методом приграничного слоя. Разберем подробнее процесс построения множества X_{i+1}^h .

На шаге 1 происходит выделение точек множества X_i^h , удаленных от границы не далее чем на ε_i^* . Толщина ε_i должна быть выбрана такой, чтобы обеспечить корректное построение множества S_{i+1} на шаге 5.

На шаге 2 происходит построение множества $X_{\varepsilon_i^*}^\Xi$, которое будет представлять собой плотный набор точек без отдельно расположенных облаков при условии, что множество $\partial_{\varepsilon_i^*} X_i^h$ представляет собой плотный набор точек. Это свойство множества $X_{\varepsilon_i^*}^\Xi$ обеспечивается путем применения процедуры построения выпуклой оболочки в соотношении (8).

На шаге 3 выделяется граница множества, построенного на шаге 2. Следует отметить, что множество $\partial X_{\varepsilon_i^*}^\Xi$ может содержать как граничные, так и внутренние точки множества X_{i+1}^h .

На шаге 4 выделяется внешний приграничный слой множества $X_{\varepsilon_i}^{\Xi*}$, состоящий из непосредственных соседей граничных точек множества $X_{\varepsilon_i}^{\Xi*}$, не принадлежащих множеству $X_{\varepsilon_i}^{\Xi*}$.

На шаге 5 происходит выделение множества S_{i+1} , представляющего собой по сути границу множества X_{i+1}^h без учета фазовых ограничений. Множество S_{i+1} выделяется с помощью метода, основанного на проверке принадлежности непосредственных соседей точек $\partial X_{\varepsilon_i}^{\Xi*}$ множеству X_{i+1}^h с учетом погрешности вычислений. Для этого строятся предполагаемые множества точек, которые могли участвовать в построении каждой из точек внешнего приграничного слоя, и проверяется, пересекаются ли эти множества с внутренней частью множества X_{i+1}^h , не включающей в себя приграничный слой толщиной ε_i .

На шаге 6 происходит заполнение с учетом фазовых ограничений области, ограниченной точками S_{i+1} , в результате чего мы получаем множество X_{i+1}^h .

Определим толщину приграничного слоя, при которой на шаге 5 будут выделены все граничные точки множества X_{i+1}^h , построенного без учета фазовых ограничений, и только они. Пусть

$$\max_{f \in \hat{F}(t_i, x), x \in X_i^h} \|f\| \leq K_i.$$

Тогда будет выполняться соотношение

$$d(\hat{X}(t_{i+1}, t_i, x^h), x^h) \leq K_i \Delta, \quad (9)$$

где $x^h \in X_i^h$. Принимая во внимание (7)–(8), из неравенства (9) следует оценка

$$d(\tilde{X}^{\Xi}(t_{i+1}, t_i, X^h), X^h) \leq \sqrt{K_i^2 \Delta^2 + \Delta^2 (h/\Delta)^2 n}. \quad (10)$$

Обозначим

$$K_i^{\Xi} = \sqrt{K_i^2 + (h/\Delta)^2 n}.$$

Тогда из (10) следует соотношение

$$d(\Lambda^n(\tilde{X}^{\Xi}(t_{i+1}, t_i, X_i^h), h), X_i^h) \leq K_i^{\Xi} \Delta + h \frac{\sqrt{n}}{2}. \quad (11)$$

Из соотношения (11) следует, что при толщине приграничного слоя $\varepsilon_i^* > 2K_i^{\Xi} \Delta + h\sqrt{n}$ множество $X_{\text{int}} = \Lambda^n(\tilde{X}^{\Xi}(t_{i+1}, t_i, X_i^h \setminus \partial_{\varepsilon_i}^* X_i^h), h)$ не пересекается с множеством $X_{\text{edge}} = \Lambda^n(\tilde{X}^{\Xi}(t_{i+1}, t_i, \partial X_i^h), h)$, следовательно, множество $X_{\varepsilon_i}^{\Xi*}$ будет содержать все граничные точки множества X_{i+1}^h , построенного без учета фазовых ограничений.

Пусть

$$\varepsilon_i > (K_i^{\Xi} + K_{i+1}^*) \Delta + h \frac{\sqrt{n}}{2} + h, \quad (12)$$

где величина K_{i+1}^* определяется соотношением

$$\max_{f \in \hat{F}(t_i, x), x \in X_{i+1}^h + hB} \|f\| \leq K_{i+1}^*,$$

B – шар единичного радиуса с центром в начале координат. Тогда множества $\hat{Z}(t_{i+1}, t_i, \bar{x}_*)$ для непосредственных соседей $\bar{x}_*$ точек множеств S_{i+1} и $\partial X_{\varepsilon_i}^{\Xi*} \setminus S_{i+1}$ не пересекаются.

Таким образом, получаем, что при выполнении условия (12) на шаге 5 будет выделено множество точек, представляющее собой границу множества X_{i+1}^h без учета фазовых ограничений.

Пример

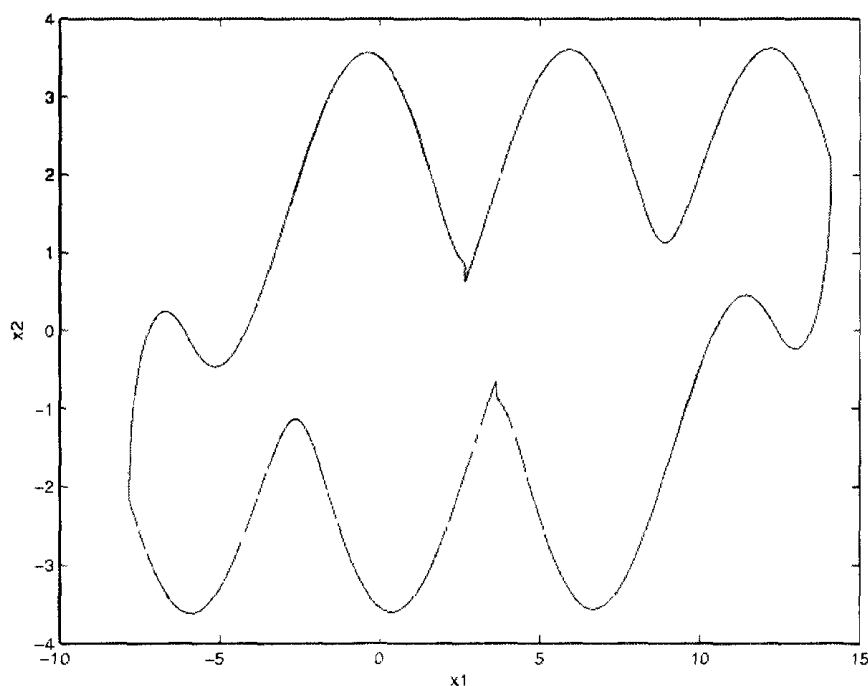
Рассмотрим нелинейную управляемую систему вида

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -\frac{g}{l} \sin x_1 - \frac{k}{m} x_2 + u \end{cases} \quad (13)$$

с параметрами $g=9,8$, $l=3$, $k=1,2$ и $m=1$. Здесь $x=(x_1, x_2) \in R^2$ – фазовый вектор системы (13), управления u удовлетворяют условию $|u| \leq r_u$, $r_u=3$. Будем считать, что на вектор x наложены фазовые ограничения $x \in \Phi = [-15, 15] \times [-5, 5]$. Можно показать, что система (13) с наложенными на нее фазовыми ограничениями удовлетворяет условиям **A–C**. Задача состоит в том, чтобы приближенно построить множество достижимости $X(\vartheta, t_0, X_0)$ системы (13) в момент времени $\vartheta=5$ при начальных условиях $x(0) \in X_0 = \{(\pi, 0)\}$ с учетом фазовых ограничений Φ .

Введем на промежутке времени $[t_0, \vartheta]$ равномерное разбиение $\Gamma = \{t_0, t_1, \dots, t_N = \vartheta\}$ с диаметром разбиения $\Delta = \frac{\vartheta - t_0}{N}$. Шаг сетки Λ_h будем выбирать в соответствии с правилом $h = \Delta^{\frac{3}{2}}$. Оценивая величину $\|f(t, x, u)\|$ с учетом фазовых ограничений, получаем, что для построения множеств X_i^h , сходящихся при $\Delta \rightarrow 0$ к множествам достижимости $X(t_i, t_0, X_0)$, $i = \overline{1, N}$, достаточно взять приграничный слой толщиной $\varepsilon^* = 53\Delta + 5\Delta^{\frac{3}{2}}$.

На рисунке изображен контур приближенно построенного множества достижимости $X(\vartheta, t_0, X_0)$ системы (13) в момент времени $\vartheta=5$ при $\Delta=0,05$, $h=0,01$. В результате применения метода приграничного слоя для приближенного построения множеств достижимости время расчетов в данном примере удалось сократить с 1 часа до 10 минут.



Множество достижимости системы (13) в момент времени $\vartheta=5$

Литература

1. Красовский, Н.Н. Теория управления движением / Н.Н. Красовский. – М.: Наука, 1968. – 476 с.
2. Ушаков, В.Н. О приближенном построении интегральных воронок дифференциальных включений / В.Н. Ушаков, А.П. Хрипунов // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1994. – Т. 34, № 7. – С. 965–977.

3. Гусейнов, Х.Г. Об аппроксимации областей достижимости управляемых систем / Х.Г. Гусейнов, А.Н. Моисеев, В.Н. Ушаков // Прикладная математика и механика. – 1998. – Т. 62, № 2. – С. 179–187.
4. Незнахин, А.А. Сеточный метод приближенного построения ядра выживаемости для дифференциального включения / А.А. Незнахин, В.Н. Ушаков // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2001. – Т. 41. – Вып. 6. – С. 895–908.
5. Пахотинских, В.Ю. Построение решений в задачах управления на конечном промежутке времени: дис. ... канд. физ.-мат. наук / В.Ю. Пахотинских. – Челябинск, 2005. – 160 с.
6. Михалев, Д.К. Построение решений в дифференциальных играх на конечном промежутке времени и визуализация решений: дис. ... канд. физ.-мат. наук / Д.К. Михалев. – Челябинск, 2009. – 206 с.

A BOUNDARY LAYER METHOD FOR THE CONSTRUCTION OF APPROXIMATE ATTAINABILITY SETS OF CONTROL SYSTEMS

A.A. Zimovets¹

A boundary layer method for the construction of approximate attainability sets of dynamical systems in the n -dimensional Euclidean space with phase constraints is given. This method belongs to the group of grid methods and it is based on the approach when only the points of a boundary layer are used in an iterative process but not the points of a constructed set. This method allows us to speed up the calculations by reducing the number of calculating points in traditional grid methods.

Keywords: control system, differential inclusion, attainability set, grid-based method.

References

1. Krasovskij N.N. *Teoriya upravleniya dvizheniem* [Theory of motion control]. Moscow: Nauka, 1968. 476 p. (in Russ.).
2. Ushakov V.N., Khripunov A.P. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 1994. Vol. 34, no. 7. pp. 833–842.
3. Gusejnov X.G., Moiseev A.N., Ushakov V.N. *Prikladnaya matematika i mekhanika* [Journal of Applied Mathematics and Mechanics]. 1998. Vol. 62, no. 2. pp. 179–187.
4. Neznakhin A.A., Ushakov V.N. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2001. Vol. 41, no. 6. pp. 846–859.
5. Pakhotinskikh V.Yu. *Postroenie reshenij v zadachax upravleniya na konechnom promezhutke vremeni: dis. kand. fiz.-mat. nauk* [The solution of control problems at finite time period: Cand. phys. math. sci. diss.]. Chelyabinsk, 2005. 160 p. (in Russ.).
6. Mikhalev D.K. *Postroenie reshenij v differencial'nykh igrakh na konechnom promezhutke vremeni i vizualizaciya reshenij: dis. ... kand. fiz.-mat. nauk* [The solution of the problems in differential games at finite time period and visualization of the solutions: Cand. phys. math. sci. diss.]. Chelyabinsk, 2009. 206 p. (in Russ.).

Поступила в редакцию 4 октября 2012 г.

¹ Zimovets Artem Anatolievich is Senior Teacher, Information Technology Department, Ural Federal University.
E-mail: aazimovets@gmail.com

ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ГРАНИЧНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НЕЛИНЕЙНЫМ МЕТОДОМ ПРОЕКЦИОННОЙ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ

Т.С. Камалтдинова¹

Решена обратная граничная задача в предположении, что искомое решение является кусочно-гладкой функцией и найдены оценки сверху приближенного решения. Данные оценки значительно превосходят по точности известные оценки.

Ключевые слова: операторное уравнение, регуляризация, оптимальный метод, оценка погрешности, некорректная задача.

Введение

В работе [1] аналогичная задача решена, в предположении, что искомое граничное условие $h(t)$ принадлежит пространству $C^2[0, \infty)$, линейным методом проекционной регуляризации. При этом были получены точные по порядку оценки погрешности приближенного решения.

В статье [2] предполагалось, что решение $h(t) \in \bigcap_{\varepsilon > 0} W_2^{\frac{3}{2}(1-\varepsilon)}(-\infty, \infty)$ и использован нелинейный метод проекционной регуляризации к решению более простой задачи.

В настоящей работе, используя методику работы [2], решена обратная граничная задача при условии кусочной гладкости решения и найдена оценка погрешности приближенного решения.

Постановка прямой задачи и исследование применимости преобразований Фурье для нахождения решения

Пусть тепловой процесс описывается уравнением

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}; \quad 0 < x < 1, t > 0, \quad (1)$$

$$u(x, 0) = 0; \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (2)$$

$$u(0, t) = h(t); \quad t \geq 0, \quad (3)$$

где $h(t)$ – кусочно-гладкая на полупрямой функция, имеющая конечное число точек разрыва первого рода производной $h'(t)$,

$$h(0) = 0 \quad (4)$$

и существует число $t_0 > 0$ такое, что для любого $t \geq t_0$

$$h(t) = 0; \quad (5)$$

$$u(1, t) = 0; \quad t \geq 0. \quad (6)$$

Рассмотрим классическое решение $u(x, t)$ задачи (1)–(3), (6), т.е. такое, что $u(x, t) \in C([0, 1] \times [0, \infty)) \cap C^{2,1}((0, 1) \times (0, \infty))$.

Из теоремы, сформулированной в [3, с. 424] следует единственность классического решения $u(x, t)$. Перейдем к исследованию его существования и применимости к его определению преобразования Фурье по переменной t .

Теорема 1. Пусть $\Phi(t) \in C[0, \infty)$ и ограничена на этой полупрямой. Тогда справедливы соотношения:

¹ Камалтдинова Татьяна Сергеевна – старший преподаватель, кафедра вычислительной математики, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: KamaltdinovaTS@mail.ru

$$\int_0^{\infty} u'_x(x, t) \Phi(t) dt = \frac{\partial}{\partial x} \left[\int_0^{\infty} u(x, t) \Phi(t) dt \right]$$

и

$$\int_0^{\infty} u''_{xx}(x, t) \Phi(t) dt = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\int_0^{\infty} u(x, t) \Phi(t) dt \right].$$

Теорема 2. Пусть $u(x, t)$ – решение задачи (1)–(3), (6). Тогда справедливы соотношения

$$\lim_{x \rightarrow 0} \int_0^{\infty} |u(x, t) - h(t)| dt = \lim_{x \rightarrow 1} \int_0^{\infty} |u(x, t)| dt = 0.$$

Постановка обратной граничной задачи

Обратная граничная задача заключается в том, что в постановке прямой задачи (1)–(6) граничное условие (3), определяемое функцией $h(t)$, не известно и подлежит определению, а вместо него в точке $x_1 \in (0, 1)$, измеряется температура $f(t)$ стержня, соответствующая данному процессу

$$u(x_1, t) = f(t); \quad t \geq 0. \quad (7)$$

Сведение обратной задачи (1)–(2), (6)–(7) к задаче вычисления значений неограниченного оператора

Пусть $Z \in L_2[0, \infty)$. Элемент $h(t) \in Z$ тогда и только тогда, когда

$$h(t) = \sum_{j=1}^n \varphi_j(t) + \psi(t),$$

где

$$\varphi_j(t) = \begin{cases} \frac{a_j}{2} \left[(t - c_j)^2 - b_j^2 \right]; & c_j - b_j \leq t \leq c_j + b_j, \\ 0; & t < c_j - b_j, t > c_j + b_j \end{cases}$$

$a_j, b_j, c_j > 0$, $c_j \geq b_j$ и $c_j \neq c_k$ при $j \neq k$, а $\psi(t) \in W_2^{3/2}[0, \infty)$.

Тогда предположим, что при $f(t) = f_0(t)$, участвующем в условии (7), существует функция $h_0(t)$, принадлежащая множеству Z , но функция $f_0(t)$ нам не известна, а вместо нее даны некоторая приближенная функция $f_\delta(t) \in L_2[0, \infty) \cap L_1[0, \infty)$ и число $\delta > 0$ такие, что

$$\|f_\delta - f_0\| \leq \delta. \quad (8)$$

Требуется, используя f_δ, δ и Z , определить приближенное решение $h_\delta(t)$ задачи (1)–(2), (6)–(8) и оценить отклонение $\|h_\delta - h_0\|_{L_2}$ приближенного решения $h_\delta(t)$ от точного $h_0(t)$.

Пусть $\bar{H} = L_2[0, \infty) + iL_2[0, \infty)$ – пространство над полем комплексных чисел, а F – оператор, отображающий $L_2[0, \infty) \cap L_1[0, \infty)$ в $\bar{H}$ и определяемый формулой

$$F[h(t)] = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} h(t) e^{-i\tau t} dt; \quad \tau \geq 0. \quad (9)$$

Лемма 1. Оператор F , определяемый формулой (9), изометричен.

Доказательство см. [1].

Из теорем 1 и 2 следует применимость преобразований Фурье к решению обратной граничной задачи (1)–(2), (6)–(8).

Таким образом, сведем эту задачу к следующей:

$$\frac{\partial^2 \hat{u}(x, \tau)}{\partial x^2} = i\tau \hat{u}(x, \tau); \quad x \in (0, 1), \tau \geq 0, \quad (10)$$

где $\hat{u}(x, \tau) = F[u(x, t)]$.

Из (6)–(7) следует, что

$$\hat{u}(1, \tau) = 0; \quad \tau \geq 0 \quad (11)$$

и

$$\hat{u}(x_1, \tau) = \hat{f}(\tau); \quad \tau \geq 0, \quad (12)$$

где $\hat{f}(\tau) = F[f(t)]$.

Из теоремы 2 следует, что решение $\hat{u}(x, \tau)$ задачи (10)–(12) непрерывно в полосе $[0, 1] \times [0, \infty)$. При этом решение уравнения (10) имеет вид

$$\hat{u}(x, \tau) = A(\tau)e^{\mu_0 x \sqrt{\tau}} + B(\tau)e^{-\mu_0 x \sqrt{\tau}}, \quad (13)$$

где $\mu_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+i)$, а $A(\tau)$ и $B(\tau)$ – произвольные функции.

Из (11)–(13) следует, что

$$\hat{h}(\tau) = \frac{\text{sh } \mu_0 \sqrt{\tau}}{\text{sh } \mu_0 (1-x_1) \sqrt{\tau}} \hat{f}(\tau), \quad \tau \geq 0. \quad (14)$$

Предположим, что $x_1 \leq \frac{1}{2}$, а $\tau \in [0, 2]$.

Так как

$$\left| \frac{\text{sh } \mu_0 \sqrt{\tau}}{\text{sh } \mu_0 (1-x_1) \sqrt{\tau}} \right|^2 = \frac{\text{ch } \sqrt{2\tau} - \cos \sqrt{2\tau}}{\text{ch}(1-x_1)\sqrt{2\tau} - \cos(1-x_1)\sqrt{2\tau}}, \quad (15)$$

то из (15) следует, что

$$\left| \frac{\text{sh } \mu_0 \sqrt{\tau}}{\text{sh } \mu_0 (1-x_1) \sqrt{\tau}} \right|^2 = \frac{\text{ch } \lambda - \cos \lambda}{\text{ch}(1-x_1)\lambda - \cos(1-x_1)\lambda}, \quad (16)$$

где $\lambda = \sqrt{2\tau}$.

Таким образом, из (16) следует, что

$$\left| \frac{\text{sh } \mu_0 \sqrt{\tau}}{\text{sh } \mu_0 (1-x_1) \sqrt{\tau}} \right| \leq \sqrt{\frac{2(e^2+1)}{e-2}} \quad 0 \leq \tau \leq 2. \quad (17)$$

Теперь оценим функцию $\left| \frac{\text{sh } \mu_0 \sqrt{\tau}}{\text{sh } \mu_0 (1-x_1) \sqrt{\tau}} \right|$ при $\tau \geq 2$.

$$\text{Так как } \left| \frac{\text{sh } \mu_0 \sqrt{\tau}}{\text{sh } \mu_0 (1-x_1) \sqrt{\tau}} \right| = \frac{\sqrt{\text{ch } \sqrt{2\tau} - \cos \sqrt{2\tau}}}{\sqrt{\text{ch}(1-x_1)\sqrt{2\tau} - \cos(1-x_1)\sqrt{2\tau}}} \leq \frac{\text{ch } \sqrt{\frac{\tau}{2}}}{\text{sh}(1-x_1)\sqrt{\frac{\tau}{2}}} \leq \frac{2e^{\sqrt{\frac{\tau}{2}}}}{e^{(1-x_1)\sqrt{\frac{\tau}{2}}} - e^{-(1-x_1)\sqrt{\frac{\tau}{2}}}},$$

то, учитывая, что $x_1 \leq \frac{1}{2}$, $\tau \geq 2$, а $2 \leq e \leq e^{2(1-x_1)\sqrt{\frac{\tau}{2}}}$, получаем

$$\left| \frac{\text{sh } \mu_0 \sqrt{\tau}}{\text{sh } \mu_0 (1-x_1) \sqrt{\tau}} \right| \leq 4e^{x_1 \sqrt{\frac{\tau}{2}}} \quad \tau \geq 2. \quad (18)$$

Так как

$$\sqrt{\frac{2(e^2+1)}{e-2}} > 4,$$

то из (17) и (18) получим соотношение на всей полупрямой

$$\left| \frac{\operatorname{sh} \mu_0 \sqrt{\tau}}{\operatorname{sh} \mu_0 (1 - x_1) \sqrt{\tau}} \right| \leq a e^{x_1 \sqrt{\frac{\tau}{2}}}, \quad \tau \geq 0, \quad (19)$$

где

$$a = \sqrt{\frac{2(e^2 + 1)}{e - 2}}. \quad (20)$$

Решение задачи вычисления значений неограниченного оператора (14) нелинейным методом проекционной регуляризации

Из предыдущего пункта следует, что обратную граничную задачу (1)–(2), (6)–(7) можно свести к задаче вычисления значений неограниченного оператора T , действующего из пространства $L_2[0, \infty)$ в $L_2[0, \infty)$ и определяемого формулой

$$T\hat{f}(\tau) = \frac{\operatorname{sh} \mu_0 \sqrt{\tau}}{\operatorname{sh}(1 - x_1) \mu_0 \sqrt{\tau}} \hat{f}(\tau), \quad \tau \geq 0, \quad (21)$$

где $\mu_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i)$, $\hat{f}, T\hat{f} \in \bar{H}$.

Тогда задачу (14) можно переписать следующим образом:

$$\hat{h}(\tau) = T\hat{f}(\tau); \quad \tau \geq 0. \quad (22)$$

Обозначим через $\hat{Z}$ множество функций из $L_2[0, \infty)$, определяемое соотношением

$$\hat{Z} = F[Z], \quad (23)$$

где оператор F определен формулой (9), и поставим задачу (22) вычисления значений неограниченного оператора T следующим образом.

Предположим, что при $\hat{f}(\tau) = \hat{f}_0(\tau)$ существует элемент $\hat{h}_0(\tau) \in \hat{Z}$, но точное значение $\hat{f}_0(\tau)$ нам не известно, а вместо него даны $\hat{f}_\delta(\tau) \in \bar{H}$ и $\delta > 0$ такие, что

$$\|\hat{f}_\delta(\tau) - \hat{f}_0(\tau)\| \leq \delta. \quad (24)$$

Требуется, используя исходную информацию $\hat{f}_\delta(\tau)$ и δ , определить приближенное значение $\hat{h}_\delta(\tau)$ и, учитывая принадлежность $\hat{h}_0(\tau)$ множеству $\hat{Z}$, оценить величину отклонения $\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\|$.

Для решения поставленной задачи введем регуляризующее семейство операторов $\{T_\alpha : \alpha \geq 0\}$, определяемое следующим образом:

$$T_\alpha \hat{f}(\tau) = \begin{cases} T\hat{f}(\tau); & \tau \leq \alpha, \\ 0; & \tau > \alpha \end{cases}, \quad \alpha > 0, \quad (25)$$

где оператор T определен формулой (21).

Таким образом, приближенное значение $\hat{h}_\delta^\alpha(\tau)$ неограниченного оператора T определим формулой

$$\hat{h}_\delta^\alpha = T_\alpha \hat{f}_\delta(\tau), \quad (26)$$

в которой оператор T_α определен (25). Параметр $\alpha = \alpha(\hat{f}_\delta, \delta)$ в формуле (26) определим из уравнения

$$\|T^{-1} \hat{h}_\delta^\alpha(\tau) - \hat{f}_\delta(\tau)\|^2 = 9\delta^2. \quad (27)$$

Аналогично, как это сделано в лемме 1 из [4], можно показать, что невязка $\|T^{-1} \hat{h}_\delta^\alpha(\tau) - \hat{f}_\delta(\tau)\|^2 \in C[0, \infty)$ не убывает по α , а также стремится к $\|\hat{f}_\delta\|^2$ при $\alpha \rightarrow \infty$ и к нулю

при $\alpha \rightarrow 0$. Из того, что $\|\hat{f}_\delta\|^2 > 9\delta^2$ следует разрешимость уравнения (27). Заметим, что в случае неединственности, решения уравнения (27) совпадают с отрезком $[\alpha_1, \alpha_2]$ и для любого $\alpha \in [\alpha_1, \alpha_2]$ $\hat{h}_\delta^\alpha = \hat{h}_\delta^{\alpha_1}$. Потому среди всех решений выберем минимальное. Из непрерывности спектра оператора T следует существование минимального из решений уравнения (27).

Таким образом, приближенные значения $\hat{h}_\delta(\tau)$ задачи (22), (24) определим формулой

$$\hat{h}_\delta(\tau) = pr \left[\hat{h}_\delta^{\alpha(\hat{f}_\delta, \delta)}(\tau); H_0 \right], \quad (28)$$

где $H_0 = F[L_2[0, \infty)]$.

Оценка погрешности $\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\|$ приближенного решения $\hat{h}_\delta$ задачи (22), (24)

Перейдем к оценке уклонения $\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\|$ приближенного значения $\hat{h}_\delta(\tau)$ от точного $\hat{h}_0(\tau)$. Так как $\hat{h}_0(\tau) \in \hat{Z}$, то на основании (23) существует число $c > 0$ такое, что для любого $\tau \geq 0$ справедливо соотношение

$$|\hat{h}_0(\tau)| \leq \frac{c}{\sqrt{1+\tau^4}}. \quad (29)$$

Из (29) следует существование числа $d > 0$ такого, что для любого $\varepsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right]$

$$\int_0^\infty \left[1 + \tau^{3(1-\varepsilon)}\right] |\hat{h}_0(\tau)|^2 d\tau \leq \frac{d}{\varepsilon}. \quad (30)$$

Так как

$$\hat{h}_0(\tau) \in H_0, \quad (31)$$

то на основании теоремы, доказанной в [2], и соотношений (28), (31) следует, что

$$\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\| \leq 6\sqrt{\frac{d}{\varepsilon}} G_\varepsilon[\bar{\alpha}(\delta, \varepsilon)], \quad (32)$$

где функция $G_\varepsilon(\sigma)$, следуя (14), (19), (20) и (30) определена параметрически:

$$\sigma = ae^{\sqrt[3]{\frac{\tau}{2}}}, \quad G_\varepsilon(\tau) = \left[1 + \tau^{3(1-\varepsilon)}\right]^{-\frac{1}{2}}; \quad \tau \geq 0, \quad (33)$$

а $\bar{\alpha}(\delta, \varepsilon)$ определена уравнением

$$\sqrt{\frac{d}{\varepsilon}} \frac{G_\varepsilon(\alpha)}{\alpha} = \delta. \quad (34)$$

Так как оценка (32) выполняется при любом $\varepsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right]$, то выберем значение $\bar{\varepsilon}(\delta)$, минимизирующее эту оценку, то есть

$$6\sqrt{\frac{d}{\bar{\varepsilon}(\delta)}} G_{\bar{\varepsilon}(\delta)}[\bar{\alpha}(\delta, \bar{\varepsilon}(\delta))] = \min_{\varepsilon \in (0, \frac{1}{2}]} 6\sqrt{\frac{d}{\varepsilon}} G_\varepsilon[\bar{\alpha}(\delta, \varepsilon)]. \quad (35)$$

Из (32)–(35) для $\hat{h}_\delta(\tau)$ будет справедлива оценка

$$\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\| \leq 6\sqrt{\frac{d}{\bar{\varepsilon}(\delta)}} G_{\bar{\varepsilon}(\delta)}[\bar{\alpha}(\delta, \bar{\varepsilon}(\delta))]. \quad (36)$$

Упростив оценку (36), выразим ее в элементарных функциях. Для этого заметим, что при $\varepsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right]$

$$G_{\varepsilon}(\sigma) = \left[1 + \left(\frac{2}{x_1^2} \right)^{3(1-\varepsilon)} \ln^{6(1-\varepsilon)} \left(\frac{\sigma}{a} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (37)$$

Из (37) следует, что при $\sigma > a$ и $\varepsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right]$

$$G_{\varepsilon}(\sigma) \leq \left[\frac{x_1^2}{2} \right]^{3(1-\varepsilon)} \ln^{-3(1-\varepsilon)} \left(\frac{\sigma}{a} \right). \quad (38)$$

Из (37) и (38) следует, что при $\sigma > a$ и $\varepsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right]$

$$\lim_{\sigma \rightarrow \infty} \frac{G_{\varepsilon}(\sigma)}{\left[\frac{x_1^2}{2} \right]^{3(1-\varepsilon)} \ln^{-3(1-\varepsilon)} \left(\frac{\sigma}{a} \right)} = 1, \quad (39)$$

а из (37) и (39) следует существование $\sigma_1 > a$ такого, что для любого $\sigma \geq \sigma_1$ и $\varepsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right]$

$$G_{\varepsilon}(\sigma) \geq \left[\frac{x_1}{2} \right]^{3(1-\varepsilon)} \ln^{-3(1-\varepsilon)} \left(\frac{\sigma}{a} \right). \quad (40)$$

Из того, что $\lim_{\sigma \rightarrow \infty} \frac{\sigma^{-1}}{\left[\frac{x_1}{2} \right]^{3(1-\varepsilon)} \ln^{-3(1-\varepsilon)} \left(\frac{\sigma}{a} \right)} = 0$ следует существование числа $\sigma_2 > \sigma_1$ такого, что

при $\sigma > \sigma_2$

$$\sigma < \left[\frac{x_1}{2} \right]^{3(1-\varepsilon)} \ln^{-3(1-\varepsilon)} \left(\frac{\sigma}{a} \right),$$

а из последнего соотношения и (40), что для любого $\sigma > \sigma_2$

$$\frac{1}{\sigma^2} < \frac{1}{\sigma} G_{\varepsilon}(\sigma). \quad (41)$$

Пусть $\bar{\alpha}(\delta, \varepsilon)$ определено уравнением (34), а $\hat{\alpha}(\delta, \varepsilon)$

$$\sqrt{\frac{d}{\varepsilon}} \alpha^{-2} = \delta. \quad (42)$$

Из (42) следует, что

$$\hat{\alpha}(\delta, \varepsilon) = \sqrt[4]{\frac{d}{\varepsilon \delta^2}}. \quad (43)$$

Из (34), (41) и (42) следует, что

$$\hat{\alpha}(\delta, \varepsilon) \leq \bar{\alpha}(\delta, \varepsilon). \quad (44)$$

Таким образом, из (32), (38) и (44) следует существование числа $\delta_0 > 0$ такого, что для любого $\delta \in (0, \delta_0)$ и $\varepsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right]$

$$\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\|^2 \leq 36 \frac{d}{\varepsilon} \left[\frac{x_1}{2} \right]^{3(1-\varepsilon)} \ln^{-3(1-\varepsilon)} \left(\frac{\hat{\alpha}(\delta, \varepsilon)}{a} \right). \quad (45)$$

Из (44) и (45) следует, что при $\delta \in (0, \delta_0)$ и $\varepsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right]$

$$\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\|^2 \leq 36 \frac{d}{\varepsilon} x_1^{3(1-\varepsilon)} \ln^{-3(1-\varepsilon)} \left(\frac{1}{a} \sqrt[4]{\frac{d}{\varepsilon \delta^2}} \right). \quad (46)$$

Пусть

$$\varepsilon(\delta) = \frac{1}{\ln \ln \frac{1}{\delta}},$$

тогда из (46) следует, что

$$\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\|^2 \leq 36 d \ln \ln \frac{1}{\delta} \ln^{-3} \left(\sqrt[4]{\frac{d}{a^4 \varepsilon(\delta) \delta^2}} \right) \left[\ln^{\varepsilon(\delta)} \left(\sqrt[4]{\frac{d \delta^2}{a^4 \varepsilon(\delta) \delta^4}} \right) \right]^3. \quad (47)$$

Предположим, что число $\delta_1 > \delta_0$ определено соотношением

$$\frac{\delta_1^2 d}{a^4} \ln \ln \frac{1}{\delta_1} < 1.$$

Тогда при $\delta \in (0, \delta_1)$ из (47)

$$\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\|^2 \leq 36 d \ln \ln \frac{1}{\delta} \ln^{-3} \left(\sqrt[4]{\frac{d \ln \ln \frac{1}{\delta}}{a^4 \delta^2}} \right) \left[\ln^{\varepsilon(\delta)} \frac{1}{\delta} \right]^3. \quad (48)$$

Так как при $\delta \in (0, \delta_1)$

$$\ln \ln^{\varepsilon(\delta)} \left(\frac{1}{\delta} \right) = \frac{1}{\ln \ln \frac{1}{\delta}} \ln \ln \frac{1}{\delta} = 1, \quad (49)$$

то из (49) следует, что

$$\left[\ln^{\varepsilon(\delta)} \left(\frac{1}{\delta} \right) \right]^3 = e^3, \quad (50)$$

а из (48) и (50), что

$$\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\|^2 \leq 36 d e^3 \ln \ln \frac{1}{\delta} \ln^{-3} \left(\sqrt[4]{\frac{d \ln \ln \frac{1}{\delta}}{a^4 \delta^2}} \right). \quad (51)$$

Предположим, что $\delta_2 < \delta_1$ и $\ln \ln \frac{1}{\delta_2} > \frac{a^4}{d}$, тогда при $\delta \in (0, \delta_2)$

$$\frac{d \ln \ln \frac{1}{\delta}}{a^4 \delta^2} > \frac{1}{\delta^2}. \quad (52)$$

Таким образом, из (51) и (52) следует, что при $\delta \in (0, \delta_2)$

$$\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\|^2 \leq 36 d e^3 \ln \ln \frac{1}{\delta} \ln^{-3} \left(\frac{1}{\sqrt{\delta}} \right). \quad (53)$$

Из (53) следует, что при $\delta \in (0, \delta_2)$ справедливо соотношение

$$\|\hat{h}_\delta(\tau) - \hat{h}_0(\tau)\| \leq 17 \sqrt{d e^3} \sqrt{\ln \ln \frac{1}{\delta}} \ln^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{\delta} \right).$$

Литература

1. Танана, В.П. О гарантированной оценке точности приближенного решения одной обратной граничной задачи тепловой диагностики / В.П. Танана, А.И. Сидикова // Труды ИММ УрО РАН. – 2010. – Т. 16, № 2. – С. 238–252.
2. Танана, В.П. Об оценке погрешности приближенного решения одной обратной задачи в классе кусочно-гладких функций / В.П. Танана, А.Б. Бредихина, Т.С. Камалтдинова // Труды ИММ УрО РАН. – 2012. – Т. 18, № 1. – С. 281–288.
3. Михлин, С.Г. Курс математической физики / С.Г. Михлин. – М.: Наука, 1968. – 576 с.
4. Танана, В.П. Об оптимальном по порядку методе решения условно-корректных задач / В.П. Танана, Н.М. Япарова // Сибирский журнал вычислительной математики. – 2006. – Т. 9, № 4. – С. 353–368.

APPROXIMATE SOLUTION OF INVERSE BOUNDARY PROBLEM FOR THE HEAT CONDUCTIVITY EQUATION BY NONLINEAR METHOD OF PROJECTION REGULARITY

*T.S. Kamaltdinova*¹

Inverse boundary problem is solved in the hypothesis that the required solution is a piecewise smooth function, estimates of above approximate solution are given. The estimates are considerably superior to the known estimates by the accuracy.

Keywords: operator equation, regularity, optimal method, error estimation, ill-posed problem.

References

1. Tanana V.P., Sidikova A.I. O garantirovannoj ocenke tochnosti priblizhennogo resheniya odnoj obratnoj granichnoj zadachi teplovoj diagnostiki [On the guaranteed accuracy estimate of an approximate solution of one inverse problem of thermal diagnostics]. *Trudy Instituta Matematiki I Mekhaniki URO RAN*. 2010. Vol. 16, no. 2. pp. 238–252. (in Russ.).
2. Tanana V.P., Bredikhina A.B., Kamaltdinova T.S. *Trudy Instituta Matematiki I Mekhaniki URO RAN*. 2012. Vol. 18, no. 1. pp. 281–288. (in Russ.).
3. Mikhlin S.G. Kurs matematicheskoy fiziki [Course of mathematical physics]. Moscow: Nauka, 1968. 576 p. (in Russ.).
4. Tanana V.P., Yaparova N.M. Ob optimal'nom po poryadku metode resheniya uslovno-korrektnykh zadach [The optimum in order method of solving conditionally-correct problems]. *Sib. Zh. Vychisl. Mat.* 2006. Vol. 9, no. 4. pp.353–368. (in Russ.).

Поступила в редакцию 29 ноября 2012 г.

¹ Kamaltdinova Tatyana Sergeevna is a Senior Lecturer, Numerical Mathematics Department, South Ural State University.
E-mail: KamaltdinovaTS@mail.ru

ОБ ОДНОМ ОБОБЩЕНИИ ТЕОРЕМЫ О СРЕДНЕМ ДЛЯ ГАРМОНИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

В.В. Карачик¹

Исследуется среднее значение на единичной сфере произведения гармонической в шаре функции на однородный полином.

Ключевые слова: гармонические функции, теорема о среднем, гармонические полиномы.

1. Введение

Настоящая работа является продолжением исследований автора, изложенных в [1–3]. В [2], была построена полная система однородных гармонических полиномов от n переменных $\{G_{(\nu)}(x)\}$, которая ортогональна в $L_2(\partial S)$, где ∂S – единичная сфера в $\mathbb{R}^n$. Оказывается, что эта система ортогональна и в $\mathcal{P}$ (теорема 3). В качестве приложения этих результатов в теореме 5 получена формула для значения выражения вида $G_{(\nu)}(D)u(x)|_{x=0}$, где $u(x)$ – гармоническая в S и непрерывная в $\bar{S}$ функция. В теореме 6 получена формула вычисления интеграла вида $\int_{|x|=1} Q_m(x) ds_x$, где $Q_m(x)$ – однородный полином.

2. Полная система гармонических полиномов

Рассмотрим полиномы вида

$$G_k^s(x_{(n)}) = \sum_{i=0}^{[k/2]} (-1)^i \frac{|x_{(n-1)}|^{2i} x_n^{k-2i,1}}{(2,2)_i (n-1+2s,2)_i},$$

где обозначено $x^{k,1} = x^k / k!$, $x_{(n-1)} = (x_1, \dots, x_{n-1})$ и $(a, b)_k = a(a+b) \cdots (a+kb-b)$ – обобщенный символ Похгаммера с соглашением $(a, b)_0 = 1$. Пусть $\mathbb{N}_0 = \mathbb{N} \cup \{0\}$ и

$$H_k^s(x_{(2)}) = \sum_{i=0}^{[(k-s)/2]} (-1)^i x_1^{2i+s,1} x_2^{k-2i-s,1}, \quad s=0,1.$$

Теорема 1. [2] При $n \geq 2$ и $\nu_1 \geq \dots \geq \nu_n$, $\nu_n = 0, 1$ полиномы

$$G_{(\nu)}(x_{(n)}) = \prod_{i=1}^{n-2} G_{\nu_i - \nu_{i+1}}^{\nu_{i+1}}(x_{(n-i+1)}) H_{\nu_{n-1}}^{\nu_n}(x_{(2)}),$$

где $\nu = (\nu_1, \dots, \nu_n)$, $\nu \in \mathbb{N}_0^n$ образуют базис в однородных степени ν_1 гармонических полиномах.

Теорема 2. [2] Полиномы $\{G_{(\nu)}\}$ при различных векторах $\nu \in \mathbb{N}_0^n$, удовлетворяющих условию $\nu_1 \geq \nu_2 \geq \dots \geq \nu_n$, $\nu_n = 0, 1$, ортогональны на единичной сфере.

Рассмотрим полиномы $G_{(\nu)}(x)$ в пространстве полиномов $\mathcal{P} = \{P(x) = \sum_{\alpha} p_{\alpha} x^{\alpha}\}$ со скалярным произведением $\langle P(x), Q(x) \rangle = P(D)Q(x)|_{x=0}$ [1]. Норму полинома $P(x) \in \mathcal{P}$ будем обозначать $|P|_D$. Например, $|x_1^2 + \dots + x_n^2|_D = \Delta |x|^2|_{x=0} = 2n$. Система полиномов $G_{(\nu)}(x)$ обладает еще одним интересным свойством.

Теорема 3. Полиномы $G_{(\nu)}(x)$ для различных векторов $\nu \in \mathbb{N}_0^n$, удовлетворяющих условию $\nu_1 \geq \dots \geq \nu_n$ ($\nu_n = 0, 1$) ортогональны в $\mathcal{P}$.

¹ Карачик Валерий Валентинович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра математического анализа, Южно-Уральский государственный университет
E-mail karachik@susu.ru

Доказательство. Нам необходимо проверить справедливость следующего утверждения: $\nu \neq \mu \Rightarrow \langle G_{(\nu)}, G_{(\mu)} \rangle = 0$. Применим индукцию по размерности n . Рассмотрим случай $\nu_1 = \mu_1$ поскольку если $\nu_1 \neq \mu_1$, то гармонические полиномы $G_{(\nu)}(x)$ и $G_{(\mu)}(x)$ ортогональны, как имеющие различную степень. Это следует из формулы Гаусса–Остроградского [4]

$$0 = \int_{|x|=1} \left(H_p(x) \frac{\partial}{\partial \nu} H_m(x) - H_m(x) \frac{\partial}{\partial \nu} H_p(x) \right) ds_x = (m-p) \int_{|x|=1} H_p(x) H_m(x) ds_x,$$

где $H_p(x)$ и $H_m(x)$ однородные гармонические полиномы степеней $p \neq m$ соответственно.

Пусть $n=2$. Полиномы $G_{(\nu)}(x)$ и $G_{(\mu)}(x)$ ортогональны поскольку они имеют различную четность по x_1 : если $\nu_2 = 0$ тогда $G_{(\nu)}(x)$ – четный, а если $\nu_2 = 1$, то нечетный.

Пусть $m > 2$. Рассмотрим случай $\nu_2 < \mu_2$. Определим G -полиномы для $k \in \mathbb{Z} \setminus \mathbb{N}_0$ как $G_k^s \equiv 0$ и обозначим $\tilde{\Delta} = \Delta - \partial^2 / \partial x_n^2$. Нетрудно проверить, что

$$\frac{\partial}{\partial x_n} G_{(\mu)}(x) = G_{(\mu_-)}(x), \quad \tilde{\Delta} G_{(\mu)}(x) = -G_{(\mu_+)}(x),$$

где $\mu_- = (\mu_1 - 1, \mu_2, \dots, \mu_n)$ и $\mu_+ = (\mu_-)_+$. Поэтому, будем иметь

$$G_{(\nu)}(D)G_{(\mu)}(x) = G_{(\bar{\nu})}(\tilde{D}) \left(G_{\nu_1-\nu_2}^{\nu_2}(D) G_{\mu_1-\mu_2}^{\mu_2}(x) G_{(\bar{\mu})}(\tilde{x}) \right). \quad (1)$$

Поскольку при $k \geq m$ и однородном гармоническом полиноме $H_s(x)$

$$\Delta^m \frac{|x|^{2k} H_s(x)}{(2,2)_k (n+2s,2)_k} = \frac{|x|^{2k-2m} H_s(x)}{(2,2)_{k-m} (n+2s,2)_{k-m}},$$

то будем иметь

$$\begin{aligned} G_{k_1}^{\nu_2}(D) G_{k_2}^{\mu_2}(x) H_{\mu_2}(\tilde{x}) &= \\ &= \sum_{i=0}^{[k_1/2]} \frac{(-1)^i \tilde{\Delta}^i D_n^{k_1-2i}}{(2,2)_i (n-1+2\nu_2,2)_i (k_1-2i)!} \sum_{j=0}^{[k_2/2]} \frac{(-1)^j |\tilde{x}|^{2j} x_n^{k_2-2j,!}}{(2,2)_j (n-1+2\mu_2,2)_j} H_{\mu_2}(\tilde{x}) = \\ &= \sum_{i=0}^{[k_1/2]} \frac{1}{(2,2)_i (n-1+2\nu_2,2)_i (k_1-2i)!} \sum_{j=i}^{[(k_2-k_1)/2]+1} \frac{(-1)^{j-i} |\tilde{x}|^{2j-2i} x_n^{k_2-k_1+2i-2j,!}}{(2,2)_{j-i} (n-1+2\mu_2,2)_{j-i}} H_{\mu_2}(\tilde{x}) = \\ &= C(k_1, \nu_2) \sum_{j=0}^{[(k_2-k_1)/2]} \frac{(-1)^j |\tilde{x}|^{2j} x_n^{k_2-k_1-2j,!}}{(2,2)_j (n-1+2\mu_2,2)_j} H_{\mu_2}(\tilde{x}) = C(k_1, \nu_2) G_{k_2-k_1}^{\mu_2}(x) H_{\mu_2}(\tilde{x}), \end{aligned}$$

где $C(k_1, \nu_2) = \sum_{i=0}^{[k_1/2]} 1/((2,2)_i (n-1+2\nu_2,2)_i (k_1-2i)!)$. Значит из (1) при $k_1 = \nu_1 - \nu_2$ и $k_1 = \mu_1 - \mu_2$

выводим

$$G_{(\nu)}(D)G_{(\mu)}(x) = C(\nu_1 - \nu_2, \nu_2) G_{(\bar{\nu})}(\tilde{D}) \left[G_{(\mu_1-\mu_2)-(\nu_1-\nu_2)}^{\mu_2}(x) G_{(\bar{\mu})}(\tilde{x}) \right]. \quad (2)$$

Так как $\mu_1 - \mu_2 - \nu_1 + \nu_2 = \nu_2 - \mu_2 < 0$, то мы можем заключить, что $G_{(\nu)}(x)$ и $G_{(\mu)}(x)$ ортогональны. В силу симметричности скалярного произведения это утверждение верно и при $\nu_2 > \mu_2$. Рассмотрим последний случай $\nu_2 = \mu_2$. Используя равенство (2) и учитывая, что $G_0^s = 1$ получим $\langle G_{(\nu)}, G_{(\mu)} \rangle = C(\nu_1 - \nu_2, \nu_2) \langle G_{(\bar{\nu})}, G_{(\bar{\mu})} \rangle$. Так как $\nu_1 = \mu_1$ и $\nu \neq \mu$ имеем $\bar{\nu} \neq \bar{\mu}$. Следовательно, по индукции, полиномы $G_{(\nu)}(x)$ и $G_{(\mu)}(x)$ ортогональны в $\mathcal{P}$. Теорема доказана.

Известно [5], что максимальное число линейно независимых однородных степени k гармонических полиномов равно $h_k = \frac{2k+n-2}{n-2} \binom{k+n-3}{n-3}$. Перенумеруем полиномы $G_{(\nu)}(x)$ с $\nu_1 = k$ так, что получится полная система ортогональных сферических гармоник степени k . Обозначим эту систему $\{H_k^{(i)}(x) : i=1, \dots, h_k\}$ и нормируем так, что $\int_{\partial S} (H_k^{(i)}(x))^2 ds_x = \omega_n$.

Теорема 4. Если $u(x)$ – гармоническая в S и непрерывная в $\bar{S}$ функция тогда справедливо представление

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} h_k^{(i)} H_k^{(i)}(x), \quad (3)$$

где $h_k^{(i)} = 1/\omega_n \int_{\partial S} H_k^{(i)}(\xi) u(\xi) d\xi$.

Доказательство. Пусть $E(x, \xi) = (n-2)^{-1} |\xi - x|^{2-n}$ ($n > 2$), $\Lambda = x_1 \partial / \partial x_1 + \dots + x_n \partial / \partial x_n$ и при $x \neq \xi \in \partial S$ верно равенство

$$\Lambda_x E(x, \xi) - \Lambda_\xi E(x, \xi) = - \sum_{i=1}^n \frac{x_i (x_i - \xi_i) - \xi_i (\xi_i - x_i)}{|x - \xi|^n} = \frac{1 - |x|^2}{|x - \xi|^n}.$$

Воспользуемся леммой 11 из [7]. При $|x| < |\xi|$ имеем

$$E(x, \xi) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|\xi|^{-(2k+n-2)}}{2k+n-2} \sum_{i=1}^{h_k} H_k^{(i)}(x) H_k^{(i)}(\xi).$$

Поэтому при $|x| < |\xi| = 1$ ядро Пуассона имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1 - |x|^2}{|x - \xi|^n} &= \Lambda_x E(x, \xi) - \Lambda_\xi E(x, \xi) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k - k + (2k + n - 2)}{2k + n - 2} \sum_{i=1}^{h_k} H_k^{(i)}(x) H_k^{(i)}(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} H_k^{(i)}(x) H_k^{(i)}(\xi). \end{aligned} \quad (4)$$

Дифференцирование и предельный переход под знаком суммирования законны, поскольку ряд в (4) сходится равномерно по $\xi \in \partial S$ и по x при $|x| \leq \alpha < 1$. Подставляя полученное значение ядра Пуассона в известную формулу решения задачи Дирихле в единичном шаре и используя равномерную сходимость ряда по $\xi \in \partial S$ приходим к (3)

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial S} \frac{1 - |x|^2}{|x - \xi|^n} u(\xi) ds_\xi = \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial S} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} H_k^{(i)}(\xi) u(\xi) ds_\xi H_k^{(i)}(x) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial S} H_k^{(i)}(\xi) u(\xi) ds_\xi H_k^{(i)}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} h_k^{(i)} H_k^{(i)}(x). \end{aligned}$$

Теорема 5. Если $u(x)$ – гармоническая в S и непрерывная в $\bar{S}$ функция, тогда имеет место равенство

$$\int_{|\xi|=1} G_{(\nu)}(\xi) u(\xi) ds_\xi = g_\nu G_{(\nu)}(D) u(x)|_{x=0}, \quad (5)$$

где $g_\nu = |G_{(\nu)}|_{L_2}^2 / |G_{(\nu)}|_D^2$.

Доказательство. Воспользуемся формулой (3) из теоремы 4. Так как для каждого i и k найдется вектор ν такой, что $\nu_1 = k \geq \dots \geq \nu_n$ ($\nu_n = 0, 1$) и

$$H_k^{(i)}(x) = \sqrt{\omega_n} \frac{G_{(\nu)}(x)}{|G_{(\nu)}|_{L_2(\partial S)}},$$

то имеем

$$u(x) = \sum_{\nu_1=0}^{\infty} \frac{G_{(\nu)}(x)}{|G_{(\nu)}|_{L_2(\partial S)}^2} \int_{|\xi|=1} G_{(\nu)}(\xi) u(\xi) ds_\xi.$$

Применяя к этому равенству оператор $G_{(\mu)}(D)$ (дифференцирование можно внести под интеграл так как ряд сходится равномерно по $|x| \leq \alpha < 1$) и полагая затем $x = 0$ получим

$$G_{(\mu)}(D) u(x)|_{x=0} = \sum_{\nu_1=\mu_1} \frac{\langle G_{(\mu)}, G_{(\nu)} \rangle}{|G_{(\nu)}|_{L_2(\partial S)}^2} \int_{|\xi|=1} G_{(\nu)}(\xi) u(\xi) ds_\xi = \frac{1}{g_\nu} \int_{|\xi|=1} G_{(\nu)}(\xi) u(\xi) ds_\xi.$$

Здесь мы воспользовались ортогональностью полиномов $G_{(\mu)}(x)$ в $\mathcal{P}$ (теорема 3). Отсюда сразу получаем равенство (5). Теорема доказана.

Для использования теоремы 5 необходима формула для вычисления интегралов вида $\int_{|x|=1} Q_m(x) ds_x$, где $Q_m(x)$ – однородный полином степени m .

Теорема 6. Справедлива формула

$$\int_{|x|=1} Q_m(x) ds_x = \begin{cases} 0, & m \in 2\mathbb{N} - 1 \\ \frac{\Delta^{m/2} Q_m(x)}{m!! n \cdots (n+m-2)} \omega_n, & m \in 2\mathbb{N} \end{cases}. \quad (6)$$

Доказательство. Воспользуемся леммой 4 из [7].

Лемма 1. Гармонические полиномы $R_{m-2k}(x)$ в разложении однородного полинома $Q_m(x)$ по формуле Альманси

$$Q_m(x) = R_m(x) + |x|^2 R_{m-2}(x) + \cdots + |x|^{2l} R_{m-2l}(x)$$

имеют вид

$$R_{m-2k}(x) = \frac{2m-4k+n-2}{(2,2)_k} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s |x|^{2s} \Delta^{s+k} Q_m(x)}{(2,2)_s (2m-4k-2s+n-2,2)_{s+k+1}}.$$

Из теоремы о среднем для гармонических функций и формулы Альманси следует, что

$$\int_{|x|=1} Q_m(x) ds_x = \int_{|x|=1} (R_m(x) + R_{m-2}(x) + \cdots + R_{m-2l}(x)) ds_x = \begin{cases} 0, & 2l < m \\ \omega_n R_0, & 2l = m \end{cases}.$$

При нечетном m интеграл равен нулю так как $m-2l > 0$ и значит $R_{m-2l}(0) = 0$. При четном m , используя лемму 1 запишем ($s = 0$, $k = m/2$)

$$\int_{|x|=1} Q_m(x) ds_x = \frac{n-2}{(2,2)_{m/2} (n-2,2)_{m/2+1}} \Delta^{m/2} Q_m(x) \omega_n = \frac{\Delta^{m/2} Q_m(x)}{m!! n \cdots (n+m-2)} \omega_n.$$

Теорема доказана.

В [6] формула Альманси обобщена на аналитические функции.

Следствие. Если $u(x)$ гармоническая в S и непрерывная в $\bar{S}$ функция, то имеет место равенство

$$\frac{1}{\omega_n} \int_{|\xi|=1} \bar{G}_{(\nu)}(\xi) u(\xi) ds_\xi = \frac{\Delta^{\nu_1} \bar{G}_{(\nu)}^2(x)}{(2\nu_1)!! (n,2)_{\nu_1}} \bar{G}_{(\nu)}(D) u(x)|_{x=0}, \quad (7)$$

где $\bar{G}_{(\nu)}(x) = G_{(\nu)}(x) / |G_{(\nu)}|_D$.

Доказательство. Нетрудно заметить, что в обозначениях теоремы 5 и с помощью теоремы 6 ($m = 2\nu_1$) можно записать

$$g_\nu = |G_{(\nu)}|_{L_2}^2 / |G_{(\nu)}|_D^2 = |\bar{G}_{(\nu)}|_{L_2}^2 = \frac{\Delta^{\nu_1} \bar{G}_{(\nu)}^2(x)}{(2\nu_1)!! (n,2)_{\nu_1}} \omega_n. \quad (8)$$

Подставляя найденное значение константы g_ν в (5) и деля обе части полученного равенства на $|G_{(\nu)}|_D$ и ω_n получим (7). Следствие доказано.

Пример. Пусть $u(x)$ – гармоническая в S и непрерывная в $\bar{S}$ функция, тогда имеют место равенства

$$\begin{aligned} \frac{1}{\omega_n} \int_{|\xi|=1} \xi_i u(\xi) ds_\xi &= \frac{1}{n} u_{x_i}(0), & \frac{1}{\omega_n} \int_{|\xi|=1} \xi_i \xi_j u(\xi) ds_\xi &= \frac{1}{n(n+2)} u_{x_i x_j}(0), \\ \frac{1}{\omega_n} \int_{|\xi|=1} \xi_i^2 u(\xi) ds_\xi &= \frac{1}{n(n+2)} u_{x_i x_i}(0) + \frac{1}{n} u(0). \end{aligned}$$

I. Первую формулу нетрудно получить из (5). Если взять $\nu = e_1 + \cdots + e_{n-1+1}$, где $e_i = (\delta_{1,i}, \dots, \delta_{n,i})$, то получим

$$G_{(\nu)}(x) = G_{\nu_1-\nu_2}^{\nu_2}(x_{(n)})G_{\nu_2-\nu_3}^{\nu_3}(x_{(n-1)})\cdots G_{\nu_{n-2}-\nu_{n-1}}^{\nu_{n-1}}(x_{(3)})H_{\nu_{n-1}}^{\nu_n}(x_{(2)}) = \\ = G_0^1(x_{(n)})G_0^1(x_{(n-1)})\cdots G_1^0(x_{(i)})\cdots G_0^0(x_{(3)})H_0^0(x_{(2)}) = x_i.$$

Так как

$$|x_i|_{L_2}^2 = \int_{|x|=1} x_i^2 ds_x = \frac{1}{n} \int_{|x|=1} (x_1^2 + \cdots + x_n^2) ds_x = \frac{\omega_n}{n},$$

и $|x_i|_D^2 = D_{x_i} x_i = 1$, то $g_\nu = |x_i|_{L_2}^2 / |x_i|_D^2 = \omega_n / n$ и значит первая формула верна

$$\int_{|\xi|=1} \xi_i u(\xi) ds_\xi = \frac{\omega_n}{n} D_{x_i} u(x)|_{x=0}.$$

II. Далее положим $\nu = 2e_1 + \cdots + 2e_{n-j+1} + e_{n-j+2} + \cdots + e_{n-i+1}$ если $i > j$. Тогда

$$G_{(\nu)}(x) = G_{\nu_1-\nu_2}^{\nu_2}(x_{(n)})G_{\nu_2-\nu_3}^{\nu_3}(x_{(n-1)})\cdots G_{\nu_{n-2}-\nu_{n-1}}^{\nu_{n-1}}(x_{(3)})H_{\nu_{n-1}}^{\nu_n}(x_{(2)}) = \\ = G_0^2(x_{(n)})G_0^2(x_{(n-1)})\cdots G_1^1(x_{(i)})G_0^1(x_{(i-1)})\cdots G_0^1(x_{(j+1)})G_1^0(x_{(j)})\cdots G_0^0(x_{(3)})H_0^0(x_{(2)}) = x_i x_j.$$

Для вычисления интеграла $|x_i x_j|_{L_2}^2 = \int_{|x|=1} x_i^2 x_j^2 ds_x$ воспользуемся формулой (6). Имеем

$Q_m(x) = x_i^2 x_j^2$, $m = 4$ и значит

$$\frac{\Delta^{m/2} Q_m(x)}{m!! n \cdots (n+m-2)} = \frac{1}{4!!(n, 2)_2} \Delta^2(x_i^2 x_j^2) = \frac{1}{8n(n+2)} \Delta(2x_i^2 + 2x_j^2) = \frac{1}{n(n+2)}.$$

Поэтому $\int_{|x|=1} x_i^2 x_j^2 ds_x = \frac{\omega_n}{n(n+2)}$. Так как $|x_i x_j|_D^2 = D_{x_i} D_{x_j} x_i x_j = 1$, то

$g_\nu = |x_i|_{L_2}^2 / |x_i|_D^2 = \omega_n / n(n+2)$ и значит вторая формула тоже верна

$$\int_{|\xi|=1} \xi_i \xi_j u(\xi) ds_\xi = \frac{\omega_n}{n(n+2)} D_{x_i} D_{x_j} u(x)|_{x=0}.$$

III. Для доказательства третьей формулы выберем $\nu = 2e_1$ и значит

$$G_{(\nu)}(x) = G_2^0(x_{(n)})G_0^0(x_{(n-1)})\cdots H_0^0(x_{(2)}) = \frac{x_n^2}{2} - \frac{x_1^2 + \cdots + x_{n-1}^2}{2(n-1)}.$$

Отсюда следует, что

$$G_{(\nu)}(x) = \frac{x_n^2}{2} - \frac{x_1^2 + \cdots + x_{n-1}^2}{2(n-1)} = \frac{nx_n^2}{2(n-1)} - \frac{|x|^2}{2(n-1)},$$

или $x_n^2 = 2 \frac{n-1}{n} G_{(\nu)}(x) + \frac{1}{n} |x|^2$, а значит, используя формулу (5) и теорему о среднем запишем

$$\int_{|\xi|=1} \xi_n^2 u(\xi) ds_\xi = 2 \frac{n-1}{n} \int_{|\xi|=1} G_{(\nu)}(\xi) u(\xi) ds_\xi + \frac{1}{n} \int_{|\xi|=1} u(\xi) ds_\xi = \\ = 2 \frac{n-1}{n} g_\nu G_{(\nu)}(D) u(x)|_{x=0} + \frac{\omega_n}{n} u(0) = g_\nu \left(2 \frac{n-1}{n} G_{(\nu)}(D) + \frac{1}{n} \Delta \right) u(x)|_{x=0} + \frac{\omega_n}{n} u(0) = \\ = g_\nu D_{x_n}^2 u(x)|_{x=0} + \frac{\omega_n}{n} u(0).$$

Вычислим g_ν . Нетрудно подсчитать, что $|G_{(\nu)}|_D^2 = G_{(\nu)}(D)G_{(\nu)}(x) = \frac{n}{2n-2}$, а значит по формуле (8) ($\nu_1 = 2$) запишем

$$\frac{g_\nu}{\omega_n} = \frac{2n-2}{8n(n, 2)_2} \Delta^2 G_{(\nu)}^2(x) = \frac{\Delta^2 (nx_n^2 - |x|^2)^2}{16n^2(n-1)(n+2)} = \frac{\Delta^2 (n^2 x_n^4 - 2nx_n^2 |x|^2 + |x|^4)}{16n^2(n-1)(n+2)} = \\ = \frac{24n^2 - 16n(n+2) + 8n(n+2)}{16n^2(n-1)(n+2)} = \frac{16n(n-1)}{16n^2(n-1)(n+2)} = \frac{1}{n(n+2)}.$$

Подставляя вычисленное значение g_i в предыдущую формулу и деля на ω_i получим третью формулу при $i = n$. В силу симметрии эта формула будет верна и для любого $i = 1, \dots, n$.

Литература

1. Карачик, В.В. Полиномиальные решения дифференциальных уравнений в частных производных с постоянными коэффициентами I / В.В. Карачик // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – Вып. 4. – № 10(227). – С. 27–38.
2. Karachik, V.V. On one set of orthogonal harmonic polynomials / V.V. Karachik // Proceedings of American Mathematical Society. – 1998. – V. 126, № 12. – P. 3513–3519.
3. Karachik, V.V. On some special polynomials / V.V. Karachik // Proceedings of American Mathematical Society. – 2004. – V. 132, № 4. – P. 1049–1058.
4. Бицадзе, А.В. Уравнения математической физики / А.В. Бицадзе. – М.: Наука, 1976. – 296 с.
5. Стейн, И. Введение в гармонический анализ на евклидовых пространствах / И. Стейн, Г. Вейс. – М.: Мир, 1974. – 332 с.
6. Карачик, В.В. Об одном представлении аналитических функций гармоническими / В.В. Карачик // Математические труды. – 2007. – Т. 10, № 2. – С. 142–162.
7. Карачик, В.В. Построение полиномиальных решений некоторых задач для уравнения Пуассона / В.В. Карачик // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2011. – Т. 51, № 9. – С. 1674–1694.

ON ONE GENERALIZED MEAN THEOREM FOR HARMONIC FUNCTIONS

V.V. Karachik¹

Mean value on the unit sphere of a product of a harmonic function in the unit ball and a homogeneous polynomial is investigated.

Keywords: harmonic functions, mean theorem, harmonic polynomials.

References

1. Karachik V.V. Polinomial'nye resheniya differentsialnykh uravnenij v chastnykh proizvodnykh s postoyannymi koeffitsientami I [Polynomial solutions to partial differential equations with constant coefficients I]. *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2011. Issue 4. no. 10(227). pp. 27–38. (in Russ.).
2. Karachik V.V. On one set of orthogonal harmonic polynomials. *Proceedings of American Mathematical Society*. 1998. Vol. 126, no. 12. pp. 3513–3519.
3. Karachik V.V. On some special polynomials. *Proceedings of American Mathematical Society*, 2004. Vol. 132, no. 4. pp. 1049–1058.
4. Bicaдзе A.V. *Uravneniya matematicheskoy fiziki* [Equations of mathematical physics]. Moscow: Nauka, 1976. 296 p.
5. Stejn I., Vejs G. *Vvedenie v garmonicheskij analiz na evklidovykh prostranstvakh* [Introduction to Fourier Analysis on Euclidean Spaces]. Moscow: Mir, 1974. 332 p. (in Russ.). [Stein E.M., Weiss G.L. *Introduction to Fourier Analysis on Euclidean Spaces*. Princeton University Press, 1971. 297 p.]
6. Karachik V.V. *Matematicheskie trudy*. 2007. Vol. 10, no. 2. pp. 142–162.
7. Karachik V.V. *Zhurnal vychislitel'noj matematiki i matematicheskoy fiziki*. 2011. Vol. 51, no. 9. pp. 1674–1694. (in Russ.).

Поступила в редакцию 30 января 2013 г.

¹ Karachik Valeriy Valentinovich is Dr Sc (Physics and Mathematics), Professor, Mathematical Analysis Department, South Ural State University

E-mail karachik@susu.ru

ОБ ОДНОМ ВАРИАНТЕ МЕТРИКИ ДЛЯ НЕОГРАНИЧЕННЫХ ВЫПУКЛЫХ МНОЖЕСТВ¹

П.Д. Лебедев², В.Н. Ушаков³

Методы выпуклого анализа привлечены для построения функции расстояния между замкнутыми, в общем случае не ограниченными, множествами в евклидовом пространстве. Показано, что данное расстояние удовлетворяет всем свойствам метрики. Доказана инвариантность расстояний относительно движений пары множеств в пространстве. Показано, что данное метрическое пространство является полным.

Ключевые слова: хаусдорфово расстояние, метрика, выпуклое множество, рецессивный конус.

Введение

При решении различных задач теории распознавания образов [1], математической теории управления и теории управления и дифференциальных игр [2] требуется оценивать степень рассогласования между множествами в евклидовом пространстве $\mathbf{R}^n$ [3]. Один из самых широко распространенных методов, позволяющих ответить на эти вопросы, основан на использовании метрики Хаусдорфа [4].

Обозначим через $\text{comp}(\mathbf{R}^n)$ совокупность всех ограниченных замкнутых множеств в $\mathbf{R}^n$.

Определение 1. Расстоянием от точки $x \in \mathbf{R}^n$ до замкнутого множества A называется величина

$$\rho(x, A) = \min\{\|x - y\|: y \in A\}.$$

Определение 2. [5, 6] Хаусдорфовым отклонением множества $A \in \text{comp}(\mathbf{R}^n)$ от $B \in \text{comp}(\mathbf{R}^n)$ называется величина

$$h(A, B) = \max\{\rho(x, B): x \in A\}. \quad (1)$$

Определение 3. [5, 6] Хаусдорфовым расстоянием между множествами $A \in \text{comp}(\mathbf{R}^n)$ и $B \in \text{comp}(\mathbf{R}^n)$ называется максимум из хаусдорфовых отклонений

$$d(A, B) = \max\{h(A, B), h(B, A)\}. \quad (2)$$

Хаусдорфово расстояние обладает всеми свойствами метрики [5] и любой паре компактных множеств ставит в соответствие неотрицательное число, характеризующее степень их рассогласования.

Метрику Хаусдорфа можно распространить на произвольные замкнутые множества (обозначим их совокупность $\text{clos}(\mathbf{R}^n)$). Однако если хотя бы одно из множеств A, B не ограничено, то в общем случае значение максимум в выражении (1) не достигается. Поэтому для них можно определить обобщение понятия хаусдорфова отклонения как

$$h^*(A, B) = \sup\{\rho(x, B): x \in A\}. \quad (3)$$

Соответственно обобщение понятия хаусдорфова расстояния между неограниченными множествами может быть записано как

$$d^*(A, B) = \max\{h^*(A, B), h^*(B, A)\}. \quad (4)$$

Значение выражений (3) и (4) при некоторых A и B равно $+\infty$. При оценке конструкций теории распознавания образов и теории управления наиболее часто требуется оценивать рассогласо-

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 11-01-00427-а «Алгоритмы и динамические процедуры решения в дифференциальных играх и задачах управления», 11-01-12088-офи-м-2011 «Методы позиционных дифференциальных игр в задачах техники, экономики и экологии» и проекта 12-01-31247 мол а «Управление и сингулярности в дифференциальных играх»), и при поддержке программ фундаментальных исследований Президиума РАН 12-П-1-1002 «Управление в условиях конфликта и неопределенности. Позиционные стратегии и тамплетоновы конструкции в задачах управления» и 12-С-1-1017/3 «Качественная теория и численные методы для задач динамики, управления и оптимизации» при финансовой поддержке УрО РАН

² Лебедев Павел Дмитриевич – кандидат физико-математических наук, отдел динамических систем Институт математики и механики УрО РАН

E-mail: pleb@yandex.ru

³ Ушаков Владимир Николаевич – доктор физико-математических наук, отдел динамических систем Институт математики и механики УрО РАН

E-mail: ushak@imm.uran.ru

вания между выпуклыми множествами. При этом естественно попытаться ввести такую метрику, которая бы определяла расстояния между произвольными выпуклыми [7] замкнутыми множествами в виде конечных чисел и отражала бы при этом особенности их геометрии. Одним из ее вариантов является так называемая метрика Хаусдорфа–Бебутова [8–10]. Она обладает рядом важных достоинств. В частности, ее значения лежат на отрезке

$$\left[0, \frac{\|a_0\| + \|b_0\| + \sqrt{\|a_0\|^2 + 4} + \sqrt{\|b_0\|^2 + 4}}{2}\right],$$

где a_0 и b_0 – ближайшие к началу координат точки во множествах A и B соответственно, $\|a\|$ – норма вектора a . В метрике Хаусдорфа–Бебутова пространство $\text{clos}(\mathbf{R}^n)$ является полным [9, с. 187]. Однако она имеет и некоторые недостатки. Сходимость в ней не совпадает со сходимостью в метрике Хаусдорфа. Кроме того, значения расстояния между множествами не сохраняются при параллельном переносе и при их вращении. В настоящей работе предлагается еще один вариант определения расстояния между произвольными выпуклыми множествами, который лишен указанных недостатков метрики Хаусдорфа–Бебутова. Он базируется на конструкциях выпуклого анализа и преобразовании метрики Хаусдорфа.

Преобразование метрики

При решении различных задач теории распознавания образов, теории управления и дифференциальных уравнений для устранения проблем, связанных с неограниченным возрастанием функции неотрицательного аргумента, применяется так называемое преобразование Кржкова [12]

$$\tilde{x} = 1 - \exp(-x). \quad (5)$$

Оно осуществляет непрерывное взаимно однозначное отображение бесконечного полуинтервала $[0, +\infty)$ на полуинтервал $[0, 1)$. Причем при стремлении $x \rightarrow +\infty$ для $\tilde{x}$ в (5) имеет место $\tilde{x} \rightarrow 1$.

Определение 4. *К-хаусдорфовым отклонением замкнутого множества A от B назовем число*

$$\tilde{h}(A, B) = \begin{cases} 1 - \exp(-h^*(A, B)), & \text{если } h^*(A, B) \in (0, +\infty) \\ 1, & \text{если } h^*(A, B) = +\infty. \end{cases} \quad (6)$$

Определение 5. *К-хаусдорфовым расстоянием между множествами A и B назовем число*

$$\tilde{d}(A, B) = \max\{\tilde{h}(A, B), \tilde{h}(B, A)\}. \quad (7)$$

Из определения 3 видно, что выражение (7) можно записать в виде

$$\tilde{d}(A, B) = \begin{cases} 1 - \exp(-d^*(A, B)), & \text{если } h^*(A, B) \in (0, +\infty) \\ 1, & \text{если } d^*(A, B) = +\infty. \end{cases} \quad (8)$$

Лемма 1. Выражение (8) задает метрику на множестве $\text{clos}(\mathbf{R}^n)$.

Доказательство. Покажем, что для функции, заданной в (8), выполняются все три аксиомы метрики [13]. Из свойств хаусдорфова расстояния и преобразования Кржкова вытекает выполнение аксиомы тождества и аксиомы симметрии. Покажем, что выполняется неравенство треугольника. Покажем, что для произвольных $A, B, C \in \text{clos}(\mathbf{R}^n)$

$$\tilde{d}(A, B) \leq \tilde{d}(A, C) + \tilde{d}(B, C). \quad (9)$$

Действительно, обозначим

$$\alpha = d^*(A, B), \beta = d^*(A, C), \gamma = d^*(B, C).$$

Неравенство (9) принимает вид

$$1 - \exp(-\alpha) \leq 1 - \exp(-\beta) + 1 - \exp(-\gamma). \quad (10)$$

Покажем, что (10) выполняется при $\alpha = \beta + \gamma$. Для хаусдорфовой метрики выполняется неравенство треугольника

$$\alpha \leq \beta + \gamma.$$

Из свойств экспоненциальной функции вытекает

$$\begin{aligned} 1 - \exp(-\beta - \gamma) - 1 + \exp(-\beta) - 1 + \exp(-\gamma) &= \\ &= \exp(-\beta)(1 - \exp(-\gamma)) + (\exp(-\gamma) - 1) = \\ &= -(1 - \exp(-\gamma))(1 - \exp(-\beta)) \leq 0. \end{aligned}$$

Заметим, что в левой части (10) стоит монотонно возрастающая функция. Поэтому если неравенство выполняется в случае $\alpha = \beta + \gamma$, то оно верно и при всех $\alpha \in [0, \beta + \gamma]$. Значит, неравенство (10) верно. Третья аксиома метрики выполняется для метрики $\tilde{d}$.

Значения функции (8) лежат на отрезке $[0, 1]$. При чем $\tilde{d}(A, B) = 1$ тогда и только тогда, когда $d^*(A, B) = +\infty$. Однако на практике вычислять хаусдорфово расстояние для неограниченных множеств очень затруднительно. Покажем, что расстояние между множествами в метрике $\tilde{d}$ можно найти, вычислив предел для некоторой последовательности конечных чисел. Обозначим через $\text{clcv}(\mathbf{R}^n)$ множество выпуклых замкнутых множеств в $\mathbf{R}^n$.

Лемма 2. Пусть $A, B \in \text{clcv}(\mathbf{R}^n)$. Тогда

$$\tilde{d}(A, B) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \left(1 - \exp(-d^*(A(\varepsilon), B(\varepsilon))) \right), \quad (11)$$

где $M(\varepsilon) = M \cap U(\mathbf{0}, \varepsilon)$, $U(\mathbf{x}, \varepsilon)$ – шар в пространстве $\mathbf{R}^n$ с центром в точке $\mathbf{x}$ радиуса ε , $\mathbf{0}$ – нулевой вектор в $\mathbf{R}^n$.

В (11) подразумевается, что значения ε настолько большие, чтобы множества $A(\varepsilon)$ и $B(\varepsilon)$ были непусты.

Доказательство. Без ограничения общности полагаем, что $h^*(A, B) \geq h^*(B, A)$ и, следовательно, $d^*(A, B) = h^*(A, B)$. Покажем, что выполняется предельное соотношение

$$h^*(A, B) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} h(A(\varepsilon), B(\varepsilon)), \quad (12)$$

из которого и следует равенство в (11).

Предположим, что равенство (12) не выполняется. То есть предел в данном выражении не существует или отличен от $h^*(A, B)$.

Если B – ограниченное множества, то равенство (12) выполняется, поскольку найдется такое ε_0 , что при $\varepsilon > \varepsilon_0$ выполняется $B(\varepsilon) = B$. Соответственно, если $h^*(A, B)$ – конечное число, то найдется и такое ε_1 , что при $\varepsilon > \varepsilon_1$ выполняется равенство $h(A(\varepsilon), B(\varepsilon)) = h^*(A, B)$. Если же $h^*(A, B) = +\infty$, то справедлива оценка для хаусдорфовых отклонений $h(A(\varepsilon), B(\varepsilon)) \geq \varepsilon - \varepsilon_0$ при $\varepsilon > \varepsilon_0$.

Случай, когда A компактно, а B не компактно, невозможен, поскольку мы изначально предполагаем, что $h^*(A, B) \geq h^*(B, A)$.

Следовательно, при сделанном предположении о невыполнении равенства (12) множества A и B должны быть неограниченными.

При этом найдется такая последовательность $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^{\infty}, \varepsilon_i \rightarrow +\infty$ и такое число $\gamma > 0$, что либо

$$1) \forall i \in \mathbf{N}: h(A(\varepsilon_i), B(\varepsilon_i)) < h^*(A, B) - \gamma,$$

либо

$$2) \forall i \in \mathbf{N}: h(A(\varepsilon_i), B(\varepsilon_i)) > h^*(A, B) + \gamma.$$

Допустим, реализовалась возможность 1). По определению хаусдорфова отклонения найдется такая последовательность $\{a_i\}_{i=1}^{\infty} \subset A$, что

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \rho(a_i, B) = h^*(A, B). \quad (13)$$

Поскольку по условию B – замкнутое выпуклое множество, то для каждой a_i найдется такая точка $b_i \in B$, что $\|a_i - b_i\| = \rho(a_i, B)$. А поскольку все шары достаточно большого радиуса содержат и a_i , и b_i , то имеет место

$$\forall \varepsilon > \max\{\|a_i\|, \|b_i\|\} \quad h(A \cap U(\mathbf{0}, \varepsilon), B \cap U(\mathbf{0}, \varepsilon)) \geq \|a_i - b_i\| \geq \rho(a_i, B).$$

Из данной оценки и (13) следует, что случай 1) невозможен.

Допустим, реализовалась возможность 2). В этом случае $h^*(A, B) = r^*$ может быть только конечным числом, поскольку предел последовательности не может быть больше, чем $+\infty$.

Рассмотрим последовательности $\{A_i\}_{i=1}^{\infty} = \{A(\varepsilon_i)\}_{i=1}^{\infty}$ и $\{B_i\}_{i=1}^{\infty} = \{B(\varepsilon_i)\}_{i=1}^{\infty}$. При этом для $\forall i \in \mathbf{N}$

$$h(A_i, B_i) > r^* + \gamma.$$

Поскольку A_i – компакт, то в нем найдется точка a_i , такая что

$$\rho(\mathbf{a}_i, B_i) > r^* + \gamma. \quad (14)$$

При этом найдется точка $\mathbf{b}_i \in B \setminus B_i$, для которой

$$\|\mathbf{a}_i - \mathbf{b}_i\| \leq r^*.$$

Точки $\mathbf{a}_i$ находятся на расстоянии не большем чем r^* от границы $\partial U(\mathbf{0}, \varepsilon_i)$ шара $U(\mathbf{0}, \varepsilon_i)$ поскольку $\mathbf{a}_i \in U(\mathbf{0}, \varepsilon_i)$, $\mathbf{b}_i \notin U(\mathbf{0}, \varepsilon_i)$ (рис. 1), то есть

$$\|\mathbf{a}_i\| \in [\varepsilon_i - r^*, \varepsilon_i].$$

Следовательно, при стремлении $\varepsilon_i \rightarrow +\infty$ имеет место $\|\mathbf{a}_i\| \rightarrow +\infty$.

Рассмотрим точку $\mathbf{b}_0$, ближайшую в евклидовой метрике на множестве B к началу координат. Точка $\mathbf{b}_i$ зафиксирована, а точки $\mathbf{a}_i$ и $\mathbf{b}_i$ находятся на расстоянии, не превышающем r^* друг от друга, и бесконечно удаляются от начала координат. Следовательно, угол $\angle(\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_i - \mathbf{b}_0)$ между векторами $\mathbf{a}_i$ и $\mathbf{b}_i - \mathbf{b}_0$ стремится к нулю:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \angle(\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_i - \mathbf{b}_0) = 0. \quad (15)$$

При достаточно ε_i больших отрезок $[\mathbf{b}_i, \mathbf{b}_0]$ будет пересекаться с границей $\partial U(\mathbf{0}, \|\mathbf{a}_i\|)$ шара $U(\mathbf{0}, \|\mathbf{a}_i\|)$ в некоторой точке $\mathbf{b}_i^*$ (поскольку $\mathbf{b}_0 \in U(\mathbf{0}, \varepsilon_i)$, $\mathbf{b}_i \notin U(\mathbf{0}, \varepsilon_i)$). Рассмотрим пересечение сферы $\partial U(\mathbf{0}, \|\mathbf{a}_i\|)$ и гиперплоскости

$$\Gamma_i = \{\mathbf{g} \in \mathbf{R}^n : \langle \mathbf{g} - \mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i \rangle = 0\},$$

проходящей через точку $\mathbf{a}_i$ ортогонально ее радиус-вектору (рис. 2), с шарами $U(\mathbf{a}_i, r^* + \gamma)$ фиксированного радиуса r^* . Здесь $\langle \cdot, \cdot \rangle$ означает скалярное произведение векторов. У $\partial U(\mathbf{0}, \|\mathbf{a}_i\|)$ и Γ_i общая нормаль в точке $\mathbf{a}_i$ и радиус сферы $\partial U(\mathbf{0}, \|\mathbf{a}_i\|)$ стремится к $+\infty$. Поэтому выполняется предельное соотношение

$$\lim_{i \rightarrow \infty} d(\Gamma_i \cap U(\mathbf{a}_i, r^* + \gamma), \partial U(\mathbf{0}, \|\mathbf{a}_i\|) \cap U(\mathbf{a}_i, r^* + \gamma)) = 0. \quad (16)$$

Из предельных соотношений (15) и (16) следует, что точка $\mathbf{b}_i^*$ при $i \rightarrow \infty$ приближается к $\mathbf{b}_i$. Рассмотрим проекцию

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{b}_i - \frac{\langle \mathbf{b}_i - \mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i \rangle}{\|\mathbf{a}_i\|^2} \mathbf{a}_i$$

точки $\mathbf{b}_i$ на гиперплоскость Γ_i . Действительно, она лежит на отрезке $[\mathbf{b}_i, \mathbf{b}_0]$, а угол между векторами $\mathbf{a}_i$ и $\mathbf{b}_i - \mathbf{b}_0$ стремится к нулю. Соответственно точка $\mathbf{b}_i^*$ становится все ближе к точке $\mathbf{s}_i$ пересечения сферы $\partial U(\mathbf{0}, \|\mathbf{a}_i\|)$ с прямой, проходящей через $\mathbf{b}_i$ параллельно вектору $\mathbf{a}_i$.

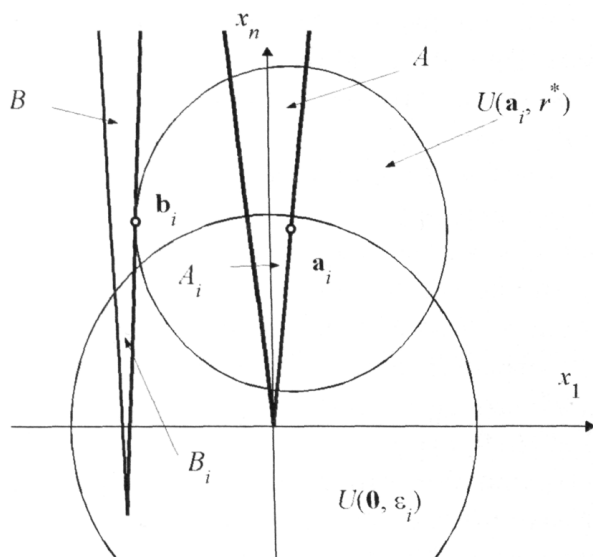


Рис. 1. Выпуклые неограниченные множества A и B

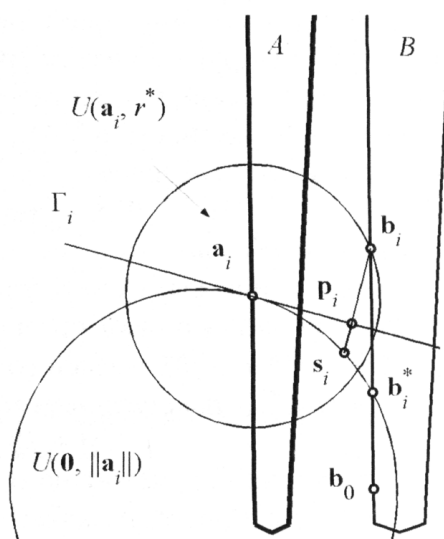


Рис. 2. Расположение точек $\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_i, \mathbf{b}_i^*$ и $\mathbf{p}_i$

С другой стороны, поскольку сфера $\partial U(\mathbf{0}, \|\mathbf{a}_i\|)$ с увеличением ее радиуса приближается в окрестности точки $\mathbf{a}_i$ к гиперплоскости Γ_i , то точки $\mathbf{s}_i$ и $\mathbf{p}_i$ становятся все ближе друг к другу. Соответственно имеет место предельное соотношение

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \|\mathbf{b}_i^* - \mathbf{p}_i\| = 0. \quad (17)$$

При этом поскольку p_i есть ортогональная проекция b_i на гиперплоскость, проходящую через точку a_i , то выполняется оценка

$$\|p_i - a_i\| \leq \|p_i - b_i\| \leq r^*.$$

Это означает, что для последовательностей точек $\{p_i\}_{i=1}^\infty$ и шаров $\{U(a_i, r^*)\}_{i=1}^\infty$ имеет место

$$p_i \in U(a_i, r^*). \quad (18)$$

Из выражений (17) и (18) вытекает, что предел отклонения точек b_i^* от шаров $U(a_i, r^*)$ равен нулю:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \rho(b_i^*, U(a_i, r^*)) = 0. \quad (19)$$

Точки b_i^* (по построению) принадлежат компактам B_i , поэтому верна оценка

$$\|b_i - a_i\| > r^* + \gamma.$$

Однако эта оценка противоречит соотношению (19). Получилось противоречие. Следовательно, формула (12) верна.

Невозможность существования последовательностей, для которых выполняются оценки 1) или 2) доказывает равенство (12).

Замечание 1. Условие выпуклости множеств A и B является существенным. В противном случае предел (11) может не существовать. Пусть, например, на плоскости заданы два неограниченных множества. Одно является лучом $A = \{(x, y): x \in [0, +\infty), y = 0\}$, а другое состоит из точек на этом луче с целыми координатами $A = \{(x, y): x \in \mathbb{N} \cup \{0\}, y = 0\}$. Для кругов радиусом $i, i \in \mathbb{N}$, выполняется равенство

$$d^*(A \cap U(0, i), B \cap U(0, i)) = 0,5.$$

В то же время для кругов радиуса $i + 0,9, i \in \mathbb{N}$, имеет место

$$d^*(A \cap U(0, i + 0,9), B \cap U(0, i + 0,9)) = 0,5.$$

Таким образом, значение выражения (11) не определено.

Оценка степени близости неограниченных множеств

Для неограниченных множеств A и B К-хаусдорфово расстояние является достаточно грубой оценкой. Если $h^*(A, B) = +\infty$ или $h^*(B, A) = +\infty$, то $\tilde{d}(A, B) = 1$. В частности, это имеет место для любых двух непараллельных гиперплоскостей. Но они при этом могут располагаться по-разному, что играет роль при их изучении в различных практических задачах. Возникает необходимость ввести еще одну функцию, характеризующую степень того, как выпуклые множества A и B отклоняются друг от друга с учетом их геометрии в целом. При этом мы будем использовать то, что выпуклые множества в окрестности бесконечности имеют достаточно специфическую структуру, описанную, в частности в [14].

Определение 6. Рецессивным конусом [14, с. 77] множества A называется конус

$$0^+A = \{x \in \mathbb{R}^n: \forall y \in A, \forall \lambda > 0 (y + \lambda x \in A)\},$$

содержащий лучи всех направлений x , которые начинаясь в любой точке A , лежат в A .

При рассмотрении выпуклого множества A вне достаточно большой окрестности начала координат оно становится в некотором смысле все более похожим на свой рецессивный конус. Если $A \in \text{clcv}(\mathbb{R}^n)$, то $0^+A = \{0\}$ тогда и только тогда, когда A – ограниченное множество [14, с. 81].

Определение 7. χ -расстоянием между A и B из $\text{clcv}(\mathbb{R}^n)$ назовем величину

$$\chi(A, B) = d(0^+A \cap U(0, 1), 0^+B \cap U(0, 1)). \quad (20)$$

Значения выражения (20) лежат на отрезке $[0, 1]$. Это вызвано тем, что в состав любого конуса входит начало координат 0 , и любая точка шара $U(0, 1)$ находится от нее на расстоянии, не превышающем 1. Функция χ определяет полуметрику на множестве $\text{clcv}(\mathbb{R}^n)$. То есть для нее выполняются все аксиомы метрики, за исключением того, что она может быть равной нулю для двух несовпадающих множеств. Действительно, ведь одинаковые рецессивные конуса могут быть у различных множеств. Например на плоскости надграфик $G = \text{epi } f$ любого многочлена второй степени

$$f(x) = ax^2 + bx + c, a \in (0, +\infty), b, c \in (-\infty, +\infty)$$

имеет рецессивный конус, состоящий из одного луча, совпадающего с положительной полуосью оси абсцисс.

Покажем, что в общем случае отклонением выпуклых множеств вне достаточно большой окрестности начала координат можно рассчитывать без нахождения их рецессивных конусов.

Лемма 3. Пусть $A, B \in \text{clcv}(\mathbf{R}^n)$. Тогда верно равенство

$$\chi(A, B) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \left(\frac{d(A(\varepsilon), B(\varepsilon))}{\varepsilon} \right). \quad (21)$$

Доказательство. Покажем сначала, что для произвольного выпуклого множества справедливо

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \left(\frac{d(A(\varepsilon), 0^+ A(\varepsilon))}{\varepsilon} \right) = 0. \quad (22)$$

Выведем оценку сверху для хаусдорфова отклонения конуса $0^+ A$ от множества A . Выберем произвольную точку $\mathbf{x} \in A$. Из определения 7 следует, что выполняется вложение

$$\{\mathbf{x}\} + 0^+ A \subseteq A.$$

То есть во множестве A содержится его рецессивный конус, параллельно перенесенный на вектор $\mathbf{x}$. Получаем

$$h^*(0^+ A, A) \leq h^*(0^+ A, 0^+ A + \{\mathbf{x}\}) \leq \|\mathbf{x}\|.$$

Следовательно, $h^*(0^+ A, A) = d_1 \in [0, \|\mathbf{x}\|]$ – конечное число. Из (12) вытекает

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \left(\frac{h(0^+ A(\varepsilon), A(\varepsilon))}{\varepsilon} \right) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \frac{d_1}{\varepsilon} = 0. \quad (23)$$

Покажем теперь, что верно соотношение

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \left(\frac{h(A(\varepsilon), 0^+ A(\varepsilon))}{\varepsilon} \right) = 0. \quad (24)$$

Допустим, предел в выражении (24) отличен от нуля или не существует. Тогда найдется такое положительное число d_2 и такая последовательность $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^\infty$, что

$$\forall i \in \mathbf{N}: h(A(\varepsilon_i), 0^+ A(\varepsilon_i)) > d_2 \varepsilon_i, \varepsilon_i \rightarrow +\infty.$$

Соответственно найдется последовательность точек $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^\infty$ для членов которой выполняются вложения

$$\forall i \in \mathbf{N}: \mathbf{a}_i \in A(\varepsilon_i) \quad (25)$$

и неравенство

$$\forall i \in \mathbf{N}: \rho(\mathbf{a}_i, 0^+ A(\varepsilon_i)) > d_2 \varepsilon_i. \quad (26)$$

Рассмотрим конус

$$K^* = \{\forall \mathbf{x}: (\exists \mathbf{y} \in 0^+ A : \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq \arctg d_2)\}.$$

Из (26) следуют соотношения

$$\forall i \in \mathbf{N}: \mathbf{a}_i \notin (A(\varepsilon_i) + U(\mathbf{0}, d_2)) \supseteq K^*(\varepsilon_i).$$

Отсюда и из (25) вытекает

$$\forall i \in \mathbf{N}: \mathbf{a}_i \notin K^*. \quad (27)$$

Рассмотрим теперь последовательность $\{\mathbf{a}_i / \|\mathbf{a}_i\|\}_{i=1}^\infty$. Она лежит в шаре единичного радиуса, а значит ограничена. Из нее можно выделить сходящуюся подпоследовательность. Без ограничения общности полагаем, что вся последовательность сходится и

$$\{\mathbf{a}_i / \|\mathbf{a}_i\|\}_{i=1}^\infty \rightarrow \mathbf{a}^*.$$

Оценка (27) означает, что все точки $\mathbf{a}_i / \|\mathbf{a}_i\|$ лежат вне конуса K^* . Предел их последовательности может лежать либо вне данного конуса, либо на его границе:

$$\mathbf{a}^* \in (\mathbf{R}^n \setminus K^*) \cup \partial K^*.$$

Конус $0^+ A$ полностью вложен во внутренность K^* (за исключением точки начала координат). Это означает, что предел $\mathbf{a}^* \in U(\mathbf{0}, 1)$ не принадлежит $0^+ A$. В то же время доказано [14, с. 79] утверждение, что предел любой последовательности $\{\lambda_i \mathbf{a}_i\}_{i=1}^\infty$ при $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^\infty \subset A$, $\lambda_i > 0$, $\lambda_i \rightarrow 0$ (если он существует) принадлежит $0^+ A$.

Последовательность $\{\mathbf{a}_i / \|\mathbf{a}_i\|\}_{i=1}^{\infty}$ подходит под данное описание, если положить $\lambda_i = \|\mathbf{a}_i\|^{-1}$.

Отсюда следует, что

$$\mathbf{a}^* \in 0^+A.$$

Получилось противоречие. Следовательно, выражения (23) и (24) верны, а значит выполняется и (22).

Теперь оценим поведение отклонения $d(A(\varepsilon), B(\varepsilon))$. В силу неравенства треугольника имеем

$$d(A(\varepsilon), B(\varepsilon)) \leq d(A(\varepsilon), 0^+A(\varepsilon)) + d(0^+A(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon)) + d(B(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon)). \quad (28)$$

С другой стороны в силу того же неравенства

$$d(0^+A(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon)) \leq d(A(\varepsilon), 0^+A(\varepsilon)) + d(A(\varepsilon), B(\varepsilon)) + d(B(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon)).$$

Переставив слагаемые получим

$$d(A(\varepsilon), B(\varepsilon)) \geq d(A(\varepsilon), 0^+A(\varepsilon)) - d(0^+A(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon)) - d(B(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon)). \quad (29)$$

В пределе оценка дает

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \frac{d(A(\varepsilon), B(\varepsilon))}{\varepsilon} &\leq \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \frac{d(0^+A(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon))}{\varepsilon} + \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \frac{d(A(\varepsilon), 0^+A(\varepsilon)) + d(B(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon))}{\varepsilon} \leq \\ &\leq \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \frac{d(0^+A(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon))}{\varepsilon} + 0 + 0 \end{aligned} \quad (30)$$

Аналогично оценка (29) дает

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \frac{d(A(\varepsilon), B(\varepsilon))}{\varepsilon} \geq \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \frac{d(0^+A(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon))}{\varepsilon}. \quad (31)$$

Из (30) и (31) следует равенство

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \frac{d(A(\varepsilon), B(\varepsilon))}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \frac{d(0^+A(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon))}{\varepsilon}. \quad (32)$$

Поскольку рецессивные конусы фигуры, инвариантны относительно гомотетии с центром в начале координат, то значение выражения

$$\frac{d(0^+A(\varepsilon), 0^+B(\varepsilon))}{\varepsilon}$$

одинаково при любом $\varepsilon > 0$. Подставив в частности значение $\varepsilon = 1$ (вместо предела $\varepsilon \rightarrow +\infty$) в (32), получаем равенство (21).

Комбинированная метрика

Метрика $\tilde{d}$ двум произвольным замкнутым множествам ставит в соответствие число из отрезка $[0, 1]$ на базе метрики Хаусдорфа. Полуметрика χ , введенная на классе выпуклых замкнутых множеств, определяет степень их рассогласования, опираясь на понятие рецессивного конуса. Естественно, ввести новую метрику, сложив $\tilde{d}(A, B)$ и $\chi(A, B)$.

Определение 8. Комбинированным расстоянием между множествами $A, B \in \text{clcv}(\mathbf{R}^n)$ назовем величину

$$D(A, B) = \tilde{d}(A, B) + \chi(A, B). \quad (33)$$

Теорема 1. Функция (33) задает на множестве $\text{clcv}(\mathbf{R}^n)$ метрику и вычисляется по формуле

$$D(A, B) = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \left(1 - \exp(-d(A(\varepsilon), B(\varepsilon))) + \frac{d(A(\varepsilon), B(\varepsilon))}{\varepsilon} \right).$$

Доказательство. Выражение (33) есть сумма метрики и полуметрики, следовательно оно тоже задает метрику [13]. Из лемм 2 и 3 следует, что для метрики $\tilde{d}(A, B)$ и полуметрики $\chi(A, B)$ в случае выпуклых множества A и B имеют место предельные выражения (11) и (21). Их сумма

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \left(1 - \exp(-d(A(\varepsilon), B(\varepsilon))) \right) + \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \left(\frac{d(A(\varepsilon), B(\varepsilon))}{\varepsilon} \right).$$

Метрика $D(A, B)$ обладает рядом достоинств. Прежде всего, она не зависит от параллельного переноса и поворота пары (A, B) , что отличает ее от метрики Хаусдорфа–Бебутова [8]. Для мно-

жеств, хаусдорфово расстояние между которыми является конечным числом, существует взаимно однозначное отображение между значением $D(A, B)$ и $\tilde{d}(A, B)$, определенное преобразование Кружкова, причем в этом случае $D(A, B) \in [0, 1]$. Если же $\tilde{d}(A, B) = +\infty$, то комбинированная метрика дает число $D(A, B) \in [1, 2]$, определяемое рассогласованием множеств в окрестности бесконечно удаленной точки. Это согласуется с принятой аппроксимацией неограниченных выпуклых множеств их рецессивными конусами. Метрика D является полной, поскольку сходимость в ней совпадает со сходимостью в метрике Хаусдорфа.

Заметим, что сходимость в метрике D в общем случае не совпадает со сходимостью в метрике Хаусдорфа–Бебутова. Рассмотрим, например, последовательность прямых $\{A_i\}_{i=1}^{\infty}$, заданных уравнениями:

$$A_i = \{(x, y) : y = x \operatorname{tg} \beta_i, \beta_i = 1/i, x \in (-\infty, \infty)\}.$$

В комбинированной метрике расстояние между любым двумя непараллельными прямыми, угол между которыми равен β , строго больше 1 и равно $1 + \sin \beta$. В метрике Хаусдорфа–Бебутова расстояние между прямыми, пересекающимися в начале координат, равно $\sin \beta$ (см. [9, с. 187]). Каждая из прямых A_i образует с осью абсцисс угол равный $\beta_i = 1/i$. Соответственно в метрике Хаусдорфа–Бебутова $\{A_i\}_{i=1}^{\infty}$ есть фундаментальная последовательность, а в метрике D нет.

Примеры

Пример 1. Пусть требуется найти комбинированное расстояние между двумя множествами $A, B \in \operatorname{clcv}(\mathbf{R}^2)$. А именно, подграфами функций $A = \operatorname{epi} \sqrt{1+x^2}$, $x \in (-\infty, +\infty)$, $B = \operatorname{epi}(1/x)$, $x \in (0, +\infty)$.

Оба множества неограниченны и обобщение хаусдорфова расстояния между ними равно бесконечности, и соответственно

$$\tilde{d}(A, B) = 1.$$

Их рецессивные конуса:

$$0^+A = \{(x, y) : x = r \cos t, y = r \sin t, t \in [\pi/4, 3\pi/4], r \in [0, +\infty)\},$$

$$0^+B = \{(x, y) : x = r \cos t, y = r \sin t, t \in [0, \pi/2], r \in [0, +\infty)\}.$$

Угол между крайними векторами конусов равен $\pi/4$. Соответственно их отклонение на бесконечности

$$\chi(A, B) = \sin(\pi/4) = \frac{\sqrt{2}}{2}.$$

Комбинированное расстояние между A и B равно

$$D(A, B) = \tilde{d}(A, B) + \chi(A, B) = 1 + \frac{\sqrt{2}}{2} \approx 1,707.$$

Пример 2. Пусть требуется найти комбинированное расстояние между двумя множествами $A, B \in \operatorname{clcv}(\mathbf{R}^2)$. А именно, подграфами функций $A = \operatorname{epi}(\exp(x) + 1)$, $x \in (-\infty, +\infty)$, $B = \operatorname{epi} \exp(x)$, $x \in (-\infty, +\infty)$.

В данном примере распространение хаусдорфова расстояния между множествами, опреде-

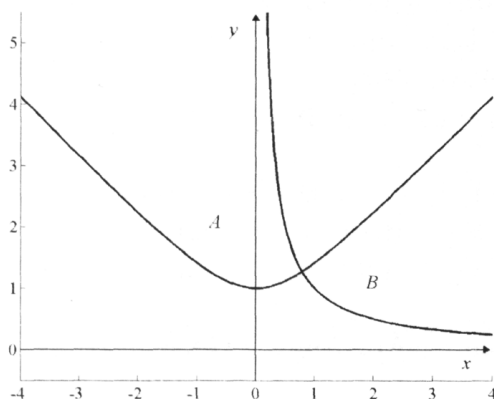


Рис. 3. Множества A и B в примере 1

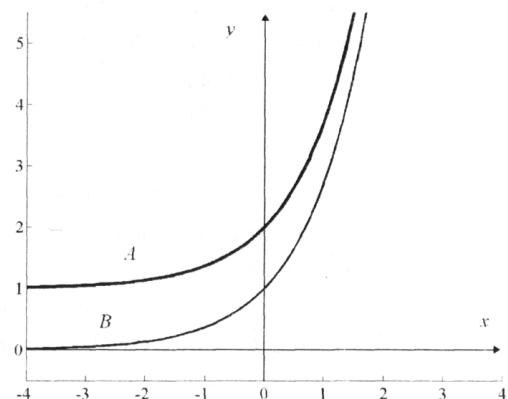


Рис. 4. Множества A и B в примере 2

ленное по формуле (4), конечно и равно $d^*(A, B) = h^*(B, A) = 1$. Хотя ни для какой точки множества B расстояние до A , равное 1 не достигается, но в пределе

$$h^*(A, B) = \lim_{t \rightarrow +\infty} ((-t, \exp(-t)), A) = 1, \quad (-t, \exp(-t)) \in B.$$

Комбинированное расстояние между A и B равно

$$D(A, B) = \tilde{d}(A, B) + \chi(A, B) = 1 - \exp(-1) + 0 \approx 0,632.$$

Пример 3. Пусть требуется найти комбинированное расстояние между двумя множествами $A, B \in \text{clcv}(\mathbf{R}^2)$. А именно, подграфиками функций $A = \text{epi}(\exp(x) + x/4)$, $x \in (-\infty, +\infty)$, $B = \text{epi } x^4$, $x \in (-\infty, +\infty)$.

В данном примере обобщение хаусдорфова расстояния между множествами равно бесконечности.

Рецессивные конуса множеств:

$$0^+A = \{(x, y) : x = r \cos t, y = r \cos t, t \in [\pi/4, \pi/2 + \arctg(1/4)], r \in [0, +\infty)\},$$

$$0^+B = \{(x, y) : x = 0, y \in [0, +\infty)\}.$$

Угол между крайними векторам конусов равен $\pi/2 + \arctg(1/4) > \pi/2$. Соответственно их отклонение на бесконечности

$$\chi(A, B) = 1.$$

Комбинированное расстояние между A и B равно

$$D(A, B) = \tilde{d}(A, B) + \chi(A, B) = 1 + 1 = 2.$$

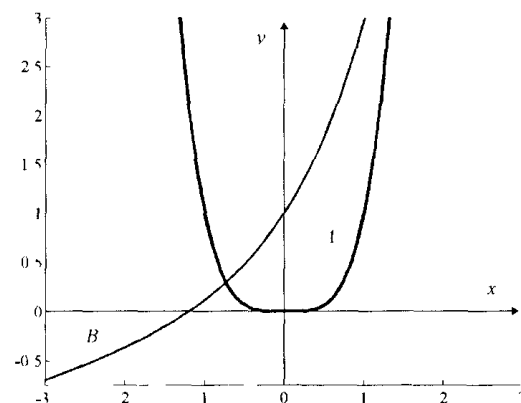


Рис. 5. Множества A и B в примере 3

Литература

1. Местецкий, Л.М. Непрерывная морфология бинарных изображений: фигуры, скелеты, циркуляры / Л.М. Местецкий. — М.: Физматлит, 2009. — 288 с.
2. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. — М.: Наука, 1974. — 456 с.
3. Тарасьев, А.М. Об одном вычислительном алгоритме решения игровых задач управления / А.М. Тарасьев, В.Н. Ушаков, А.П. Хрипунов // Прикл. математика и механика. — 1987. — Т. 51. — Вып. 2. — С. 216–222.
4. Хаусдорф, Ф. Теория множеств / Ф. Хаусдорф. — М.: КомКнига, 2006. — 304 с.
5. Бураго, Д.Ю. Курс метрической геометрии / Д.Ю. Бураго, Ю.Д. Бураго, С.В. Иванов. — М.; Ижевск: Ин-т компьют. исслед., 2004. — 511 с.
6. Лейхтвейс, К. Выпуклые множества / К. Лейхтвейс. — М.: Наука, 1985. — 335 с.
7. Экланд, И. Выпуклый анализ и вариационные проблемы / И. Экланд, Р. Темам. — М.: Мир, 1979. — 399 с.
8. Бебутов, М.В. О динамических системах в пространстве непрерывных функций / М.В. Бебутов // Бюл. мех-мат. факультета МГУ. — 1941. — № 5. — С. 1–52.
9. Панасенко, Е.А. Распространение теорем Е.А. Барабашина и Н.Н. Красовского об устойчивости на управляемые динамические системы / Е.А. Панасенко, Е.Л. Тонков // Труды Института математики и механики УрО РАН. — 2009. — Т. 15, № 3. — С. 185–201.
10. Панасенко, Е.А. Пространство $\text{clcv}(\mathbf{R}^n)$ с метрикой Хаусдорфа–Бебутова и дифференциальные включения / Е.А. Панасенко, Л.И. Родина, Е.Л. Тонков // Труды Института математики и механики УрО РАН. — 2011. — Т. 17, № 1. — С. 162–177.
11. Демьянов, В.Ф. Недифференцируемая оптимизация / В.Ф. Демьянов. — М.: Наука, 1981. — 384 с.
12. Кружков С.Н. Обобщенные решения уравнений Гамильтона–Якоби типа эйконала. I / С.Н. Кружков // Математический сборник. — 1975. — Т. 98. — Вып. 3. — С. 450–493.
13. Колмогоров, А.Н. Элементы теории функций и функционального анализа / Колмогоров А.Н., Фомин С.В. — М.: Наука, 1976. — 544 с.
14. Рокафеллар, Р. Выпуклый анализ / Р. Рокафеллар. — М.: Мир, 1973. — 472 с.

A VARIANT OF A METRIC FOR UNBOUNDED CONVEX SETS

P.D. Lebedev¹, V.N. Ushakov²

Convex analysis methods are used for the construction of distance function between closed (unbounded in common case) sets of Euclidean space. It is shown that the distance satisfies all properties of metric. It is proved that this distance is invariant under motion of the sets in space. This metric space is proved to be complete.

Keywords: Hausdorff distance, metric, convex set, recessive cone.

References

1. Mesteckij L.M. *Nepreryvnaya morfologiya binarnyx izobrazhenij: figury, skelety, cirkulyary* [Continuous morphology of binary images: figures, shells, circulars]. Moscow: Fizmatlit. 2009. 288 p. (in Russ.).
2. Krasovskij N.N., Subbotin A.I. *Pozicionnye differencial'nye igry* [Positional differential games]. Moscow: Nauka, 1974. 456 p.
3. Taras'ev A.M., Ushakov V.N., Khripunov A.P. *Prikladnaya matematika i mekhanika*. 1987. Vol. 51. Issue 2. pp. 216–222. (in Russ.).
4. Khausdorf F. *Teoriya mnozhestv* (Set Theory). Moscow: Kom kniga, 2006. 304 p. (in Russ.). [Hausdorff F. Set Theory. American Mathematical Soc., 1957. 352 p.]
5. Burago D.Yu., Burago Yu.D., Ivanov S.V. *Kurs metrisheskoj geometrii* [The course of metric geometry]. Moscow; Izhevsk: Institut komp'yuternyx issledovanij, 2004. 511 p. (in Russ.).
6. Lejxtvejs K. *Vypuklye mnozhestva* [Convex sets]. Moscow: Nauka, 1985. 335 p. (in Russ.). [von K. Leichtweiss Konvexe Mengen. Berlin: VEB Dotscher Verlag der Wissenschaften, 1980. 332 p. (in Ger.).].
7. E'kland I., Temam. R. *Vypuklyj analiz i variacionnye problemy* [Convex analysis and variational problems]. Moscow: Mir, 1979. 399 p. [Ekeland I., Temam R. Convex analysis and variational problems. SIAM, 1976. 402 p.]
8. Bebutov M.V. *Bul. mex-mat. fakul'teta MGU*. 1941. no. 5. pp. 1–52. (in Russ.).
9. Panasenko E.A., Tonkov E.L. *Trudy Instituta Matematiki I Mekhaniki*. 2009. Vol. 15, no. 3. pp. 185–201. (in Russ.).
10. Panasenko E.A., Rodina L.I., Tonkov E.L. *Prostranstvo $clcv(\mathbf{R}^n)$ s metrikoj Khausdorfa–Bebutova i differencial'nye vklucheniya*. [The space $clcv(\mathbf{R}^n)$ with the Hausdorff–Bebutov metric and differential inclusions]. *Trudy Instituta Matematiki I Mekhaniki*. 2011. Vol. 17, no. 1. pp. 162–177. (in Russ.).
11. Dem'yanov V.F. *Nedifferenciruemaya optimizaciya* [Nondifferential optimization]. Moscow: Nauka, 1981. 384 p. (in Russ.).
12. Kružkov S.N. Generalized solutions of the Hamilton-Jacobi equations of eikonal type. I. *Mathematics of the USSR – Sbornik*. 1975. Vol. 27, no. 3. pp. 406–446. <http://dx.doi.org/10.1070/SM1975v027n03ABEH002522>
13. Kolmogorov A.N., Fomin S.V. *E'lementy teorii funkcij i funkcional'nogo analiza* [Elements of theory of functions and functional analysis]. Moscow: Nauka. 1976. 544 p. (in Russ.).
14. Rokafellar R. *Vypuklyj analiz* [Convex analysis]. Moscow: Mir. 1973. 472 p. (in Russ.). [R. Tyrrell Rockafellar. Convex Analysis. Princeton University Press, 1997. 451 p.]

Поступила в редакцию 18 декабря 2012 г.

¹ Lebedev Pavel Dmitrievich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Department of Dynamic Systems of the Institute of Mathematics and Mechanics of the Russian Academy of Sciences (Ural branch).

E-mail: pleb@yandex.ru

² Ushakov Vladimir Nikolaevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Department of Dynamic Systems of the Institute of Mathematics and Mechanics of the Russian Academy of Sciences (Ural branch).

E-mail: ushak@imm.uran.ru

О СВЯЗИ ДОСТАТОЧНЫХ УСЛОВИЙ РЕГУЛЯРИЗУЕМОСТИ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Л.Д. Менихес¹

Исследуется одна бесконечная серия достаточных условий регуляризуемости интегральных уравнений. Доказано, что любые два из этих условий не являются эквивалентными, даже если ограничиться уравнениями с гладкими ядрами.

Ключевые слова: регуляризуемость, интегральные уравнения, гладкие ядра.

Введение

Решение интегральных уравнений первого рода является некорректной задачей. В 1963 г. в работе [1] А.Н. Тихонов предложил метод регуляризации для решения некорректных задач. Далее было выяснено, что метод регуляризации применим не ко всем некорректным задачам. Задачи, к которым применим метод регуляризации, стали называть регуляризуемыми. В работе [2] было построено нерегуляризуемое интегральное уравнение. Таким образом, нахождение условий регуляризуемости превратилось в важную и актуальную задачу.

В работах [3–11] исследовались различные условия регуляризуемости, использующие понятия теории двойственности банаховых пространств.

В работах [12–14] условия регуляризуемости находились с помощью исследования свойств продолженного оператора.

Достаточные условия регуляризуемости линейных обратных задач

Пусть E и F – банаховы пространства, $A: E \rightarrow F$ – линейный непрерывный инъективный оператор.

Определение 1. *Отображение A^{-1} называется регуляризуемым, если существует семейство отображений $R_\delta: F \rightarrow E$, $\delta \in (0, \delta_0)$ такое, что для любого $x \in E$*

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{\|y - Ax\| \leq \delta} \|R_\delta y - x\| = 0.$$

В этом случае семейство $\{R_\delta\}$ называется регуляризатором для A^{-1} . Операторное уравнение $Ax = y$ называется регуляризуемым, если регуляризуемо отображение A^{-1} . В случае регуляризуемости уравнения семейство $x_\delta = R_\delta y_\delta$ может быть взято в качестве удовлетворительного приближенного решения некорректной задачи нахождения решения уравнения первого рода при приближенно заданной правой части y_δ с точностью δ .

Рассмотрим классическую ситуацию $E = C(0,1)$, $F = L_2(0,1)$. Будем предполагать, что оператор A непрерывен также и в L_2 -норме. Тогда оператор A может быть продолжен по непрерывности на различные подпространства M , $C(0,1) \subset M \subset L_2(0,1)$.

В работе [2] было показано, что если продолжение A на некоторое $L_p(0,1)$, $p \geq 2$ имеет конечномерное ядро, то отображение A^{-1} регуляризуемо.

Теорема 1. *Если интегральный оператор $A: C(0,1) \rightarrow L_2(0,1)$ инъективен и его продолжение на некоторое $L_p(0,1)$, $p \geq 2$ имеет конечномерное ядро, то A^{-1} регуляризуемо.*

Таким образом, мы имеем различные достаточные условия регуляризуемости. Это бесконечная серия условий при разных $p \geq 2$. Возникает вопрос, не будут ли какие-то из этих условий

¹ Менихес Леонид Давидович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей математики, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: leonid.menikhes@gmail.com

эквивалентными, если рассматривать не произвольные операторы A , а интегральные операторы с гладкими симметричными ядрами.

В работе [14] был дан отрицательный ответ на этот вопрос. Оказалось, что все рассмотренные в теореме 1 достаточные условия попарно не эквивалентны.

В работе [13] доказывается такое усиление теоремы 1.

Теорема 2. Если интегральный оператор $A: C(0,1) \rightarrow L_2(0,1)$ инъективен и его продолжение на $L_\infty(0,1)$ имеет конечномерное ядро, то A^{-1} регуляризуемо.

Здесь также возникает естественный вопрос, не будут ли какие-нибудь достаточные условия из теоремы 1 эквивалентны достаточному условию из теоремы 2, если ограничиться операторами с гладкими ядрами. Из теоремы 3 следующего пункта следует отрицательный ответ на этот вопрос.

Сравнение условий регуляризуемости

Пусть $K(x,t)$ – непрерывная функция на квадрате $[0,1] \times [0,1]$. Рассмотрим интегральный оператор

$$Q: f(x) \rightarrow \int_0^1 K(x,t) f(t) dt, \quad (1)$$

действующий из $C(0,1)$ в $L_2(0,1)$. Через $\bar{Q}$ обозначим продолжение Q на $L_2(0,1)$. Оператор Q предполагается инъективным, так как здесь будет идти речь о регуляризуемости Q^{-1} . Оператор $\bar{Q}$ может и не быть инъективным.

Теорема 3. Существует инъективный интегральный оператор из $C(0,1)$ в $L_2(0,1)$ с гладким симметричным ядром, продолжение которого по непрерывности на любое $L_p(0,1)$, $p \geq 2$ имеет бесконечномерное ядро, а продолжение на $L_\infty(0,1)$ имеет конечномерное ядро.

Заметим, что здесь слово ядро используется в двух различных смыслах, но из контекста ясно, что имеется в виду.

Доказательство. Рассмотрим последовательность промежутков

$$J_k = \left[1 - \frac{1}{2^k}, 1 - \frac{1}{2^{k+1}} \right], \quad k = 1, 2, \dots$$

Определим следующую последовательность функций. Через $h_k(x)$ обозначим функцию на $[0,1]$ с носителем в J_k и такую, что $h_k(x) \in L_{k+1}(0,1)$, но $h_k(x) \notin L_{k+2}(0,1)$, $k = 1, 2, \dots$

Через M обозначим наименьшее замкнутое подпространство $L_2(0,1)$, содержащее все функции $h_k(x)$. Пусть $C_0^\infty(a,b)$ – подпространство $C(a,b)$, состоящее из финитных функций, т.е. бесконечно дифференцируемых и равных нулю в окрестностях точек a и b .

Для доказательства теоремы рассмотрим следующую лемму из [2].

Лемма 1. Пусть $h(t) \in L_2(a,b)$ и

$$H = \left\{ f(t) \in L_2(a,b) : \int_a^b f(t) h(t) dt = 0 \right\}.$$

Тогда

$$\overline{H \cap C_0^\infty(a,b)} = H.$$

Теперь покажем, что в ортогональном дополнении N к M существует полная ортонормированная система $\{\psi_n(t)\}$ такая, что $\psi_n(t) \in C_0^\infty(0,1)$, $n = 1, 2, \dots$. Для этого убедимся, что $\overline{N \cap C_0^\infty(0,1)} = N$. Из этого и будет следовать, что в N существует полная ортонормированная система из финитных функций, так как в этом случае из $N \cap C_0^\infty(0,1)$ можно выбрать линейно

независимую последовательность, ортогонализируя которую мы и получаем нужную систему $\{\psi_n(t)\}$.

Пусть $f \in N$ и $\varepsilon > 0$. Выберем номер n так, чтобы

$$\int_{2^{n+1}-1/2^{n+1}}^1 f^2(t) dt \leq \frac{\varepsilon^2}{4}. \quad (2)$$

Поскольку $f(t)$ ортогональна $h_k(t)$, $k=1,2,\dots$, в силу леммы 1 существует семейство $\{f_k(t), k=1,2,\dots,n\}$, для которого выполняются следующие условия:

$$\begin{aligned} 1. & f_k(t) \in C_0^\infty(J_k), \quad k=1,2,\dots,n; \\ 2. & \int_{J_k} f_k(t) h_k(t) dt = 0, \quad k=1,2,\dots,n; \\ 3. & \|f_k - f|_{J_k}\| \leq \frac{\varepsilon}{2(n+1)}, \quad k=1,2,\dots,n, \end{aligned} \quad (3)$$

где через $f|_{J_k}$ обозначено сужение $f(t)$ на промежуток J_k . На промежутке $J_0 = \left[0, \frac{1}{2}\right]$ существует функция $f_0 \in C_0^\infty(0,1/2)$ такая, что $\|f_0 - f|_{J_0}\| \leq \frac{\varepsilon}{2(n+1)}$. Теперь рассмотрим функцию

$$g(t) = \begin{cases} f_k(t) & \text{при } t \in J_k, \quad k=0,1,\dots,n; \\ 0 & \text{при } t \in \left[\frac{2^{n+1}-1}{2^{n+1}}, 1\right]. \end{cases}$$

В силу (2) и (3) $g \in C_0^\infty(0,1)$, $g \in N$, так как для любого $k=1,2,\dots$

$$\int_0^1 g(t) h_k(t) dt = \int_{J_k} g(t) h_k(t) dt = 0,$$

а значит и для любого $m \in M$

$$\int_0^1 g(t) m(t) dt = 0.$$

Наконец, из соотношения

$$\begin{aligned} \|g - f\| &= \sqrt{\int_0^1 (g - f)^2 dt} \leq \sqrt{\sum_{k=0}^n \int_{J_k} (g - f)^2 dt + \frac{\varepsilon^2}{4}} \leq \\ &\leq \sum_{k=0}^n \sqrt{\int_{J_k} (g - f)^2 dt} + \frac{\varepsilon}{2} \leq \sum_{k=0}^n \frac{\varepsilon}{2(n+1)} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon \end{aligned}$$

следует, что $N \cap C_0^\infty(0,1) = N$.

Теперь рассмотрим интегральный оператор Q (1) с ядром

$$K(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \psi_n(t), \quad (4)$$

где $\{\varphi_n(x)\}$ – произвольная ортонормированная система из бесконечно дифференцируемых на $[0,1]$ функций, $\{\psi_n(t)\}$ – построенная выше система и

$$a_n = \left(\sup_{0 \leq x \leq 1} \max \left(|\varphi_n(x)|, \dots, |\varphi_n^{(n)}(x)| \right) \right)^{-1} \left(\sup_{0 \leq t \leq 1} \max \left(|\psi_n(t)|, \dots, |\psi_n^{(n)}(t)| \right) \right)^{-1} n^{-2}.$$

Тогда ясно, что ряд (4) сходится равномерно и сходятся равномерно ряды, полученные его почленным дифференцированием произвольное число раз, и, следовательно, $K(x, t)$ – бесконечно дифференцируемая функция на квадрате $[0, 1] \times [0, 1]$.

Теперь покажем, что $\ker \bar{Q} = M$. Действительно, если

$$\int_0^1 \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \psi_n(t) f(t) dt = 0, \quad (5)$$

то

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n b_n \varphi_n(x) = 0, \quad (6)$$

где $b_n = \int_0^1 f(t) \psi_n(t) dt$ – n -й коэффициент Фурье функции $f(t)$ по системе $\{\psi_n(t)\}$, так как ряд в формуле (5) по теореме Лебега можно почленно интегрировать. Из (6) следует $b_n = 0$, $n = 1, 2, \dots$, т.е. $f(t) \in M$. Ясно также, что из $f(t) \in M$ следует $f(t) \in \ker \bar{Q}$. Таким образом доказано, что $\ker \bar{Q} = M$. Для того, чтобы ядро Q было симметричным, достаточно положить $\varphi_n = \psi_n$. Отсюда следует, что Q удовлетворяет условиям теоремы. В самом деле, продолжение Q по непрерывности на любое $L_p(0, 1)$ имеет бесконечномерное ядро, так как оно содержит все функции h_k , начиная с некоторого номера. А продолжение Q на $L_{\infty}(0, 1)$ имеет нулевое ядро, так как в M все функции, кроме тождественного нуля, не ограничены. Теорема доказана.

Из этой теоремы следует, что достаточные условия регуляризуемости для любого p из теоремы 1 и достаточное условие из теоремы 2 не эквивалентны, так как для построенного в теореме 3 оператора Q теорема 1 не дает ответа о регуляризуемости Q^{-1} , в то время как из теоремы 2 следует регуляризуемость Q^{-1} .

Литература

1. Тихонов, А.Н. О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации / А.Н. Тихонов // Докл. АН СССР. – 1963. – Т. 151, № 3. – С. 501–504.
2. Менихес, Л.Д. О регуляризуемости отображений, обратных к интегральным операторам / Л.Д. Менихес // Докл. АН СССР. – 1978. – Т. 241, № 2. – С. 282–285.
3. Менихес, Л.Д. Необходимое и достаточное условие линейной регуляризуемости / Л.Д. Менихес, В.А. Винокуров // Докл. АН СССР. – 1976. – Т. 229, № 6. – С. 1292–1294.
4. Менихес, Л.Д. Условия линейной и конечномерной регуляризуемости линейных обратных задач / Л.Д. Менихес, А.Н. Пличко // Докл. АН СССР. – 1978. – Т. 241, № 5. – С. 1027–1030.
5. Менихес, Л.Д. О равномерной регуляризации некорректных задач / Л.Д. Менихес // Изв. вузов. Матем. – 1979. – № 11. – С. 34–39.
6. Менихес, Л.Д. Линейная регуляризуемость отображений, обратных к линейным операторам / Л.Д. Менихес // Изв. вузов. Матем. – 1979. – № 12. – С. 35–38.
7. Менихес, Л.Д. О некоторых проблемах линейной регуляризуемости / Л.Д. Менихес, В.А. Винокуров, Е.Н. Доманский, А.Н. Пличко // Докл. АН СССР. – 1983. – Т. 270, № 1. – С. 25–28.
8. Менихес, Л.Д. До теорії регуляризівності в топологічних векторних просторах / Л.Д. Менихес, А.М. Плiчко // Укр. матем. журн. – 1990. – Т. 42, № 6. – С. 777–781.
9. Менихес, Л.Д. О критерии сходимости аппроксимаций метода регуляризации в банаховых пространствах / Л.Д. Менихес, В.П. Танана // Докл. РАН. – 1998. – Т. 363, № 5. – С. 961–964.
10. Менихес, Л.Д. О критериях сходимости аппроксимаций метода регуляризации / Л.Д. Менихес // Сибирский математический журнал. – 1999. – Т. 40, № 1. – С. 130–141.

11. Менихес, Л.Д. О регуляризации неустойчивых задач в пространствах непрерывных функций / Л.Д. Менихес // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика, физика, химия». – 2003. – Вып. 3. – № 6(22). – С. 9–16.
12. Менихес, Л.Д. О регуляризуемости некоторых классов отображений, обратных к интегральным операторам / Л.Д. Менихес // Матем. заметки. – 1999. – Т. 65, № 2. – С. 222–229.
13. Менихес, Л.Д. Об одном достаточном условии регуляризуемости линейных обратных задач / Л.Д. Менихес // Матем. заметки. – 2007. – Т. 82, № 2. – С. 242–247.
14. Менихес, Л.Д. О сравнении условий регуляризуемости интегральных уравнений / Л.Д. Менихес, О.А. Кондратьева // Известия Челябинского научного центра. – 2009. – Вып. 1(43). – С. 11–15.

ON CONNECTION BETWEEN SUFFICIENT CONDITIONS OF REGULARIZABILITY OF INTEGRAL EQUATIONS

L.D. Menikhes¹

In this paper some infinite series of sufficient conditions of regularizability of integral equations is investigated. It is proved, that any two of these conditions are not equivalent, even if the integral equations have the smooth kernels.

Keywords: regularizability, integral equations, smooth kernels.

References

1. Tikhonov A.N. *Dokl. AN SSSR*. 1963. Vol. 151, no. 3. pp. 501–504. (in Russ.).
2. Menikhes L.D. *Soviet Math. Dokl.* 1978. Vol. 19, no. 4. pp. 838–841. (in Russ.).
3. Vinokurov V.A., Menikhes L.D. *Soviet Math. Dokl.* 1976. Vol. 17, no. 4. pp. 1172–1175. (in Russ.).
4. Menikhes L.D., Plichko A.N. *Soviet Math. Dokl.* 1978. Vol. 19, no. 4. pp. 963–965. (in Russ.).
5. Menikhes L.D. *Izv. vuzov. Matem.* 1979. no. 11. pp. 34–39. (in Russ.).
6. Menikhes L.D. *Izv. vuzov. Matem.* 1979. no. 12. pp. 35–38. (in Russ.).
7. Menikhes L.D., Vinokurov V.A., Domanskii E.N., Plichko A.N. *Dokl. AN SSSR*. 1983. Vol. 270, no. 1. pp. 25–28. (in Russ.).
8. Menikhes L.D., Plichko A.M. *Ukr. matem. zhurn.* 1990. Vol. 42, no. 6. pp. 777–781. (in Ukr.).
9. Menikhes L.D., Tanana V.P. *Dokl. RAN*. 1998. Vol. 363, no. 5. pp. 961–964. (in Russ.).
10. Menikhes L.D. *Sibirskii matematicheskii zhurnal*. 1999. Vol. 40, no. 1. pp. 130–141. (in Russ.).
11. Menikhes L.D. *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematika, fizika, khimiya"*. 2003. Issue 3. no. 6(22). pp. 9–16. (in Russ.).
12. Menikhes L.D. *Matem. zametki*. 1999. Vol. 65, no. 2. pp. 222–229. (in Russ.).
13. Menikhes L.D. *Matem. zametki*. 2007. Vol. 82, no. 2. pp. 242–247. (in Russ.).
14. Menikhes L.D., Kondrat'eva O.A. *Izvestiya Chelyabinskogo nauchnogo centra*. 2009. Issue 1(43). pp. 11–15. (in Russ.).

Поступила в редакцию 22 августа 2012 г.

¹ Menikhes Leonid Davidovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of General Mathematics, South Ural State University
E-mail: leonid.menikhes@gmail.com

ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ СТРАТЕГИИ В ИГРОВЫХ ЗАДАЧАХ ДЛЯ ЛИНЕЙНЫХ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ СИСТЕМ ВОЛЬТЕРРА, II

В.Л. Пасиков¹

Изучены задача наведения и игровая задача m лиц для случая равновесия системы функционалов (типа расстояния) в смысле Нэша. Для решения этих задач применяется известная экстремальная конструкция академика Н.Н. Красовского, модифицированная для рассматриваемых ситуаций.

Ключевые слова: игровая задача, интегро-дифференциальная система, управляющее воздействие, позиции игры, программный максимум, равновесие в смысле Нэша.

Предлагаемая работа примыкает к работам [1–8] и является продолжением статьи [9]. Все понятия и обозначения, несопровождаемые ссылками и пояснениями, имеются в [9]. Нумерация параграфов и формул продолжает нумерацию [9].

3. Игровая задача наведения для линейных интегро-дифференциальных систем Вольтерра

Рассматривается конфликтно-управляемая линейная интегро-дифференциальная система Вольтерра

$$\dot{x}(t) = f(t) + A(t)x(t) + \int_0^t K(t, s)x(s)ds + u(t) - v(t), \quad x(0) = x_0. \quad (40)$$

Все понятия и ограничения аналогичны [9].

Игра рассматривается на заданном отрезке $[0, \theta]$, плата задана равенством

$$\gamma[\theta] = \left\| \{x[\theta]\}_m \right\|. \quad (41)$$

Первый игрок распоряжается выбором управления $u \in P$ и стремится минимизировать величину $\gamma[\theta]$ на траекториях $x[t]$, $0 \leq t \leq \theta$, системы (40), реализующихся под действием управлений $u[t]$, $0 \leq t \leq \theta$, $u \in P$, в паре с любой интегрируемой реализацией $v[t]$, $0 \leq t \leq \theta$, $v \in Q$, второго игрока. Цель второго игрока противоположна и состоит в максимизации величины (41).

Пусть $\varphi(s) = \Phi(s, 0)x_0 + f(s)$, где $\Phi(t, s) = \int_s^t K(t, \tau)X(\tau, s)d\tau$, $X(t, s)$ – матрица Коши системы $\dot{x}(t) = A(t)x(t)$.

Тогда решение системы (40) записывается в виде

$$x(t) = X(t, 0)x_0 + \int_0^t \tilde{x}(t, s)\varphi(s)ds + \int_0^t \tilde{x}(t, s)u(s)ds - \int_0^t \tilde{x}(t, s)v(s)ds. \quad (42)$$

$$\tilde{x}(t, s) = X(t, s) + \int_s^t X(t, \tau)R(\tau, s)d\tau,$$

$R(t, s)$ – резольвента матрицы $\Phi(t, s)$.

Предполагаем, что до момента t_0 , $0 \leq t_0 \leq \theta$ начала игры, оба игрока применяют некоторые допустимые реализации управлений $u_0[t]$, $v_0[t]$, $0 \leq t \leq t_0$. Если $u[t] \equiv 0$, $v[t] \equiv 0$ после момента t , $t_0 \leq t \leq \theta$, то состояние системы (40) в момент θ согласно (42) записывается по формуле

$$x(\theta, t) = x_0(\theta) + \int_0^{t_0} \tilde{x}(\theta, s)u_0[s]ds + \int_{t_0}^t \tilde{x}(\theta, s)u[s]ds - \int_0^{t_0} \tilde{x}(\theta, s)v_0[s]ds - \int_{t_0}^t \tilde{x}(\theta, s)v[s]ds, \quad (43)$$

¹ Пасиков Владимир Леонидович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра математического анализа и информатики, Орский гуманитарно-технологический институт (филиал Оренбургского государственного университета)
E-mail pasikov_fmfi@mail.ru

где $x_0(\theta) = X(\theta, 0)x_0 + \int_0^\theta \tilde{x}(\theta, s)\varphi(s)ds$.

Определение 3.1. Пару $p = \{t, x(\theta, t)\}$ будем называть позицией игры в момент t , $0 \leq t < \theta$; $p_0 = \{t_0, x(\theta, t_0)\}$ – начальная позиция, где

$$x(\theta, t_0) = x_0(\theta) + \int_0^{t_0} \tilde{x}(\theta, s)u_0[s]ds - \int_0^{t_0} \tilde{x}(\theta, s)v_0[s]ds,$$

тогда состояние системы (40) с учетом (43) в момент θ имеет вид

$$x(\theta) = x(\theta, t_0) + \int_{t_0}^\theta \tilde{x}(\theta, s)u[s]ds + \int_{t_0}^\theta \tilde{x}(\theta, s)v[s]ds. \quad (44)$$

Уточним постановки задач для обоих игроков в рассматриваемом случае наведения.

Задача 3.1. Среди допустимых стратегий U первого игрока найти стратегию U^e , которая при любом допустимом способе управления второго игрока для любой начальной позиции p_0 , $0 \leq t_0 < \theta$, гарантирует результат игры:

$$(\mathcal{J}[\theta] | t_0, x(\theta, t_0), U^e, v) \leq \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0)).$$

Задача 3.2. Среди допустимых стратегий V второго игрока найти стратегию V^e , которая при любом допустимом способе управления первого игрока для любой начальной позиции p_0 , $0 \leq t_0 < \theta$, гарантирует результат игры:

$$(\mathcal{J}[\theta] | t_0, x(\theta, t_0), u, V^e) \geq \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0)).$$

Задача 3.3. Среди допустимых стратегий U, V первого и второго игроков соответственно найти стратегии U^e, V^e , которые для любой начальной позиции p_0 , $0 \leq t_0 < \theta$, гарантируют результат игры $(\mathcal{J}[\theta] | t_0, x(\theta, t_0), U^e, V^e) = \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0))$.

В рассматриваемом случае программный максимин $\varepsilon(t_0, x(\theta, t_0))$ для начальной позиции p_0 , $0 \leq t_0 < \theta$ согласно (43), (44) записывается в виде

$$\varepsilon(t_0, x(\theta, t_0)) = \max_{\|l\|=1} \left[\int_{t_0}^\theta \max_{v \in Q} l' \{ \tilde{x}(\theta, s)v[s] \}_m ds - \int_{t_0}^\theta \max_{u \in P} l' \{ \tilde{x}(\theta, s)u[s] \}_m ds - l' \{ x(\theta, t_0) \}_m \right], \quad (45)$$

если правая часть этого равенства положительна, иначе $\varepsilon(t_0, x(\theta, t_0)) = 0$.

Здесь рассматривается лишь регулярный случай, когда максимум в правой части (45) достигается на единственном векторе $l = l_0(t_0, x(\theta, t_0))$, $0 \leq t_0 < \theta$.

Далее обозначим

$$\{l'_0 \tilde{x}(\theta, t)\} = \{l'_0 X(\theta, t)\}_m + \int_t^\theta \{l'_0 X(\theta, \tau)\}_m R(\tau, t) d\tau = x^e[t]. \quad (46)$$

Определение 3.2. Пусть m -мерный вектор l_0 в каждый момент t_0 , $0 \leq t_0 < \theta$, доставляет максимум правой части (45). Тогда, если позиция p_0 такова, что $\varepsilon_0(t_0, x(\theta, t_0)) > 0$, то с этой позицией будем сопоставлять множество $U^e(t_0, x(\theta, t_0))$ ($V^e(t_0, x(\theta, t_0))$) всех векторов $u^e \in P$ ($v^e \in Q$), для которых $x^e[t_0]u^e[t_0] = \max_{u \in P} x^e[t_0]u$ ($x^e[t_0]v^e[t_0] = \max_{v \in Q} x^e[t_0]v$). В этом случае стратегия U^e (V^e) называется экстремальной стратегией первого (второго) игрока.

Отметим, что здесь $\{l'_0 X(\theta, t)\}_m$ – первые m координат решения системы $\dot{x}(t) = -A'(t)x(t)$ с краевым условием l_0 [1, с. 117]. У вектора l_0 после m -й координаты приписаны нули.

С использованием ранее приведённых фрагментов рассуждений по плану доказательства аналогичных теорем из [1, с. 153] доказывается следующее утверждение.

Теорема 3.1. В регулярном случае игры из задач 3.1 и 3.2 экстремальные стратегии $U^e = U^e(t, x(\theta, t))$ и $V^e = V^e(t, x(\theta, t))$ $0 \leq t_0 \leq t < \theta$ доставляют решения этих задач. Они составляют пару оптимальных стратегий $\{U^e, V^e\}$, которые разрешают задачу 3.3 и доставляют седловую точку рассматриваемой игры, причём $(\gamma[\theta] | t_0, x(\theta, t_0) U^e, V^e) = \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0))$, то есть оптимальная плата игры $(\gamma[\theta] | t_0, x(\theta, t_0) U^e, V^e)$ для всякой исходной позиции $(t_0, x(\theta, t_0))$ равняется программному максимуму $\varepsilon(t_0, x(\theta, t_0))$.

Доказательство. Запишем следующую функцию:

$$\begin{aligned} \varepsilon[t] = \varepsilon(t, x(\theta, t)) &= \int_{t_0}^{\theta} \max_{v \in V} \{l'_0(s, x(\theta, s) \tilde{x}(\theta, s))\}_m v[s] ds - \\ &- \int_{t_0}^t \max_{u \in U} \{l'_0(s, x(\theta, s) \tilde{x}(\theta, s))\}_m u[s] ds + \int_{t_0}^t \{l'_0(s, x(\theta, s) \tilde{x}(\theta, s))\}_m v_0[s] ds - \\ &- \int_{t_0}^t \{l'_0(s, x(\theta, s) \tilde{x}(\theta, s))\}_m u_0[s] ds - \{l'_0(t_0, x(\theta, t_0), \tilde{x}(\theta, t_0))\}_m. \end{aligned} \quad (47)$$

Здесь $u_0[s]$, $v_0[s]$, $t_0 \leq s \leq t$ – допустимые управления, реализовавшиеся к моменту t . Аналогично [1] можно показать, что функция $\varepsilon(t, x(\theta, t))$, $t_0 \leq t \leq \theta$, $0 \leq t_0 < \theta$, абсолютно непрерывна по t в области $\varepsilon(t, x(\theta, t)) > 0$ и вектор $l_0(t, x(\theta, t))$ при дифференцировании не зависит от t , t_0 – начало процесса управления.

Производная от функции (47) существует почти всюду [1, с. 144] и имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon[t]}{dt} &= \max_{u \in P} \{l'_0(t, x(\theta, t) \tilde{x}(\theta, t))\}_m u - \max_{v \in Q} \{l'_0(t, x(\theta, t) \tilde{x}(\theta, t))\}_m v + \\ &+ \{l'_0(t, x(\theta, t) \tilde{x}(\theta, t))\}_m v - \{l'_0(t, x(\theta, t) \tilde{x}(\theta, t))\}_m u. \end{aligned}$$

Отсюда согласно (46) получим

$$\frac{d\varepsilon[t]}{dt} = -\max_{v \in Q} x^e[t]v + \max_{u \in P} x^e[t]u + x^e[t]v[t] - x^e[t]u[t]. \quad (48)$$

Если теперь первый игрок, начиная с момента t_0 , применяет экстремальную стратегию U^e в течение всей игры, а второй – произвольную допустимую, то из (48) и определения 3.2 получаем $\frac{d\varepsilon[t]}{dt} = -\max_{v \in V} x^e(t)v + x^e(t)v \leq 0$. Таким образом, положительная функция $\varepsilon[t] = \varepsilon(t, x(\theta, t))$ имеет почти всюду на $[t_0, \theta]$ неположительную производную. Следовательно, функция $\varepsilon[t]$ на $[t_0, \theta]$ не возрастает, а значит, $\varepsilon(\theta, x(\theta, \theta)) \leq \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0))$, но из (47) вытекает, что $\varepsilon(\theta, x(\theta, \theta)) = \|\{x[\theta]\}_m\|$.

Допустим, что второй игрок в течение всей игры применяет экстремальную стратегию V^e . Тогда из (48) имеем $\frac{d\varepsilon[t]}{dt} = \max_{u \in U} x^e[t]u - x^e[t]u[t]$. Отсюда $\frac{d\varepsilon[t]}{dt} \geq 0$. Таким образом, когда функция $\varepsilon[t]$ положительна, она имеет неотрицательную производную при почти всех $t \in [t_0, \theta]$. Следовательно, функция $\varepsilon[t]$ на $[t_0, \theta]$ не убывает. Значит, $\varepsilon(\theta, x(\theta, \theta)) \geq \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0))$.

Пусть теперь в регулярном случае оба игрока применяют свои экстремальные стратегии, тогда, как это следует из предыдущего, им будет гарантирован результат игры $\|\{x[\theta]\}_m\| = \varepsilon(t_0, x(\theta, t_0))$.

Пример. Рассмотрим модельный пример. Пусть задана система из двух скалярных уравнений

$$\dot{x}(t) = e^t + \int_0^t x(s) ds + u(t) - v(t), \quad (49)$$

здесь $f(t) = e^t$, $K(t, s) \equiv 1$, однородная дифференциальная система для (49) записывается в виде $\dot{x} = 0$. В качестве фундаментальной матрицы выбираем $X(t) = 1$, тогда матрица Коши $X(t, s) = X(t)X^{-1}(s) \equiv 1$, $X(t, 0) = 1$; вычисляем $\Phi(t, s) = \int_s^t K(t, \tau)X(\tau, s)d\tau = \int_s^t d\tau = t - s$, резольвента этой матрицы определяется формулой [10, с. 22] $R(t, s) = \text{sh}(t - s) = \frac{e^{t-s} - e^{-(t-s)}}{2}$, тогда

$$\tilde{x}(t, s) = 1 + \int_s^t \text{ch}(\tau - s)d\tau = 1 + \text{ch}(\tau - s) \Big|_{\tau=s}^{\tau=t} = 1 + \text{ch}(t - s) - 1 = \text{ch}(t - s).$$

Выбираем какое-либо ненулевое начальное условие, например $x_0 = x(0) = 3$, получаем $\varphi(t) = f(t) + \Phi(t, 0)x_0 = e^t + 3t$.

Записываем состояние системы в момент t

$$\begin{aligned} x(t) &= X(t, 0)x_0 + \int_0^t \tilde{x}(t, s)\varphi(s)ds + \int_0^t \tilde{x}(t, s)u(s)ds - \int_0^t \tilde{x}(t, s)v(s)ds = \\ &= 3 + \int_0^t \text{ch}(t - s)(e^s + 3s)ds + \int_0^t \text{ch}(t - s)u(s)ds - \int_0^t \text{ch}(t - s)v(s)ds. \end{aligned}$$

Проведём вычисления:

$$\int_0^t \text{ch}(t - s)e^s ds + 3 \int_0^t \text{ch}(t - s)s ds = \frac{1}{2} \int_0^t (e^{t-s} + e^{-(t-s)})e^s ds + \frac{3}{2} \int_0^t (e^{t-s} + e^{-(t-s)})s ds.$$

Для первого слагаемого получаем

$$\frac{1}{2} \int_0^t (e^t + e^{-t+2s}) ds = \frac{1}{2} \int_0^t (e^t s + \frac{1}{2} e^{-t+2s}) \Big|_0^t = \frac{1}{2} te^t + \frac{1}{4} e^t - \frac{1}{4} e^{-t};$$

для второго слагаемого интегрированием по частям получаем

$$\frac{3}{2} e^t \int_0^t e^{-s} s ds + \frac{3}{2} e^{-t} \int_0^t (e^s s) ds = \frac{3}{2} (-t - 1 + e^t) + \frac{3}{2} (t - 1 + e^{-t}).$$

Подставим в (1)

$$x(t) = \frac{1}{2} te^t + \frac{7}{4} e^t + \frac{5}{4} e^{-t} + \int_0^t \text{ch}(t - s)u(s)ds - \int_0^t \text{ch}(t - s)v(s)ds,$$

нетрудно проверить, что $x(0) = 3$.

Будем теперь считать, что начало управления $t_0 = 0$, начальная точка находится в точке (3,3) координат, из элементарных соображений заключаем, что движение в плоскости Oxy будет проходить по прямой $y = x$ по направлению к началу координат. Полагаем, что управляющие воздействия стеснены ограничениями $u \in [0, 1], v \in [0, 1]$. Седловую точку определяют стратегии U^e, V^e , согласно которым в каждый момент $t \in [0, \theta]$ управляющие воздействия принимают значения $u = 1, v = 1$. При этих значениях экстремальный вектор $l_0 = \left\{ -\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\}$ и согласно (45)

$$\varepsilon(0, x(\theta, 0)) = \max(-e'x(\theta, 0)) = -\left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \quad 3 - \frac{1}{\sqrt{2}} \quad 3\right) = \frac{6}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2}} = 3\sqrt{2},$$

то есть сближения с началом координат нет, в других случаях точка (3,3) будет либо приближаться к началу координат, либо удаляться.

4. Игровая задача для интегро-дифференциальных систем в случае m лиц

Рассматривается управляемая система, эволюция которой описывается векторным интегро-дифференциальным уравнением Вольтерра

$$\dot{x}(t) = f(t) + A(t)x(t) + \int_0^t K(t,s)x(s)ds + \sum_{i=1}^m u_i(t), \quad x(0) = x_0, \quad (50)$$

здесь x – n -мерный фазовый вектор, $f(t)$ – n -мерная интегрируемая по Лебегу на $[0, \theta]$ вектор-функция, $\theta > 0$ – фиксированный момент, $K(t, s)$ – непрерывная на $[0, \theta] \times [0, \theta]$ матрица $n \times n$, $A(t)$ – непрерывная на $[0, \theta]$ матрица $n \times n$, $u_i(t), i = \overline{1, m}$ – управляющие воздействия, стесненные ограничениями, $u_i \in U_i, U_i$ – выпуклые компакты в R^n , а реализации управляющих воздействий $u_i[t], t \in [0, \theta]$ – измеримые по Лебегу функции. Все интегралы понимаются в смысле Лебега. Как показано в [9], при таких ограничениях система (50) имеет единственное абсолютно непрерывное решение $x[t]$, удовлетворяющее начальному условию $x[0] = x_0$.

Решение системы (50) записывается в виде (42):

$$x(t) = X(t, 0)x_0 + \int_0^t \tilde{x}(t, s)\varphi(s)ds + \sum_{i=1}^m \int_0^t \tilde{x}(t, s)u_i[s]ds. \quad (51)$$

Пусть, как и в [8], задана система функционалов

$$\Omega = \{Y_i \mid Y_i(u_1, \dots, u_m) = \varphi_i(x[\theta]), i = \overline{1, m}\}. \quad (52)$$

Задача 4.1. Найти такие стратегии $U_1^e, \dots, U_m^e$, для которых выполняются соотношения $\varphi_i(x^e[\theta]) \leq \varphi_i(x'[\theta]), i = \overline{1, m}$.

Здесь $x^e[\theta]$ – точка реализовавшейся траектории $x[t]$ системы (50), которая отвечает стратегиям $U_1^e, \dots, U_m^e$; $x'[\theta]$ – точка траектории $x[t]$, $0 \leq t \leq \theta$, системы (50), соответствующая управлению $u_1^e[t], \dots, u_{i-1}^e[t], u_i[t], u_{i+1}^e[t], \dots, u_m^e[t]$, где $u_j^e[t], j \neq i, j = \overline{1, m}$, формируется на основе U_j^e ; $u_i[t]$ – реализация произвольного измеримого по Лебегу управления, стесненного условием $u_i \in U_i$.

Если задача 4.1 разрешима, то набор стратегий $U^e = \{U_1^e, \dots, U_m^e\}$ называется равновесным по Нэшу для игры (50), (52) [8]. Как и в [8], рассмотрим случай, когда

$$Y_i(u_1, \dots, u_m) = \|c^i - x[\theta]\|, \quad (53)$$

где c^i – заданные точки в $R^n, i = \overline{1, m}$.

Считаем, что до момента начала игры $t_0, 0 \leq t_0 < \theta$, все игроки уже реализовали некоторые допустимые управления $u_i^0[t], 0 \leq t \leq t_0$; далее до момента $t, t_0 \leq t < \theta$, применялись некоторые допустимые управления согласно тем или иным соображениям игроков, а после момента t предполагаем, что $u[t] \equiv 0$. Тогда в момент t состояние системы (50) имеет вид

$$x(\theta, t) = x(\theta, t_0) + \sum_{i=1}^m \int_{t_0}^t \tilde{x}(\theta, s)u_i[s]ds, \quad \text{где } x(\theta, t_0) = X(\theta, 0)x_0 + \int_0^{\theta} \tilde{x}(\theta, s)\varphi(s)ds + \sum_{i=1}^m \int_0^{t_0} \tilde{x}(\theta, s)u_i^0[s]ds.$$

Следовательно,

$$x(\theta, t) = x(\theta, t_0) + \sum_{i=1}^m \int_{t_0}^t \tilde{x}(\theta, s)u_i[s]ds. \quad (54)$$

Определение 4.1. Для i -го игрока, $i = \overline{1, m}$, тройку $p = \{t, x(\theta, t), c^i\}$ будем называть позицией в момент $t, 0 \leq t_0 \leq t \leq \theta$, а $p_0 = \{t_0, x(\theta, t_0), c^i\}$ – начальной позицией.

Определение 4.2. Стратегией U_i для i -го игрока, $i = \overline{1, m}$, будем называть многозначное отображение, которое каждой реализовавшейся позиции $p = \{t, x(\theta, t), c^i\}$, $t_0 \leq t \leq \theta$, $0 \leq t_0 < \theta$, ставит в соответствие некоторое непустое множество $U_i(t, x(\theta, t), c^i) \div u_i(t, x(\theta, t), c^i) \subset U_i$ [1, с. 61].

Множества U_i предполагаются выпуклыми замкнутыми и полунепрерывными сверху по включению при изменении позиции. Такие стратегии и соответствующие им управления называют допустимыми. Под движением системы (50) понимают решение линейного интегродифференциального уравнения Вольтерра (54).

Будем решать задачу за k -го игрока, $k = \overline{1, m}$. Введем в рассмотрение функцию

$$\varepsilon_k(t_0, x(\theta, t_0), c^k) = \max_{\|V\|=1} [I'(c^k - x(\theta, t_0)) - \int_{t_0}^{\theta} \max_{u_k \in U_k} \{I' \tilde{x}(\theta, s) u_k(s)\} ds - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^m \int_{t_0}^{\theta} \min_{u_i \in U_i} \{I' \tilde{x}(\theta, s) u_i(s)\} ds], \quad (55)$$

если правая часть этого равенства положительна, иначе $\varepsilon_k(t_0, x(\theta, t_0), c^k) = 0$.

Аналогично предыдущему говорят, что имеет место регулярный случай, если для всех позиций $\{t_0, x(\theta, t_0), c^k\}$, $1 \leq k \leq m$, $0 \leq t_0 < \theta$, которые могут встретиться в рассматриваемой игре и для которых максимум в правой части (55) достигается на единственном векторе $l_0^k = l_0^k(t_0, x(\theta, t_0), c^k)$. Мы рассматриваем лишь регулярный случай. Предположим, что в момент $t = t_0$ известен экстремальный вектор l_0^k , доставляющий максимум правой части (55).

Определение 4.3. Пусть вектор l_0^k в каждый момент t_0 , $0 \leq t_0 < \theta$, доставляет максимум правой части (55). Тогда, если позиция $p_0 = \{t_0, x(\theta, t_0), c^k\}$ такова, что $\varepsilon_k(t_0, x(\theta, t_0), c^k) > 0$, то с этой позицией будем сопоставлять множество $U_k^e(t_0, x(\theta, t_0), c^k)$, $1 \leq k \leq m$, всех векторов $u_k^e \in U_k$, которые удовлетворяют условию $x_k^e[t_0] u_k^e[t_0] = \max_{u_k \in U_k} x_k^e[t_0] u_k$, где вектор-строка $x_k^e[t_0] = \{l_0^{k'} \tilde{x}(\theta, t_0)\}$. Тогда стратегии U_k^e назовем экстремальными.

Замечание. Так как согласно (17), (18) $\tilde{x}(t, s) = X(t, s) + \int_s^t X(t, \tau) R(\tau, s) d\tau$, где $R(t, s)$ – резольвента матрицы $\Phi(t, s)$, то функция $x_k^e(t)$ является решением интегрального уравнения Вольтерра второго рода $x_k^e(t) = \{l_0^{k'} X(\theta, t)\} + \int_t^{\theta} \Phi'(\tau, t) x_k^e(\tau) d\tau$ [11].

Аналогично [1] можно показать, что экстремальные стратегии допустимы.

Теорема 4.1. В регулярном случае экстремальные стратегии U_k^e , $1 \leq k \leq m$, уравнивают в смысле Нэша систему функционалов (53).

Доказательство. Запишем функцию

$$\begin{aligned} \varepsilon_k(t, x(\theta, t), c^k) &= l_0^{k'} (c^k - x(\theta, t_0)) - \int_{t_0}^t \{l_0^{k'} \tilde{x}(\theta, s)\} u_k(s) ds - \\ &- \int_t^{\theta} \max_{u_k \in U_k} \{l_0^{k'} \tilde{x}(\theta, s)\} u_k(s) ds - \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^m \{l_0^{k'} \tilde{x}(\theta, s)\} u_k(s) ds - \int_t^{\theta} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^m \min_{u_i \in U_i} \{l_0^{k'} \tilde{x}(\theta, s)\} u_i(s) ds = \\ &= l_0^{k'} (c^k - x(\theta, t_0)) - \int_{t_0}^t x_k^e(s) u_k^e(s) ds - \int_t^{\theta} x_k^e(s) u_k(s) ds - \sum_{i=1, i \neq k}^m \int_{t_0}^{\theta} x_i^e(s) u_i(s) ds. \end{aligned} \quad (56)$$

Из этой формулы согласно определению 4.3 получаем, что $\varepsilon_k(\theta) = Y_k(u_1^e, \dots, u_m^e)$, $\varepsilon_k(t_0) = Y_k(u_1^e, \dots, u_{k-1}^e, u_k, u_{k+1}^e, \dots, u_m^e)$, т.е. $\varepsilon_k(\theta)$ – значение функционала Y_k , когда все игроки применяют свои экстремальные управления, а $\varepsilon_k(t_0)$ – значение функционала Y_k , когда k -й игрок применяет произвольное допустимое управление, а остальные игроки применяют свои экстремальные управления.

Вычисляем производную

$$\frac{d\varepsilon_k(t)}{dt} = -x_k^e(t)u_k^e(t) + x_k^e(t)u_k(t) \leq 0,$$

отсюда вытекает, что при замене в (56) игроком P_k произвольного допустимого управления на экстремальное функция (56) не возрастает, следовательно, получаем, что $Y_k(u_1^e, \dots, u_m^e) \leq Y_k(u_1^e, \dots, u_{k-1}^e, u_k, u_{k+1}^e, \dots, u_m^e)$.

Таким образом, теорема доказана.

Литература

1. Красовский, Н.Н. Игровые задачи о встрече движений / Н.Н. Красовский. – М.: Наука, 1970. – 420 с.
2. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. – М.: Наука, 1974. – 456 с.
3. Субботин, А.И. Оптимизация гарантии в задачах управления / А.И. Субботин, А.Г. Ченцов. – М.: Наука, 1981. – 278 с.
4. Красовский, Н.Н. Управление динамической системой / Н.Н. Красовский. – М.: Наука, 1985. – 520 с.
5. Осипов, Ю.С. Дифференциальные игры систем с последствием / Ю.С. Осипов // ДАН СССР. – 1971. – Т. 196, № 4. – С. 779–782.
6. Осипов, Ю.С. Альтернатива в дифференциальной игре / Ю.С. Осипов // ДАН СССР. – 1971. – Т. 197, № 5. – С. 1023–1025.
7. Субботин, А.И. Экстремальные стратегии в дифференциальных играх с полной памятью / А.И. Субботин // ДАН СССР. – 1972. – Т. 206, № 3. – С. 211–213.
8. Гороховик, В.В. О линейных дифференциальных играх нескольких лиц / В.В. Гороховик, Ф.М. Кириллова // Управляемые системы: сб. науч. тр. – Новосибирск, 1971. – Вып. 10. – С. 3–9.
9. Пасиков, В.Л. Экстремальные стратегии в игровых задачах для линейных интегро-дифференциальных систем Вольтерра, I / В.Л. Пасиков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – Вып. 6. – № 11(270). – С. 33–42.
10. Краснов, М.Л. Интегральные уравнения. Задачи и упражнения / М.Л. Краснов, А.И. Киселев, Г.И. Макаренко. – М.: Наука, 1975. – 216 с.
11. Винокуров, В.Р. Некоторые вопросы теории устойчивости систем интегральных уравнений Вольтера, I / В.Р. Винокуров // Известия высших учебных заведений. Математика. – 1969. – № 6 (85). – С. 24–34.

**EXTREME STRATEGIES IN GAME-THEORY PROBLEMS
FOR LINEAR INTEGRAL DIFFERENTIAL VOLTERRA SYSTEMS, II****V.L. Pasikov¹**

The problems of guidance as well as game situation of m individuals in case of composed functions balance (a distance) in terms of Nash theory are studied. To solve these problems a familiar extreme construction by an academician N.N. Krasovskiy, modified for the considered situations, is used.

Keywords: game-theory problem, integral differential system, control action, game positions, program maximin, balance in terms of Nash theory.

References

1. Krasovskii N.N. *Igrovye zadachi o vstreche dvizhenii* (Motion game problems). Moscow: Nauka, 1970. 420 p. (in Russ.).
2. Krasovskii N.N., Subbotin A.I. *Pozitsionnye differentsial'nye igry* (Position differential games). Moscow: Nauka, 1974. 456 p. (in Russ.).
3. Subbotin A.I., Chentsov A.G. *Optimizatsiia garantii v zadachakh upravleniia* (Guarantee optimization in control problems). Moscow: Nauka, 1981. 287 p. (in Russ.).
4. Krasovskii N.N. *Upravlenie dinamicheskoi sistemoi* (Dynamic system control). Moscow: Nauka, 1985. 518 p. (in Russ.).
5. Osipov Yu.S. *DAN SSSR*. 1971. Vol. 196, no. 4. pp. 779–782. (in Russ.).
6. Osipov Yu.S. *DAN SSSR*. 1971. Vol. 197, no. 5. pp. 1023–1025. (in Russ.).
7. Subbotin A.I. *DAN SSSR*. 1972. Vol. 206, no. 3. pp. 211–213. (in Russ.).
8. Gorokhovik V.V., Kirillova F.M. O lineinykh differentsialnykh igrakh neskolkikh lits [Linear differential games of several individuals]. *Upravlyaemye sistemy: sb. nauch. tr.* [Controllable systems: Proceedings]. Novosibirsk, 1971. Issue 10. pp. 3–9. (in Russ.).
9. Pasikov V.L. Ekstremalnye strategii v igrovyykh zadachakh dlya lineinykh integro-differentsialnykh sistem Volterra, I [Extreme strategies in game-theory problems for linear integral differential Volterra systems, I]. *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2012. Issue 6. no. 11(270). pp. 33–42. (in Russ.).
10. Krasnov M.L., Kiselev A.I., Makarenko G.I. *Integral'nye uravneniia. Zadachi i uprazhneniya* (Integral equations. Tasks and exercises). Moscow: Nauka, 1976. 216 p. (in Russ.).
11. Vinokurov V.R. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenij. Matematika*. 1969. no. 6(85). pp. 24–34. (in Russ.).

Поступила в редакцию 15 апреля 2012 г.

¹ Pasikov Vladimir Leonidovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Mathematical Analysis and Information Service, Orsk Humanist and Technological Institute (Branch of Orenburg State University).
E-mail: pasikov_fmf@mail.ru

ОДИН ИЗ СЛУЧАЕВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ МАРКУШЕВИЧА В ЗАМКНУТОЙ ФОРМЕ

А.А. Патрушев¹, Е.В. Патрушева²

Предложен метод явного решения краевой задачи Маркушевича в классе кусочно-аналитических функций. Краевое условие задано на единичной окружности. Получено решение в замкнутой форме при некотором ограничении, наложенном на коэффициент $b(t)$ задачи.

Ключевые слова: краевые задачи для аналитических функций, краевая задача Римана, краевая задача Гильберта, краевая задача Маркушевича.

В предложенной работе получил дальнейшее развитие метод нахождения решения задачи Маркушевича в явном виде, разработанный в статье [1]. Этот метод отличается от рассмотренного в статьях [2–4], что обусловлено различными постановками задачи.

Рассмотрим трехэлементную задачу Маркушевича

$$\psi_+(t) = a(t)\psi_-(t) + b(t)\overline{\psi_+(t)} + f(t) \quad (1)$$

на единичной окружности L . Здесь $a(t), b(t), f(t) \in H(L)$ – гельдеровские функции, $a(t) \neq 0$, $t \in L$. Пусть $\kappa = \text{Ind}_L a(t)$, $a(t) = a_+(t)t^\kappa a_-(t)$ – факторизация коэффициента $a(t)$ по формулам Гахова. Перепишем краевое условие (1) в виде

$$\phi_+(t) = t^\kappa \phi_-(t) + b_1(t)\overline{\phi_+(t)} + f_0(t), \quad (2)$$

где $\phi_\pm(t) = \frac{\psi_\pm(t)}{a_\pm(t)}$, $b_1(t) = b(t)\frac{\overline{a_+(t)}}{a_+(t)}$, $f_0(t) = \frac{f(t)}{a_+(t)}$.

Наложим следующие ограничения на коэффициент $b_1(t)$ задачи (2):

а) $b_1(t) + 1 \neq 0, t \in L$;

б) $b_1(t) + 1$ является краевым значением аналитической и отличной от нуля всюду в области D_- функции, за исключением, быть может, бесконечно удаленной точки, в которой она имеет конечный порядок κ_1 .

Тогда краевое условие (2) можно записать следующим образом:

$$\phi_+(t) = \frac{t^\kappa}{b_1(t) + 1} \phi_-(t) + \frac{2b_1(t)}{b_1(t) + 1} \text{Re} \phi_+(t) + f_1(t), \quad (3)$$

где $f_1(t) = \frac{f(t)}{a_+(t)(b_1(t) + 1)}$.

Рассмотрим соотношение (3) как неоднородную задачу Римана, считая $\text{Re} \phi_+(t)$ известной.

Пусть $\kappa_0 = \text{Ind}_L \frac{t^\kappa}{b_1(t) + 1} = \kappa - \kappa_1$, $\kappa_1 = \text{Ind}_L (b_1(t) + 1)$.

Если $\kappa_0 \geq 0$, то общее решение задачи (3) будет иметь вид [5]

$$\phi(z) = \chi(z)[F(z) + P_{\kappa_0-1}(z)]. \quad (4)$$

Здесь $F(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \left[\frac{2b_1(\tau) \text{Re} \phi_+(\tau)}{(b_1(\tau) + 1)} + f_1(\tau) \right] \frac{d\tau}{\tau - z}$, $P_{\kappa_0-1}(z)$ – произвольный многочлен степени не выше $\kappa_0 - 1$,

¹ Патрушев Алексей Алексеевич – доцент, кафедра общей математики, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: patraleksej@yandex.ru

² Патрушева Елена Васильевна – доцент, кафедра прикладной математики, Южно-Уральский государственный университет

$$\chi(z) = \begin{cases} 1, & z \in D_+, \\ \frac{b_1(z)+1}{z^{\kappa}}, & z \in D_- \end{cases}$$

– каноническая функция.

Если $\kappa_0 < 0$, то условия разрешимости задачи Римана запишутся следующим образом:

$$\int_L \left[\frac{2b_1(\tau) \operatorname{Re} \phi_+(\tau)}{(b_1(\tau)+1)} \right] \tau^{k-1} d\tau - \int_L f_1(\tau) \tau^{k-1} d\tau = 0, \quad k = 1, \dots, -\kappa_0. \quad (5)$$

Сравним на контуре L краевое значение функции $\phi_+(z)$, аналитической в области D_+ , решения задачи Римана (3), с краевым значением $\phi_+(z)$, которое является решением задачи Шварца для этой области. Приходим к вырожденному сингулярному интегральному уравнению

относительно неизвестной функции $\frac{2 \operatorname{Re} \phi_+(t)}{b_1(t)+1} - f_1(t)$:

$$\frac{1}{2} \left[\frac{2 \operatorname{Re} \phi_+(t)}{(b_1(t)+1)} - f_1(t) \right] + \frac{1}{2\pi i} \int_L \left[\frac{2 \operatorname{Re} \phi_+(\tau)}{(b_1(\tau)+1)} - f_1(\tau) \right] \frac{d\tau}{\tau - t} = d + P_{\kappa_0-1}(t). \quad (6)$$

Здесь $d = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{\operatorname{Re} \phi_+(\tau)}{\tau} d\tau - c_0$, где c_0 – произвольная мнимая постоянная.

Постоянная d должна удовлетворять условию

$$\frac{1}{2\pi i} \int_L \left[\frac{2 \operatorname{Re} \phi_+(\tau)}{b_1(\tau)+1} - f_1(\tau) \right] \frac{d\tau}{\tau} = d + a_0,$$

где $a_0 = P_{\kappa_0-1}(0)$ – произвольная постоянная. Если $\kappa_0 \leq 0$, то $a_0 = 0$.

Решение сингулярного интегрального уравнения (6) запишется в виде [6]

$$\frac{2 \operatorname{Re} \phi_+(t)}{b_1(t)+1} - f_1(t) = d + P_{\kappa_0-1}(t) - \varphi_1^-(t),$$

где $\varphi_1^-(t)$ – произвольная аналитическая в области D_- функция, исчезающая на бесконечности.

Тогда

$$\operatorname{Re} \phi_+(t) = \frac{1}{2} (b_1(t)+1) [d + P_{\kappa_0-1}(t) - \varphi_1^-(t)] + \frac{f(t)}{2a_+(t)} \quad (7)$$

так как $f_1(t) = \frac{f(t)}{a_+(t)(b_1(t)+1)}$. Учитывая, что правая часть соотношения (7) – функция действительная,

приходим к неоднородной задаче Гильберта

$$\operatorname{Re}[-i(b_1(t)+1)\varphi_1^-(t)] = \operatorname{Im} \left\{ (b_1(t)+1)[d + P_{\kappa_0-1}(t)] + \frac{f(t)}{a_+(t)} \right\}, \quad (8)$$

в классе функций, исчезающих на бесконечности.

Общее решение задачи (8) задается формулой [7]

$$-i\varphi_1^-(z) = \frac{1}{b_1(z)+1} \left[F_0(z) + F_1(z) + Q_{\kappa_1-1}(z) + \overline{Q_{\kappa_1-1}(z^*)} \right]. \quad (9)$$

Здесь $F_0(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{c(\tau)(\tau+z)}{(\tau-z)\tau} d\tau$, $F_1(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \operatorname{Im} \left\{ \frac{f(t)}{a_+(t)} \right\} \frac{\tau+z}{(\tau-z)\tau} d\tau$, $Q_{\kappa_1-1}(z)$ – произвольный

многочлен степени $\kappa_1 - 1$, $c(t) = \operatorname{Im} \left\{ (b_1(t)+1)[d + P_{\kappa_0-1}(t)] \right\}$.

Если $\kappa_1 \leq 0$, то полагаем $Q_{\kappa_1-1}(z) \equiv 0$. Тогда функция

$$\frac{1}{2\pi i (b_1(z)+1)} \left[\int_L \frac{c(\tau)(\tau+z)}{(\tau-z)\tau} d\tau + \int_L \operatorname{Im} \left\{ \frac{f(t)}{a_+(t)} \right\} \frac{\tau+z}{(\tau-z)\tau} d\tau \right] \quad (10)$$

будет исчезающим на бесконечности решением задачи (8) тогда и только тогда, когда выполняются условия разрешимости

$$\int_L \frac{c(\tau)}{\tau^{k+1}} d\tau = \alpha_k, \quad \alpha_k = - \int_L \operatorname{Im} \left\{ \frac{f(t)}{a_+(t)} \right\} \frac{d\tau}{\tau^{k+1}}, \quad k = 0, \dots, -\kappa_1. \quad (11)$$

На основании формул (7), (9) мы можем теперь выписать в явном виде выражение для $\operatorname{Re} \phi_+(t)$, а также общее решение $\phi(z)$ задачи Римана (3). Тогда общее решение неоднородной задачи Маркушевича для единичной окружности определится формулой

$$\psi(z) = \begin{cases} a_+(z) \left[\frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{g(\tau)}{\tau - z} d\tau + G(z) + P_{\kappa_0-1}(z) \right], & z \in D_+, \\ \frac{a_-(z)(b_1(z)+1)}{z^\kappa} \left[\frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{g(\tau)}{\tau - z} d\tau + G(z) + P_{\kappa_0-1}(z) \right], & z \in D_-. \end{cases} \quad (12)$$

Здесь
$$g(t) = b_1(t) \left[d + P_{\kappa_0-1}(t) \right] - \frac{ib_1(t)}{b_1(t)+1} \left[F_0^-(t) + Q_{\kappa_1-1}(t) + \overline{Q_{\kappa_1-1}(t)} \right], \quad G(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{g_1(\tau)}{\tau - z} d\tau,$$

$$g_1(t) = \frac{b_1(t)}{b_1(t)+1} \left[\frac{f(t)}{a_+(t)} - iF_1^-(t) \right].$$

Если $f(t) \equiv 0$, то мы имеем однородную задачу Маркушевича. В этом случае $G(z) \equiv 0$.

В итоге были получены следующие результаты.

Теорема 1. Пусть коэффициенты однородной задачи Маркушевича (1) ($f(t) \equiv 0$) $a(t), b(t) \in H(L)$, $a(t) \neq 0$, $t \in L$, $\kappa = \operatorname{Ind}_L a(t)$, а также функция $b_1(t)+1$ является краевым значением на контуре L , аналитической и отличной от нуля всюду в области $D_- \cup L$, за исключением, быть может, бесконечно удаленной точки, в которой она может иметь конечный порядок κ_1 , $\kappa_0 = \kappa - \kappa_1$.

Тогда однородная задача (1) ($f(t) \equiv 0$) в классе кусочно-аналитических функций, исчезающих на бесконечности,

1) при $\kappa_1 > 0$, $\kappa_0 \geq 0$ имеет общее решение, определяемое формулой (12) ($G(z) \equiv 0$), которое линейно зависит от $2\kappa_0 + 2\kappa_1 = 2\kappa$ произвольных вещественных постоянных;

2) при $\kappa_1 > 0$, $\kappa_0 < 0$ общее решение задается формулой (12) ($G(z) \equiv 0$), ($P_{\kappa_0-1}(z) \equiv 0$), которое содержит $2\kappa_1 - r_1$ произвольных вещественных постоянных, r_1 — ранг матрицы коэффициентов однородной системы (5) (если $r_1 = 2\kappa_1$, то задача имеет только тривиальное решение);

3) при $\kappa_1 \leq 0$, $\kappa_0 \geq 0$ имеет общее решение, определяемое формулой (12) ($G(z) \equiv 0$, $Q_{\kappa_1-1}(z) \equiv 0$), которое содержит $2\kappa_0 - r$ произвольных вещественных постоянных, r — ранг матрицы коэффициентов однородной системы (11) (если $r = 2\kappa_0$, то задача, отличного от тривиального, решения не имеет);

4) при $\kappa_1 \leq 0$, $\kappa_0 < 0$, если функция $b_1(t)+1$ удовлетворяет условиям (11) ($f(t) \equiv 0$) и условиям (5) ($f(t) \equiv 0$), имеет одномерное пространство решений, определяемое формулой (12) ($G(z) \equiv 0$, $Q_{\kappa_1-1}(z) \equiv 0$, $P_{\kappa_0-1}(z) \equiv 0$); в противном случае имеет только тривиальное решение.

Теорема 2. Пусть коэффициенты неоднородной задачи Маркушевича $a(t), b(t) \in H(L)$, функция $f(t) \in H(L)$, $a(t) \neq 0$, $t \in L$, а также функция $b_1(t)+1$ является краевым значением на контуре L функции, аналитической и отличной от нуля всюду в области $D_- \cup L$, за исключением бесконечно удаленной точки, в которой она имеет конечный порядок.

Тогда неоднородная задача в классе кусочно-аналитических функций, исчезающих на бесконечности:

1) при $\kappa_1 > 0$, $\kappa_0 \geq 0$ имеет общее решение, определяемое формулой (12), которое линейно зависит от 2κ произвольных вещественных постоянных;

2) при $\kappa_1 > 0$, $\kappa_0 < 0$ общее решение задается формулой (12) ($P_{\kappa_0-1}(z) \equiv 0$), если выполняются $-\kappa_0 - r_1$ условий разрешимости, выписанных явно (r_1 – ранг матрицы коэффициентов системы (5)), которое содержит $2\kappa_1 - 2r_1$ произвольных вещественных постоянных (если $r_1 = \kappa_1$, решение будет единственным);

3) при $\kappa_1 \leq 0$, $\kappa_0 \geq 0$ имеет общее решение, определяемое формулой (12) ($Q_{\kappa_1-1}(z) \equiv 0$), если выполняются $-\kappa_1 + 1 - r$ условий разрешимости, выписанных явно (r – ранг матрицы коэффициентов системы (11)), которое линейно зависит от $2\kappa_0 - 2r$ произвольных вещественных постоянных (при $r = \kappa_0$ решение будет единственным);

4) при $\kappa_1 \leq 0$, $\kappa_0 < 0$ имеет единственное решение, определяемое формулой (12) ($Q_{\kappa_1-1}(z) \equiv 0$, $P_{\kappa_0-1}(z) \equiv 0$), тогда и только тогда, когда выполняются $-\kappa_1 + 1$ условий разрешимости (11) и $-\kappa_0$ условий разрешимости (5).

Пример к теореме 1. Рассмотрим трехэлементную задачу Маркушевича на единичной окружности L :

$$\psi_+(t) = (2t+1)^2 \psi_-(t) + (3t+1) \overline{\psi_+(t)}, t \in L. \quad (13)$$

Решение ищем в классе кусочно-аналитических функций, исчезающих на бесконечности.

Запишем краевое условие (13) в виде

$$\psi_+(t) = \frac{(2t+1)^2}{3t+2} \psi_-(t) + \frac{2(3t+1)}{3t+2} \operatorname{Re} \psi_+(t). \quad (14)$$

В нашем случае $\kappa = \operatorname{Ind}_L (2t+1)^2 = 2$, $\kappa_1 = \operatorname{Ind}_L (3t+2) = 1$, $\kappa_0 = \operatorname{Ind}_L \frac{(2t+1)^2}{3t+2} = 1$. Очевидно, функ-

ция $\frac{(2t+1)^2}{3t+2}$ является краевым значением функции на контуре L , мероморфной в области D_- .

Следовательно, на основании формул Сохоцкого, на контуре L имеем:

$$\psi_+(t) = \frac{3t+1}{3t+2} \operatorname{Re} \psi_+(t) + \frac{1}{\pi i} \int_L \frac{(3\tau+1) \operatorname{Re} \psi_+(\tau) d\tau}{(3\tau+2)(\tau-t)} + \alpha, \quad (15)$$

где α – произвольное комплексное число.

С другой стороны,

$$\psi_+(t) = \operatorname{Re} \psi_+(t) + \frac{1}{\pi i} \int_L \frac{\operatorname{Re} \psi_+(\tau) d\tau}{\tau-t} - \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{\operatorname{Re} \psi_+(\tau) d\tau}{\tau} + c_0, \quad (16)$$

c_0 – произвольная мнимая постоянная. На основании соотношений (15), (16) приходим к вырожденному сингулярному интегральному уравнению

$$\frac{\operatorname{Re} \psi_+(t)}{3t+2} + \frac{1}{\pi i} \int_L \frac{\operatorname{Re} \psi_+(\tau) d\tau}{(3\tau+2)(\tau-t)} = 2d, d = \frac{1}{2} \left[\alpha + c_0 + \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{\operatorname{Re} \psi_+(\tau) d\tau}{\tau} \right]. \quad (17)$$

Решением уравнения (17) является функция

$$\operatorname{Re} \psi_+(t) = (3t+2)(d - \varphi^-(t)), \quad (18)$$

где $\varphi^-(z)$ – произвольная аналитическая в области D_- функция, исчезающая на бесконечности. Так как левая часть выражения (18) – функция действительная, то приходим к однородной задаче Гильберта:

$$\operatorname{Im} \left[(3t+2) \Psi^-(t) \right] = 0, \quad (19)$$

где $\Psi^-(t) = d - \varphi^-(t)$ – краевое значение функции, аналитической в области D_- , $\Psi^-(\infty) = d$. Запишем краевое условие (19) иначе:

$$(3t+2) \Psi^-(t) - \left(\frac{3}{t} + 2 \right) \overline{\Psi^-(t)} = 0,$$

или

$$\Psi_1^+(t) = \frac{(3t+2)t}{3+2t} \Psi_1^-(t), \quad \Psi_1(z) = \begin{cases} \overline{\Psi_1^-(z^*)}, & |z| < 1, \\ \Psi_1^-(z), & |z| > 1. \end{cases} \quad (20)$$

Функция

$$\chi_1(z) = \begin{cases} \frac{z}{3+2z}, & |z| < 1, \\ \frac{1}{3z+2}, & |z| > 1, \end{cases}$$

очевидно, удовлетворяет условию симметрии $\overline{\chi_1(z^*)} = \chi_1(z)$ и является канонической симметричной функцией задачи (20). Следовательно, имеем:

$$\Psi^-(z) = \frac{1}{3z+2} (2\alpha_0 + \alpha_1(z+z^{-1}) + \alpha_2 i(z-z^{-1})),$$

где $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2 \in R$.

Тогда на основании соотношения (18)

$$\operatorname{Re} \psi_+(t) = 2\alpha_0 + \alpha_1(t+t^{-1}) + \alpha_2 i(t-t^{-1}).$$

Заметим здесь, что, так как $\Psi^-(\infty) = \frac{\alpha_1 + i\alpha_2}{3}$, то $\frac{\alpha_1 + i\alpha_2}{3} = \frac{1}{2}(\alpha + c_0 + 2\alpha_0)$, где

$$2\alpha_0 = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{(2\alpha_0 + \alpha_1(\tau + \tau^{-1}) + \alpha_2 i(\tau - \tau^{-1})) d\tau}{\tau} = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{\operatorname{Re} \psi_+(\tau) d\tau}{\tau}.$$

Откуда решением однородной задачи Маркушевича (13) является функция

$$\psi(z) = \begin{cases} 2\alpha_0 + 2(\alpha_1 + i\alpha_2)z - c_0, & |z| < 1, \\ \frac{3z+2}{(2z+1)^2} \left(\frac{4\alpha_0}{3z+2} - \frac{11(\alpha_1 + i\alpha_2)}{3z+2} - \frac{\alpha_1 - i\alpha_2}{z} + \frac{2(\alpha_1 + i\alpha_2)}{3} - c_0 - 2\alpha_0 \right), & |z| > 1. \end{cases}$$

где $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, ic_0 \in R$.

Литература

1. Патрушев, А.А. Задача Маркушевича в классе автоморфных функций в случае произвольной окружности / А.А. Патрушев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – Вып. 4. – № 10(227). – С. 29–37.
2. Патрушев, А.А. Алгоритм точного решения четырехэлементной задачи линейного сопряжения с рациональными коэффициентами и его программная реализация / А.А. Патрушев, В.М. Адуков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2010. – Вып. 6. – № 35(211). – С. 4–12.
3. Патрушев, А.А. Четырехэлементная задача Маркушевича на единичной окружности / А.А. Патрушев // Известия Смоленского государственного университета. – 2010. – № 4. – С. 82–97.
4. Патрушев, А.А. О точном и явном решении трехэлементной задачи Маркушевича / А.А. Патрушев, В.М. Адуков // Известия Саратовского государственного университета. Новая серия. Серия Математика. Механика. Информатика. – 2011. – Т. 11. – Вып. 2. – С. 4–12.
5. Гахов, Ф.Д. Краевые задачи / Ф.Д. Гахов. – М.: Физматгиз, 1963. – 640 с.
6. Гахов, Ф.Д. Вырожденные случаи особых интегральных уравнений с ядром Коши / Ф.Д. Гахов // Дифференциальные уравнения. – 1966. – Т. 2, № 2. – С. 533–544.
7. Чибрикова, Л.И. Основные граничные задачи для аналитических функций / Л.И. Чибрикова. – Казань: Изд-во Казанского ун-та, 1977. – 301 с.

A.A. Patrushev¹, E.V. Patrusheva²

In the article an explicit method for the solution of Markushevich boundary value problem in the class of piecewise analytic functions is suggested. Boundary condition of the problem is given on the unit circle. The problem is found in a closed form under additional restriction on the coefficient $b(t)$ of the problem.

Keywords: boundary problems for analytic functions, Riemann boundary problem, Hilbert boundary problem, Markushevich boundary problem.

References

1. Patrushev A.A. Zadacha Markushevicha v klasse avtomorfnykh funkciij v sluchae proizvolnoj okruzhnosti [The Markushevich problem in the class of automorphic functions for arbitrary circle]. *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematika. Mexanika. Fizika"*. 2011. Issue 4. no. 10(227). pp. 29–37. (in Russ.).
2. Adukov V.M., Patrushev A.A. Algoritm tochnogo resheniya chetyrekhlementnoj zadachi linejnogo sopryazheniya s racionalnymi koefficientami i ego programmaya realizaciya [Algorithm of exact solution of generalized four-element Riemann–Hilbert boundary problem with rational coefficients and its programm realization]. *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematicheskoe modelirovanie i programmirovaniye"*. 2010. Issue 6. no. 35(211). pp. 4–12. (in Russ.).
3. Patrushev A.A. *Izvestiya Smolenskogo gosudarstvennogo universiteta*. 2010. no. 4. pp. 82–98. (in Russ.).
4. Adukov V.M., Patrushev A.A. *Izvestiya Saratovskogo gosudarstvennogo universiteta. Novaya seriya. Seriya Matematika. Mekhanika. Informatika*. 2011. Vol. 11. Issue 2. pp. 4–12. (in Russ.).
5. Gaxov F.D. *Kraevye zadachi* (Boundary problems). Moscow: Fizmatgiz, 1963. 640 p. (in Russ.).
6. Gaxov F.D. *Differencialnye uravneniya*. 1966. Vol. 2, no. 2. pp. 533–544.
7. Chibrikova L.I. *Osnovnye granichnye zadachi dlya analiticheskikh funkciij* [Basic boundary problems for analytic functions]. Kazan: Izdatelstvo Kazanskogo universiteta, 1977. 301 p. (in Russ.).

Поступила в редакцию 18 декабря 2012 г.

¹ Patrushev Alexey Alexeevich is Associate Professor, Department of General Mathematics, South Ural State University.
E-mail: patraleksej@yandex.ru

² Patrusheva Elena Vasilievna is Associate Professor, Applied Mathematics Department, South Ural State University.

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОГО ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ С ГИПЕРБОЛИЧЕСКИМ ОПЕРАТОРОМ ВЫСОКОЙ СТЕПЕНИ

Т.К. Юлдашев¹

Предлагается методика изучения обратной задачи для нелинейных уравнений с гиперболическим оператором произвольной натуральной степени. Доказывается теорема о существовании и единственности решения данной задачи.

Ключевые слова: обратная задача, нелинейное уравнение, гиперболический оператор высокой степени, метод характеристик, существование и единственность решения.

1. Постановка задачи

Представляют большой интерес с точки зрения физических приложений обратные задачи для дифференциальных уравнений в частных производных высоких порядков. Изучение многих задач газовой динамики, теории упругости, теории пластин и оболочек приводит к рассмотрению дифференциальных уравнений в частных производных высоких порядков.

Выражение уравнений в частных производных высокого порядка через суперпозицию дифференциальных операторов в частных производных первого порядка позволяет применять методов решения дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка. Локальная теория дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка, основанная на понятиях производной по направлению и характеристик, началась сформироваться еще в XVIII веке. Характеристики замечательны тем, что дифференциальные выражения в левой части уравнений в частных производных первого порядка представляют собой производную неизвестной функции по направлению вдоль характеристики. Это позволяет, перейдя к новой переменной, представить уравнение в частных производных как обыкновенное дифференциальное уравнение, описывающее изменение неизвестной функции вдоль линии характеристик.

В области $D \equiv D_T \times R$ рассматривается нелинейное уравнение вида

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right)^n u(t, x) = f \left(t, x, \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(s, y) u(s, y) dy ds, \vartheta(t) \right) \quad (1)$$

с начальными условиями

$$u(t, x)|_{t=0} = \varphi_1(x), \quad \frac{\partial^i}{\partial t^i} u(t, x)|_{t=0} = \varphi_{i+1}(x), \quad x \in R, \quad i = \overline{1, 2n-1} \quad (2)$$

и дополнительными условиями

$$u(t, x)|_{x=x_0} = \psi(t), \quad t \in D_T, \quad (3)$$

$$\vartheta(t)|_{t=0} = \varphi_0 = \text{const}, \quad (4)$$

где $u(t, x)$ и $\vartheta(t)$ – неизвестные функции, $f(t, x, u, \vartheta) \in C(D \times R \times D_I)$, $\varphi_i(x) \in C(R)$,

$i = \overline{1, 2n}$, $\psi(t) \in C(D_I)$, $0 < \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(s, y) dy ds$, $D_T \equiv [0, T]$, $0 < T < \infty$, n – произвольное натуральное число.

Отметим, что дифференциальные уравнения в частных производных первого порядка локально решаются методами теории обыкновенных дифференциальных уравнений при помощи сведения их к характеристической системе. С физической точки зрения это означает двойствен-

¹ Юлдашев Турсун Камалдинович – кандидат физико-математических наук, доцент, докторант, кафедра высшей математики, Сибирский государственный аэрокосмический университет, г. Красноярск

E-mail: tursunbay@rambler.ru

ность описания явлений при помощи волн и при помощи частиц. Применение метода характеристик к решению дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка позволяет свести изучение эволюции волн к изучению распространения частиц [1]. В работах [2–4] разработана методика для интегрирования нелинейных уравнений в частных производных первого порядка. По сути, данная методика ближе к методу характеристик и её авторы называли методом дополнительного аргумента.

В настоящей работе изучается обратная задача, где восстанавливаемая функция $\vartheta(t)$ нелинейно входит в уравнение. При решении обратной задачи (1)–(4) относительно восстанавливаемой функции получается нелинейное интегральное уравнение Вольтерра первого рода, которое с помощью неклассического интегрального преобразования сводится к нелинейному интегральному уравнению второго рода. Задание условия (4) при преобразовании обеспечивает единственность решения нелинейного интегрального уравнения первого рода и определяет значение неизвестной функции в начальной точке $t = 0$, т.е. $\vartheta(0) = \varphi_0$. Обратные задачи для нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных ранее рассматривались в работах [5, 6].

Определение. Решением обратной задачи (1)–(4) называется пара непрерывных функций $\{u(t, x) \in C^{2n, 2n}(D), \vartheta(t) \in C(D_T)\}$, удовлетворяющая уравнению (1) и условиям (2)–(4).

2. Задача Коши (1),(2)

Левую часть уравнения (1) запишем в виде

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)^n u = \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\right)^n u = L_1^n [L_2^n [u]],$$

где $L_1 [L_2^n [u]] \equiv (L_2^n [u])_t - (L_2^n [u])_x$, $L_2 [u] \equiv u_t + u_x$.

Тогда уравнение (1) приобретает вид

$$L_1^n [L_2^n [u]] = f \left(t, x, \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} K(s, y) u(s, y) dy ds, \vartheta(t) \right). \quad (5)$$

Из (5) видно, что уравнение (1) имеет две n -кратные характеристики: 1) $x - t = C_1$; 2) $x + t = C_2$, где C_1, C_2 – произвольные постоянные. Тогда, интегрируя уравнения (5) n раз вдоль линии второй характеристики, получаем

$$L_1^{n-1} [L_2^n [u]] = \Phi_1(x+t) + \int_0^t f \left(s, x, \int_0^s \int_{-\infty}^{\infty} K(\theta, y) u(\theta, y) dy d\theta, \vartheta(s) \right) ds, \quad (6)$$

$$L_1^{n-2} [L_2^n [u]] = \Phi_2(x+t) + \Phi_1(x+t)t + \int_0^t (t-s) f \left(s, x, \int_0^s \int_{-\infty}^{\infty} K(\theta, y) u(\theta, y) dy d\theta, \vartheta(s) \right) ds, \quad (7)$$

.....

$$L_2^n [u] = \sum_{i=1}^n \Phi_i(x+t) \frac{t^{n-i}}{(n-i)!} + \int_0^t \frac{(t-s)^{n-1}}{(n-1)!} f \left(s, x, \int_0^s \int_{-\infty}^{\infty} K(\theta, y) u(\theta, y) dy d\theta, \vartheta(s) \right) ds, \quad (8)$$

где $\Phi_i (i = \overline{1, n})$ – произвольные непрерывные функции на действительной оси, которые подлежат определению.

Из (6), в силу начального условия (2), имеем $\Phi_1(x) = \varphi_{2n}$. Так как вдоль линии второй характеристики

$$\begin{aligned} \frac{dL_2^n [u]}{dt} &= \frac{\partial L_2^n [u]}{\partial t} + \frac{\partial L_2^n [u]}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} = (L_2^n [u])_t - (L_2^n [u])_x, \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{d^n L_2^n [u]}{dt^n} &= \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \right)^n L_2^n [u], \end{aligned} \quad (9)$$

то, в силу условия (2) из (7), (8) имеем

$$\Phi_2(x) = \varphi_{2n-1}(x), \dots, \Phi_n(x) = \varphi_{n+1}(x).$$

Тогда уравнение (8) приобретает следующий вид:

$$L_2^n[u] = \sum_{i=1}^n \varphi_{n+i}(x+t) \frac{t^{i-1}}{(i-1)!} + \int_0^t \frac{(t-s)^{n-1}}{(n-1)!} f\left(s, x, \int_{-\infty}^T K(\theta, y) u(\theta, y) dy d\theta, \vartheta(s)\right) ds, \quad (10)$$

где x – играет роль параметра.

Аналогично, интегрируя интегро-дифференциального уравнения (10) n раз вдоль линии первой характеристики, получаем

$$L_2^{n-1}[u] = \Phi_{n+1}(x-t) + \sum_{j=1}^n \int_0^t \varphi_{n+j}(x+s) \frac{s^{j-1}}{(j-1)!} ds + \\ + \int_0^t \frac{(t-s)^n}{n!} f\left(s, x, \int_{-\infty}^T K(\theta, y) u(\theta, y) dy d\theta, \vartheta(s)\right) ds, \quad (11)$$

$$L_2^{n-2}[u] = \Phi_{n+2}(x-t) + \Phi_{n+1}(x-t)t + \sum_{j=1}^n \int_0^t (t-s) \varphi_{n+j}(x+s) \frac{s^{j-1}}{(j-1)!} ds + \\ + \int_0^t \frac{(t-s)^{n+1}}{(n+1)!} f\left(s, x, \int_{-\infty}^T K(\theta, y) u(\theta, y) dy d\theta, \vartheta(s)\right) ds, \quad (12)$$

$$\dots \dots \dots \\ u(t, x) = \sum_{i=n+1}^{2n} \Phi_i(x-t) \frac{t^{2n-i}}{(2n-i)!} + \sum_{j=1}^n \int_0^t \frac{(t-s)^{n-1}}{(n-1)!} \varphi_{n+j}(x+t) \frac{s^{j-1}}{(j-1)!} ds + \\ + \int_0^t \frac{(t-s)^{2n-1}}{(2n-1)!} f\left(s, x, \int_{-\infty}^T K(\theta, y) u(\theta, y) dy d\theta, \vartheta(s)\right) ds, \quad (13)$$

где $\Phi_i (i = \overline{n+1, 2n})$ – произвольные непрерывные функции на действительной оси, которые подлежат определению.

Из (11) в силу начального условия (2) имеем $\Phi_{n+1}(x) = \varphi_n$. Так как вдоль линии второй характеристики справедливо (9) и вдоль линии первой характеристики

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} = u_t + u_x, \dots, \frac{d^n u}{dt^n} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right)^n u, \quad (14)$$

то в силу (2) из (12) и (13) следует, что

$$\Phi_{n+2}(x) = \varphi_{n-1}(x), \dots, \Phi_{2n}(x) = \varphi_1(x).$$

Итак, из задачи Коши (1), (2) мы пришли к следующему нелинейному интегральному уравнению:

$$u(t, x) \equiv \Theta_1(t, x; u, \vartheta) = \sum_{i=1}^n \varphi_i(x-t) \frac{t^{i-1}}{(i-1)!} + \sum_{j=1}^n \int_0^t \frac{(t-s)^{n-1}}{(n-1)!} \varphi_{n+j}(x+t) \frac{s^{j-1}}{(j-1)!} ds + \\ + \int_0^t \frac{(t-s)^{2n-1}}{(2n-1)!} f\left(s, x, \int_{-\infty}^T K(\theta, y) u(\theta, y) dy d\theta, \vartheta(s)\right) ds, \quad (15)$$

где x – играет роль параметра.

В (15) отметим, что функции $\varphi_1(x-t), \varphi_2(x-t), \dots, \varphi_n(x-t)$ являются первыми интегралами уравнения $\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right)^n u = 0$ и они постоянны вдоль решения этого уравнения. Производные этих функций вдоль первой характеристики равны нулю и сами эти функции удовлетворяют данному уравнению.

А функции $\varphi_{n+1}(x+t), \varphi_{n+2}(x+t), \dots, \varphi_{2n}(x+t)$ являются первыми интегралами уравнения $\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\right)^n u = 0$ и они постоянны вдоль решения этого уравнения. Вдоль второй характеристики эти функции удовлетворяют данному уравнению. Исходя из этих соображений, покажем, что интегральное уравнение (15) удовлетворяет дифференциальному уравнению в частных производных (1). Путем $2n$ -кратного дифференцирования вдоль линий соответствующих характеристик из (15) получаем следующее дифференциальное уравнение

$$\frac{d^{2n}u}{dt^{2n}} = f\left(t, x, \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(s, y)u(s, y)dyds, \vartheta(t)\right). \quad (16)$$

Так как вдоль линии второй характеристики справедливо (9) и вдоль линии первой характеристики – (14), то имеем для левой части (16)

$$\frac{d^{2n}u}{dt^{2n}} = \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\right)^n u = L_1^n [L_2^n [u]].$$

Отсюда заключаем, что из (16) следует дифференциальное уравнение в частных производных (1).

3. Уравнение для восстанавливаемой функции

Используя условие (3), из интегрального уравнения (15) получаем

$$\begin{aligned} \psi(t) = & \sum_{i=1}^n \varphi_i(x_0 - t) \frac{t^{i-1}}{(i-1)!} + \sum_{j=1}^n \int_0^t \frac{(t-s)^{n-1}}{(n-1)!} \varphi_{n+j}(x_0 + t) \frac{s^{j-1}}{(j-1)!} ds + \\ & + \int_0^t \frac{(t-s)^{2n-1}}{(2n-1)!} f\left(s, x_0, \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(\theta, y)u(\theta, y)dyd\theta, \vartheta(s)\right) ds \end{aligned}$$

или

$$\int_0^t h\left(t, s, \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(\theta, y)u(\theta, y)dyd\theta, \vartheta(s)\right) ds = g(t), \quad (17)$$

$$\text{где } g(t) = \psi(t) - \sum_{i=1}^n \varphi_i(x_0 - t) \frac{t^{i-1}}{(i-1)!} - \sum_{j=1}^n \int_0^t \frac{(t-s)^{n-1}}{(n-1)!} \varphi_{n+j}(x_0 + t) \frac{s^{j-1}}{(j-1)!} ds,$$

$$\begin{aligned} & h\left(t, s, \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(\theta, y)u(\theta, y)dyd\theta, \vartheta(s)\right) = \\ & = \frac{(t-s)^{2n-1}}{(2n-1)!} f\left(s, x_0, \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(\theta, y)u(\theta, y)dyd\theta, \vartheta(s)\right). \end{aligned}$$

Относительно восстанавливаемой функции $\vartheta(t)$ уравнение (17) является нелинейным интегральным уравнением Вольтерра первого рода. Его с помощью классических методов невозможно свести к интегральному уравнению Вольтерра второго рода, к которому мы могли бы применять метод последовательных приближений. Уравнение (17) запишем в виде

$$\vartheta(t) + \int_0^t G(s) \vartheta(s) ds = \vartheta(t) + g(t) + \int_0^t \left[G(s) \vartheta(s) - h\left(t, s, \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(\theta, y)u(\theta, y)dyd\theta, \vartheta(s)\right) \right] ds, \quad (18)$$

$0 < G(t)$ – произвольная функция такая, что $\exp\left\{-\int_0^t G(s) ds\right\} \ll 1$.

Применяя к (18) метод резольвенты ядра $[-G(s)]$, получаем

$$\vartheta(t) = h(t) - \int_0^t G(s) \exp(-\mu(t, s)) \cdot h(s) ds, \quad (19)$$

$$\text{где } h(t) = \vartheta(t) + g(t) + \int_0^t \left[G(s) \vartheta(s) - h \left(t, s, \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(\theta, y) u(\theta, y) dy d\theta, \vartheta(s) \right) \right] ds,$$

$$\mu(t, s) = \int_s^t G(\theta) d\theta, \mu(t, 0) = \mu(t).$$

Применяя к (19) формулу Дирихле, получаем

$$\begin{aligned} \vartheta(t) \equiv \Theta_2(t; u, \vartheta) = & \left\{ \vartheta(t) + g(t) + \right. \\ & + \int_0^t \left[G(s) \vartheta(s) - h \left(t, s, \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(\theta, y) u(\theta, y) dy d\theta, \vartheta(s) \right) \right] ds \Big\} \exp(-\mu(t)) + \\ & + \int_0^t G(s) \exp(-\mu(t, s)) \{ g(t) - g(s) + \vartheta(t) - \vartheta(s) + \\ & + \int_0^t \left[G(s) \vartheta(s) - h \left(t, s, \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(\theta, y) u(\theta, y) dy d\theta, \vartheta(s) \right) \right] ds - \\ & - \int_0^s \left[G(\theta) \vartheta(\theta) - h \left(s, \theta, \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta, y) u(\zeta, y) dy d\zeta, \vartheta(\theta) \right) \right] d\theta \Big\} ds. \end{aligned} \quad (20)$$

Уравнение (17) при начальном условии (4) эквивалентно уравнению (20).

4. Разрешимость обратной задачи (1)–(4)

Итак, мы получаем, что разрешимость обратной задачи (1)–(4) эквивалентна разрешимости следующей системы нелинейных интегральных уравнений:

$$\begin{cases} u(t, x) \equiv \Theta_1(t, x; u, \vartheta), \\ \vartheta(t) \equiv \Theta_2(t; u, \vartheta). \end{cases} \quad (21)$$

Для произвольной непрерывной в области D функции $h(t, x)$ норму вводим следующим образом: $\|h(t, x)\| = \max_{(t, x) \in D} |h(t, x)|$. Аналогично вводится норма для функции одной переменной в области D_T .

Теорема. Пусть выполняются следующие условия:

$$1. |\varphi_i(x)| \leq M_i, 0 < \sum_{i=1}^{2n} M_i \frac{T^{i-1}}{(i-1)!} \leq \Delta_0 < \infty;$$

$$2. f(t, x, u, \vartheta) \in Bnd(M_0(t)) \cap Lip \{L_0(t)|_u, L_1(t)|_\vartheta\};$$

$$3. 0 < \int_0^T \frac{(T-s)^{2n-1}}{(2n-1)!} M_0(s) ds \leq \Delta_1 < \infty;$$

$$4. 0 < \int_0^T \frac{(T-s)^{2n-1}}{(2n-1)!} L_0(s) ds \leq \Delta_2 < \infty;$$

$$5. 0 < \int_0^T \frac{(T-s)^{2n-1}}{(2n-1)!} L_1(s) ds \leq \Delta_3 < \infty;$$

$$6. \rho < 1, \text{ где } \rho = \max\{\beta_1; \beta_2\}, \beta_2 = \max\{\Delta_3; \Delta_3 M_0\}, \beta_1 = \max \left\{ \Delta_2; \left(1 + \int_0^T \|G(t)\| dt + \alpha \Delta_2 \right) M_0 \right\},$$

$$\alpha = \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} \|K(t, x)\| dx dt, M_0 = \max_t \left\{ \exp(-\mu(t)) + 2 \int_0^t G(s) \exp(-\mu(t, s)) ds \right\} \ll 1.$$

Тогда обратная задача (1)–(4) имеет единственное решение $\{u(t, x) \in C^{2n, 2n}(D), v(t) \in C(D_T)\}$.

Доказательство. Используем метод последовательных приближений. Рассмотрим следующий итерационный процесс:

$$\begin{cases} u_0(t, x) = 0, v_0(t, x) = 0, u_{k+1}(t, x) \equiv \Theta_1(t, x; u_k, v_k) \\ v_{k+1}(t, x) \equiv \Theta_2(t; u_k, v_k), k = 0, 1, 2, \dots \end{cases}, \quad (22)$$

Тогда в силу условий теоремы из (22) получаем, что справедливы следующие оценки:

$$\|u_1(t, x) - u_0(t, x)\| \leq \sum_{i=1}^{2n} M_i \frac{T^{i-1}}{(i-1)!} + \int_0^t \frac{(t-s)^{2n-1}}{(2n-1)!} M_0(s) ds \leq \Delta_0 + \Delta_1; \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \|u_{k+1}(t, x) - u_k(t, x)\| &\leq \int_0^t \frac{(t-s)^{2n-1}}{(2n-1)!} (L_0(s) \|u_k(s, x) - u_{k-1}(s, x)\| + \\ &+ L_1(s) \|v_k(s) - v_{k-1}(s)\|) ds \leq \Delta_2 \|u_k(t, x) - u_{k-1}(t, x)\| + \Delta_3 \|v_k(t) - v_{k-1}(t)\|; \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \|v_1(t) - v_0(t)\| &\leq \left(\|g(t)\| + \int_0^t \|h(t, s, 0, 0)\| ds \right) \exp(-\mu(t)) + \\ &+ 2 \int_0^t G(s) \exp(-\mu(t, s)) \left(\|g(t)\| + \int_0^t \|h(t, s, 0, 0)\| ds \right) ds \leq \left(\|g(t)\| + \int_0^t \|h(t, s, 0, 0)\| ds \right) M_0, \end{aligned} \quad (25)$$

$$M_0 = \max_t \left\{ \exp(-\mu(t)) + 2 \int_0^t G(s) \exp(-\mu(t, s)) ds \right\} \ll 1,$$

$$\begin{aligned} \|v_{k+1}(t) - v_k(t)\| &\leq \left\{ 1 + \int_0^t \|G(s)\| ds + \right. \\ &+ \left. \int_0^t \frac{(t-s)^{2n-1}}{(2n-1)!} L_0(s) \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} \|K(\theta, y)\| dy d\theta ds \right\} M_0 \|u_k(t, x) - u_{k-1}(t, x)\| + \\ &+ \int_0^t \frac{(t-s)^{2n-1}}{(2n-1)!} L_1(s) ds M_0 \|v_k(t) - v_{k-1}(t)\| \leq \\ &\leq \left(1 + \int_0^T \|G(t)\| dt + \alpha \Delta_2 \right) M_0 \|u_k(t, x) - u_{k-1}(t, x)\| + \Delta_3 M_0 \|v_k(t) - v_{k-1}(t)\|, \end{aligned} \quad (26)$$

где $\alpha = \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} \|K(s, y)\| dy ds$.

Примем обозначения

$$\beta_1 = \max \left\{ \Delta_2; \left(1 + \int_0^T \|G(t)\| dt + \alpha \Delta_2 \right) M_0 \right\}, \quad \beta_2 = \max \{\Delta_3; \Delta_3 M_0\}, \quad \rho = \max \{\beta_1; \beta_2\}.$$

Тогда из (24) и (26) имеем

$$\|U_{k+1}(t, x) - U_k(t, x)\| \leq \rho \|U_k(t, x) - U_{k-1}(t, x)\|, \quad (27)$$

где $\|U_k(t, x) - U_{k-1}(t, x)\| \equiv \|u_k(t, x) - u_{k-1}(t, x)\| + \|v_k(t) - v_{k-1}(t)\|$.

Из оценок (23), (25) и (27) следует, что операторы в правой части системы (21) являются сжимающими и, следовательно, обратная задача (1)–(4) имеет единственное решение $\{u(t, x) \in C^{2n, 2n}(D), v(t) \in C(D_T)\}$.

Литература

1. Горицкий А.Ю., Кружков С.Н., Чечкин Г.А. Уравнения с частными производными первого порядка. – М.: Мехмат МГУ, 1999. – 95 с.
2. Иманалиев М.И., Ведь Ю.А. О дифференциальном уравнении в частных производных первого порядка с интегральным коэффициентом // Дифференциальные уравнения. – 1989. – Т. 23, № 3. – С. 465–477.
3. Иманалиев М.И., Алексеенко С.Н. К теории нелинейных интегро-дифференциальных уравнений в частных производных типа Уизема // Докл. РАН. – 1992. – Т. 323, № 3. – С. 410–411.
4. Иманалиев М.И., Алексеенко С.Н. К теории систем нелинейных интегро-дифференциальных уравнений в частных производных типа Уизема // Докл. РАН. – 1992. – Т. 325, № 6. – С. 111–115.
5. Юлдашев Т.К. Об обратной задаче для квазилинейного уравнения в частных производных первого порядка // Вестник ТомГУ. Математика и Механика. – 2012. – № 2. – С. 56–62.
6. Юлдашев Т.К. Об обратной задаче для системы квазилинейных уравнений в частных производных первого порядка // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – Вып. 6. – № 11(270). – С. 35–41.

INVERSE PROBLEM FOR NONLINEAR INTEGRAL DIFFERENTIAL EQUATION
WITH HYPERBOLIC OPERATOR OF A HIGH DEGREET.K. Yuldashev¹

In this paper a method of studying an inverse problem for nonlinear integral differential equations with hyperbolic operator of arbitrary natural degree is given. The theorem on the existence and uniqueness of the solution of this problem is proved.

Keywords: inverse problem, nonlinear equation, hyperbolic operator of a high degree, method of characteristics, the existence and uniqueness of the solution.

References

1. Gorickij A.Yu., Kruzhkov S.N., Chechkin G.A. *Uravneniya s chastnymi proizvodnymi pervogo poryadka* [Partial differential equations of the first order]. Moscow: Mexmat MGU, 1999. 95 p. (in Russ.).
2. Imanaliev M.I., Ved' Yu.A. *Differencial'nye uravneniya*. 1989. Vol. 23, no. 3. pp. 465–477. (in Russ.).
3. Imanaliev M.I., Alekseenko S.N. *Doklady RAN*. 1992. Vol. 323, no. 3. pp. 410–411. (in Russ.).
4. Imanaliev M.I., Alekseenko S.N. *Doklady RAN*. 1992. Vol. 325, no. 6. pp. 111–115. (in Russ.).
5. Yuldashev T.K. Ob obratnoj zadache dlya kvazilinejnogo uravneniya v chastnyx proizvodnyx pervogo poryadka [On the inverse problem for the quasilinear partial differential equation of the first order]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika*. 2012. no. 2. pp. 56–62. (in Russ.).
6. Yuldashev T.K. Ob obratnoj zadache dlya sistemy kvazilinejnyx uravnenij v chastnyx proizvodnyx pervogo poryadka [On an inverse problem for a system of quasilinear equations in partial derivatives of the first order]. *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematika. Mekhanika. Fizika"*. 2012. Issue 6. no. 11(270). pp. 35–41. (in Russ.).

Поступила в редакцию 22 октября 2012 г.

¹ Yuldashev Tursun Kamalidinovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Doctoral Candidate, Department of Higher Mathematics, Siberian state aerospace university, Krasnoyarsk
E-mail: tursunbay@rambler.ru

AB INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ ФОРМИРОВАНИЯ ГРАНИЦЫ ЗЕРНА В ОЦК-ЖЕЛЕЗЕ

А.В. Верховых¹, А.А. Мирзоев²

С помощью программного пакета WIEN2k проведено первопринципное моделирование границы зерна $\Sigma 5$ ОЦК-железа. Получены оптимальные параметры и рассчитаны энергии формирования границы зерна для двух углов разориентировки.

Ключевые слова: первопринципное моделирование, α -железо, граница зерна.

Введение

Существует много структурных особенностей, которые сильно влияют на свойства конструкционных материалов, таких как сплавы на основе ОЦК железа [1, 2]. Многочисленные исследования показывают, что границы зерен являются активным элементом дефектной структуры материалов, влияющим на формирование таких важных свойств, как пластичность, диффузия, высокотемпературная и структурная ползучести, рекристаллизация, разрушение и др. [3, 4]. Граница зерна представляет собой плоский (неравновесный) дефект атомной структуры. Благодаря природе этого дефекта, связь между отдельными атомами на границе зерна меняется по сравнению со связью в регулярной кристаллической решетке [5]. Из-за формирования в области контакта зерен специфической структуры отличной от структуры совершенного кристалла, свойства границ могут быть иными, чем у объема. Вследствие этого границы зерен можно рассматривать как самостоятельную фазу, структурно и по свойствам выделенную из объема.

Понимание процессов, происходящих с участием границы зерна, должно быть основано на знании ее атомной структуры. Экспериментальное исследование границы зерен поликристаллических материалов проводятся методами просвечивающей электронной микроскопии и микродифракции, картин каналирования электронов и их контраста и др. Эти методы отличаются локальностью, спецификой требований к форме и размеру зерен, высокой трудоемкостью [6]. Как правило, исследования структуры границ зерен ограничиваются анализом макроскопических параметров: проводится распределение границ по разориентировкам без анализа атомной структуры границы и приграничных областей, без анализа кристаллографических связей с компонентами текстуры материала. Эффективным методом, позволяющим изучать процессы на атомном уровне, является компьютерное моделирование. В связи со всем вышесказанным, целью данной работы являлось моделирование энергии формирования границы зерна в ОЦК-железе, с помощью программного пакета WIEN2k.

Метод

Все вычисления проводились в рамках теории функционала плотности (DFT) методом линейных присоединённых плоских волн (LAPW) с учётом обобщённого градиентного приближения (GGA'96) в программном пакете WIEN2k с использованием $8 \times 4 \times 1$ k -точек в неприводимой области зоны Бриллюэна, согласно теории Монхорста–Пака [7]. Параметр решетки ОЦК-Fe $a = 2,847 \text{ \AA}$, что хорошо согласуется с данными эксперимента ($a = 2,867 \text{ \AA}$), $K_{\max} = 5,0 \text{ а.е.}^{-1}$, $E_{\text{cut}} = -7,0 \text{ РБ}$ [8]. Эти параметры позволили получить точность расчетов 0,01 эВ.

Была исследована граница наклона ферромагнитного ОЦК-железа $\Sigma = 5$ с двумя углами разориентировки: $36,9^\circ$ направления (310) и $53,1^\circ$ направления (210). Эта граница раздела обладает высокой стабильностью благодаря большому количеству совпадающих узлов решётки в обоих

¹ Верховых Анастасия Владимировна – аспирант, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: ursaeva@physics.susu.ac.ru

² Мирзоев Александр Аминулаевич – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

зёрнах и низкой энергией формирования [9, 10]. Модель границы наклона представляет собой элементарную ячейку из 40 атомов, у которой параметр решётки по оси ОХ больше, чем по оси ОУ и оси ОZ. Для построения модели использовался программный код, написанный на языке программирования *python* (рис. 1).

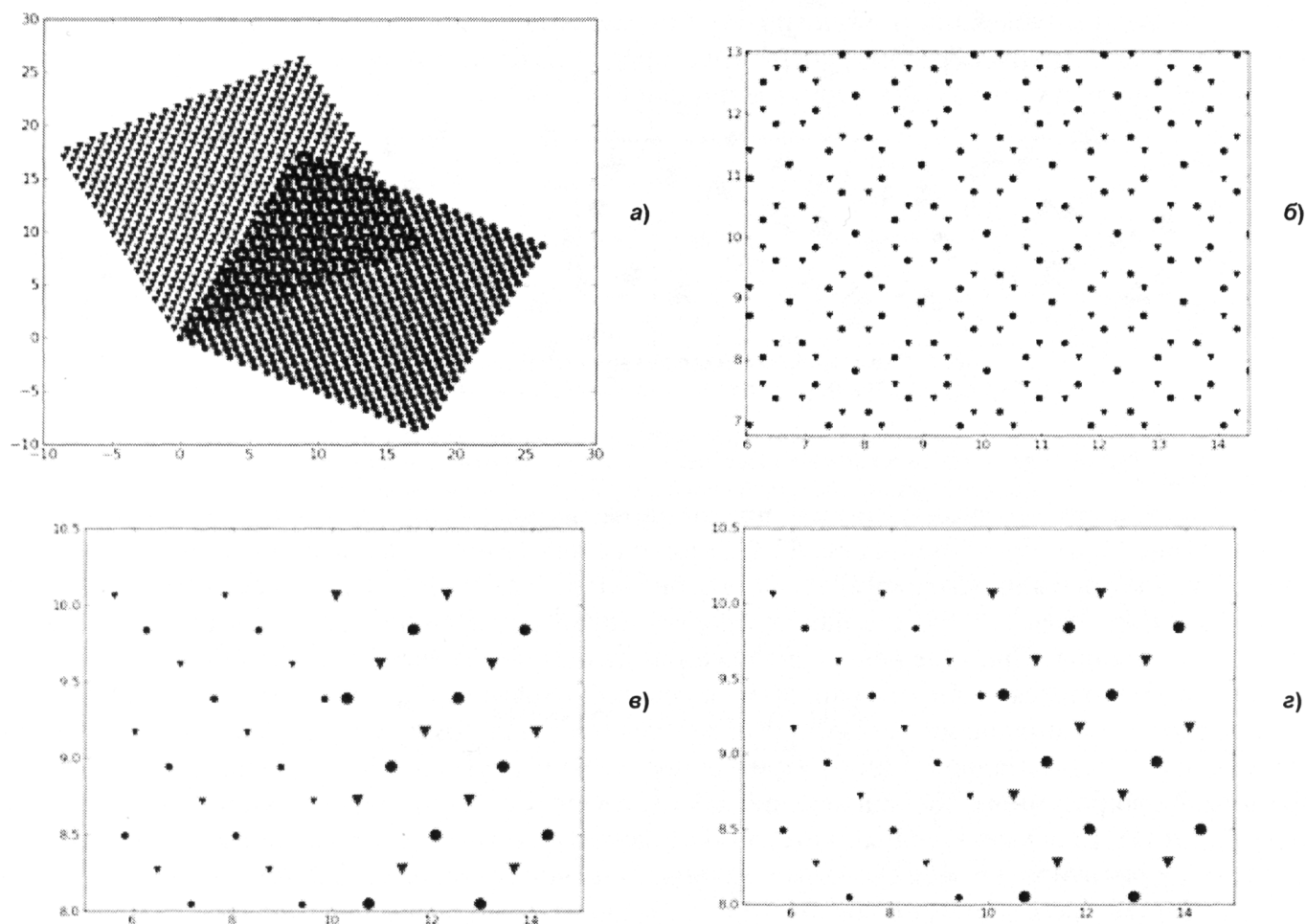


Рис 1. Схематическое изображение моделирования границы зерна: а) поворот двух плоскостей относительно друг друга на угол разориентировки (▼ – в плоскости $z = 0,5$; • – в плоскости $z = 0,0$); б) решетка совпадающих узлов; в) граница наклона $\Sigma 5(210)$; г) граница наклона $\Sigma 5(310)$

Чтобы найти оптимальную конфигурацию системы, необходимо оценить энергию формирования границы зерна. В различных журнальных статьях эта величина определяется двумя различными способами и имеет при этом разную размерность: 1) согласно термодинамической теории Раиса и Ван [11]:

$$\gamma_f = E_{gb} - 2E_{fs}$$

где E_{gb} – полная энергия границы зерна; E_{fs} – полная энергия свободной поверхности. Измеряется в электронвольтах. 2) В рамках подхода *ab initio*:

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

где E_{gb} – полная энергия границы зерна; E_{bulk} – полная энергия объёмного кристалла, который имеет тот же объем и форму суперячейки как у границы зерна; S – площадь поперечного сечения суперячейки. Измеряется в Дж/м².

Следует отметить, что отрицательное значение энергии формирования γ_f , определяемой формулой, представленной выше, соответствует уменьшению свободной энергии системы за счет ликвидации двух поверхностей, т.е. этот процесс является энергетически выгодным.

В плоскости XY, изображённой на рис. 2, две половинки ячейки представляют собой два зерна. Начальная структура каждого зерна соответствует равновесному положению атомов в объемноцентрированной кубической решётке железа.

Было получено, что увеличение суперячейки до 60–80 атомов не приводит к существенным изменениям в энергии формирования границы зерна, разница значений энергий не превышает 0,04 эВ. Свободная поверхность моделируется путём замены одной из половинок ячейки (зерна) вакуумом в 12 Å. Таким образом, суперячейка представляет собой 20 атомов отделённых от соседней ячейки вакуумом в 12 Å в направлении оси OX.

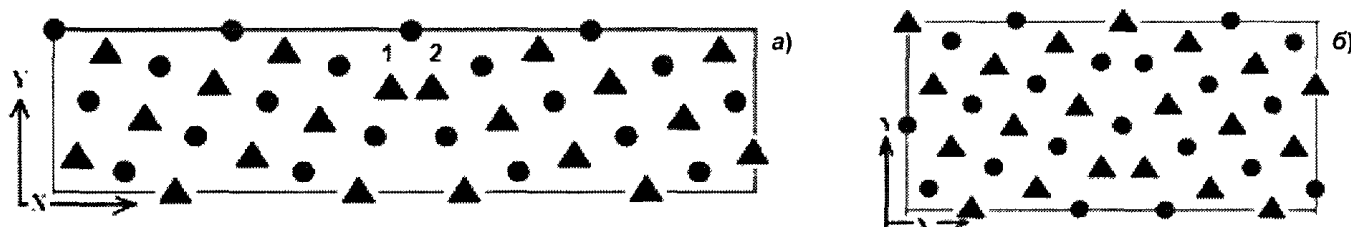


Рис. 2. Схематическое изображение границы ОЦК-железа:
а) $\Sigma 5(210)$; б) $\Sigma 5(310)$ (∇ – в плоскости $z = 0,5$; $\bullet$ – в плоскости $z = 0,0$)

Результаты

Во время моделирования возникла проблема из-за достаточно близкого расположения атомов 1 и 2 (рис. 2, а) для угла наклона $53,1^\circ$. Как отмечено выше, в данном пакете реализован метод LAPW, в котором пространство ячейки разбивается на неперекрывающиеся атомные сферы и междоузельную область. Это разбиение соответствует разделению остовных и валентных состояний электронов. При близком расположении атомов во избежание перекрывания остовных электронов приходится выбирать слишком маленький параметр R_{mt} , что ведёт к искажению кристаллического потенциала и программой не допускается. Поэтому было необходимо определить оптимальный жёсткий сдвиг одного зерна относительно другого, что позволило бы увеличить параметр R_{mt} до разумного значения. Сдвиг осуществлялся по направлениям осей OX (для увеличения R_{mt}) и OY (для уменьшения пустого пространства на границе зерна, образовавшегося в результате разориентировки зёрен). Самый маленький сдвиг составлял 0,2 Å по осям OX и OY, а в направлении OZ производился сдвиг на 0,5а, т.е. одно из зерен переворачивалось.

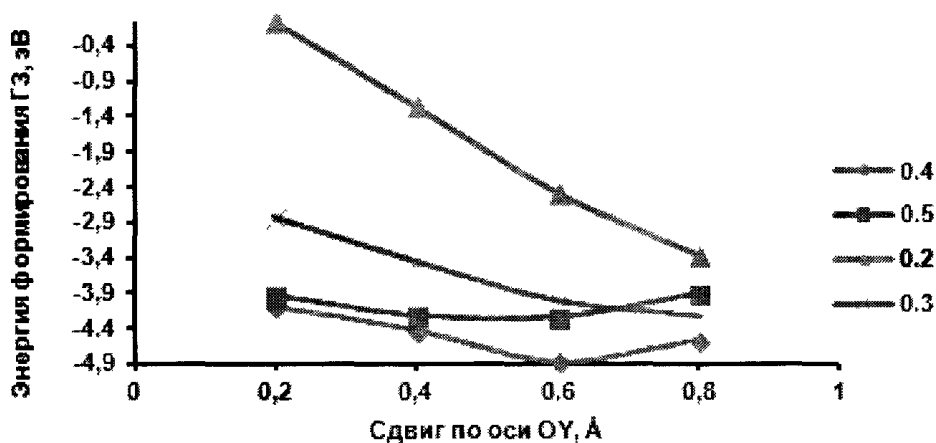


Рис. 3. График зависимости энергии формирования границы зерна от жесткости сдвига

Был построен график зависимости энергии формирования границы зерна от жесткого сдвига (рис. 3). Минимальному значению энергии формирования отвечал сдвиг 0,4 Å по оси OX, 0,6 Å по оси OY и 0,5а по оси OZ (рис. 4, в).

При исследовании границы зерна $\Sigma 5(310)$ необходимость жёсткого сдвига одного зерна относительно другого отсутствовала (рис. 4, г). Поэтому моделирование проводилось в два этапа: сначала была выполнена атомная релаксация границы зерна с максимально возможным $R_{\text{mt}} = 1,68$ а.е., а затем этот параметр был увеличен до 2,00 а.е., и с учётом этого изменения была совершена минимизация структуры. И таким образом, найдена оптимальная конфигурация системы.

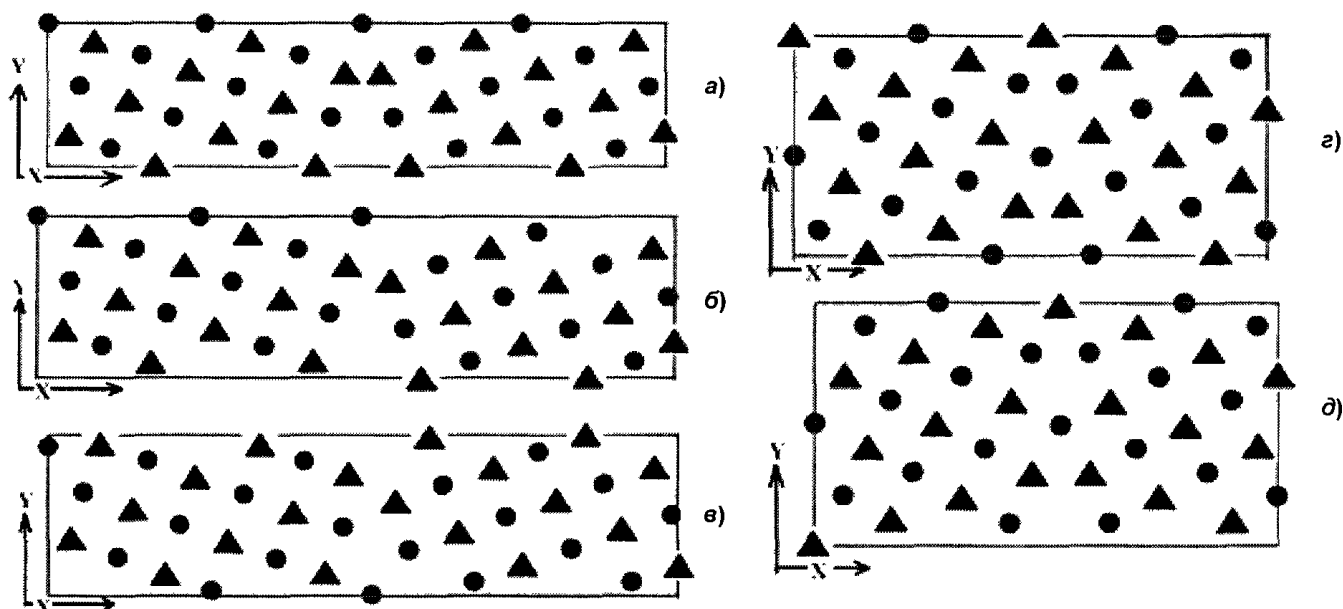


Рис. 4. Схематическое изображение границы зерна $\Sigma 5$.
53,1°: а) структура без жёстких сдвигов; б) жёсткий сдвиг 0,4 Å по ОХ и 0,6 Å по ОУ;
в) отрелаксированная структура, отвечающая минимуму энергии;
36,9°: г) изначальная структура; д) отрелаксированная структура, отвечающая минимуму энергии

Для оптимальных структур границ зерен $\Sigma 5(210)$ (рис. 4, в) и $\Sigma 5(310)$ (рис. 4, г) были определены энергии формирования. Результаты расчётов приведены в таблице в сравнении с другими работами и имеющимися экспериментальными значениями.

Сравнение полученных результатов

	Данная работа		Другие работы		Эксперимент
	$\Sigma 5(310)$	$\Sigma 5(210)$	$\Sigma 5(310)$	$\Sigma 5(210)$	
γ_f , эВ	-17,6	-9,6	—	-5,41 [12], -3,43 [4]	
γ_{gb} , Дж/м ²	0,61	1,14	1,1 [13], 1,63 [14]	6 [9]	0,77 [15], 0,985 [16]

Результаты показывают, что абсолютное значение энергии формирования границы зерна 53.1° достаточно сильно отличаются от наших данных. Хотя при меньших параметрах R_{mt} также было рассчитано значение энергии $\gamma_f = -4,86$ эВ, что хорошо согласуется с данными, представленными в [12,4]. Поэтому можно сделать предположение, что на величину γ_f влияет не только выбор обменно-корреляционного потенциала, но также параметры моделирования, в частности, количество k-точек и радиус *muffin-tin* сферы.

Таким образом, значения энергии формирования границы зерна рассчитанные в данной статье хорошо согласуется как с результатами из других работ, так и с экспериментальными значениями.

Заключение

Выполнено моделирование границы зерна $\Sigma 5(210)$ и $\Sigma 5(310)$, выбраны приемлемые параметры, позволяющие получать результат с хорошей точностью. В случае угла наклона разориентировки зерен 53,1° был определен оптимальный жесткий сдвиг: 0,4 Å по оси ОХ, 0,6 Å по оси ОУ и 1,4235 Å по оси ОZ. Вычислены энергии формирования границ зерен $\Sigma 5(210)$ и $\Sigma 5(310)$. Было получено, что более низкая энергия соответствует углу наклона 36,9°. Полученные результаты хорошо согласуются со значениями из других работ и с экспериментом.

Литература

1. Урсаева, А.В. Ab initio моделирование взаимодействия водорода с точечными дефектами в ОЦК-железе / А.В. Урсаева, М.С. Ракитин, Г.Е. Рузанова, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – Вып. 4. – № 10(227). – С. 114–119.
2. Урсаева, А.В. Ab initio-моделирование комплексов водород-вакансия (VHn) в ОЦК-железе/ А.В. Урсаева, А.А. Мирзоев, Г.Е. Рузанова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия» – 2011. – Вып. 17. – № 36(253). – С. 51–53.
3. Grain boundary diffusion of Fe in ultrafine-grained nanocluster-strengthened ferritic steel / R. Singh, J.H. Schneibel, S. Divinski, G. Wilde // Acta Materialia. – 2011. – V. 59. – P. 1346–1353.
4. Wachowicz, E. Effect of impurities on grain boundary cohesion in bcc iron / E. Wachowicz, A. Kiejna // Computational Materials Science. – 2008. – V. 43. – P. 736–743.
5. Sutton, A.P. Interfaces in crystalline solids / A.P. Sutton, R.W. Balluffi. – Oxford: Clarendon, 1995. – 856 с.
6. Валиев, Р.З. Кристаллогеометрический анализ межкристаллитных границ в практике электронной микроскопии / Р.З. Валиев, А.Н. Вепразов, В.Ю. Герцман. – М.: Наука, 1991. – 231 с.
7. Monkhorst, H.J. Special points for brillouin-zone integrations / H.J. Monkhorst, J.D. Pack // Phys. Rev. B. – 1976. – V.13. – P. 5188–5192.
8. Урсаева, А.В. Выбор оптимальных параметров для построения максимально точной модели ОЦК-железа / А.В. Урсаева, Г.Е. Рузанова, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2010. – Вып. 2. – № 9(185). – С. 97–101.
9. Zhang, J.M. Energy calculation for symmetrical tilt grain boundaries in iron / J.-M. Zhang, Y.-H. Huang, X.-J. Wu, K.-W. Xu // Applied Surface Science. – 2006. – V. 252. – P. 4936–4942.
10. Lejcek, P. Solute segregation and classification of [100] tilt grain boundaries in α -iron: consequences for grain boundary engineering / P. Lejcek, S. Hofmann, V. Paidar // Acta Materialia. – 2003. – V. 51. – P. 3951–3963.
11. Rice, J.R. Embrittlement of interfaces by solute segregation / J.R. Rice, J.-S. Wang // Materials Science and Engineering: A. – 1989. – V. 107. – P. 23–40.
12. Braithwaite, J.S. Grain boundary impurities in iron / J.S. Braithwaite, P. Rez // Acta Materialia. – 2005. – V. 53. – P. 2715–2726.
13. Hyde, B. Atomistic sliding mechanisms of the $\Sigma=5$ symmetric tilt grain boundary in bcc iron / B. Hyde, D. Farkas, M.J. Caturla // Philosophical Magazine. – 2005. – V. 85. – P. 3795–3807.
14. Cak, M. First-principles study of magnetism at grain boundaries in iron and nickel / M. Cak, M. Sob, J. Hafner // Phys. Rev. B. – 2008. – V. 78. – P. 054418.
15. Vlack, L.H.V. Intergranular energy of iron and some iron alloys / L.H. Van Vlack // Transactions. American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers. – 1951. – V. 191. – P. 251.
16. Roth, T.A. The surface and grain boundary energies of iron, cobalt and nickel / T.A. Roth // Materials Science and Engineering. – 1975. – V. 18 – P. 183–192.

AB INITIO MODELING OF THE GRAIN BOUNDARY FORMATION ENERGY IN BCC IRON

A.V. Verkhoviykh¹, A.A. Mirzoev²

First-principles modeling of the grain boundary $\Sigma 5$ bcc iron are carried out by WIEN2k code. Optimal parameters and the grain boundary formation energy for the two tilt angles are calculated.

Keywords: first-principles modeling, bcc iron, grain boundary.

References

1. Ursaeva A.V., Rakitin M.S., Ruzanova G.E., Mirzoev A.A. Ab initio modelirovanie vzaimodejstviya vodoroda s tochechnymi defektami v OCK-zheleze [Ab initio modeling of vacancy-point defects interaction in BCC iron]. *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematika. Mekhanika. Fizika"*. 2011. Issue 4. no. 10(227). pp. 114–119. (in Russ.).
2. Ursaeva A.V., Mirzoev A.A., Ruzanova G.E. Ab initio-modelirovanie kompleksov vodorod-vakansiya (VH_n) v OCK-zheleze [Ab initio modelling of hydrogen-vacancy (VH_n) complexes in BCC iron]. *Vestnik YuUrGU. Seriya «Metallurgiya»*. 2011. Issue 17. № 36(253). pp. 51–55. (in Russ.).
3. Singh R., Schneibel J.H., Divinski S., Wilde G. Grain boundary diffusion of Fe in ultrafine-grained nanocluster-strengthened ferritic steel. *Acta Materialia*. 2011. Vol. 59. pp. 1346–1353.
4. Wachowicz E., Kiejna A. Effect of impurities on grain boundary cohesion in bcc iron. *Computational Materials Science*. 2008. Vol. 43. pp. 736–743.
5. Sutton A.P., Balluffi R.W. *Interfaces in crystalline solids*. Oxford: Clarendon, 1995. 856 p.
6. Valiev R.Z., Vergazov A.N., Gercman V.Yu. *Kristallogeometricheskij analiz mezhkristallit-nyx granic v praktike e'lektronnoj mikroskopii* [Crystal geometric analysis of intercrystalline boundaries in electron microscopy]. Moscow: Nauka, 1991. 231 p. (in Russ.).
7. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*. 1976. Vol. 13. pp. 5188–5192.
8. Ursaeva A.V., Ruzanova G.E., Mirzoev A.A. Vybór optimalnykh parametrov dlya postroeniya maksimal'no tochnoj modeli OCK-zheleza [Selection of optimal parameters for formation the most accurate model of BCC iron]. *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematika. Mexanika. Fizika"*. 2010. Issue 2. no. 9(185). pp. 97–101.
9. Zhang J.-M., Huang Y.-H., Wu X.-J., Xu K.-W. Energy calculation for symmetrical tilt grain boundaries in iron. *Applied Surface Science*. 2006. Vol. 252. pp. 4936–4942.
10. Lejcek P., Hofmann S., Paidar V. Solute segregation and classification of [100] tilt grain boundaries in α -iron: consequences for grain boundary engineering. *Acta Materialia*. 2003. Vol. 51. pp. 3951–3963.
11. Rice J.R., Wang J.-S. Embrittlement of interfaces by solute segregation. *Materials Science and Engineering: A*. 1989. Vol. 107. pp. 23–40.
12. Braithwaite J.S., Rez P. Grain boundary impurities in iron. *Ada Materialia*. 2005. Vol. 53. pp. 2715–2726.
13. Hyde B., Farkas D., Caturla M.J. Atomistic sliding mechanisms of the $\Sigma=5$ symmetric tilt grain boundary in bcc iron. *Philosophical Magazine*. 2005. Vol. 85. pp. 3795–3807.
14. Cak M., Sob M., Hafner J. First-principles study of magnetism at grain boundaries in iron and nickel. *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 78. pp. 054418.
15. Vlack L.H.V. Intergranular energy of iron and some iron alloys. *Transactions. American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers*. 1951. Vol. 191. p. 251.
16. Roth T.A. The surface and grain boundary energies of iron, cobalt and nickel. *Materials Science and Engineering*. 1975. Vol. 18. pp. 183–192.

Поступила в редакцию 11 января 2013 г.

¹ Verkhoviykh Anastasia Vladimirovna is Post-graduate student of South Ural State University.

E-mail: ursaeva@physics.susu.ac.ru

² Mirzoev Aleksandr Aminulaevich is Dr.Sc (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

АНАЛИЗ РАСТВОРЕНИЯ УГЛЕРОДА В ТИТАНЕ ПРИ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ ОБРАБОТКЕ¹

**В.Е. Громов², С.В. Райков³, Д.А. Шерстобитов⁴, Ю.Ф. Иванов⁵
Б.Б. Хаимзон⁶, С.В. Коновалов⁷**

Методами сканирующей электронной микроскопии выполнен анализ структурно-фазового состояния поверхности титанового сплава ВТ6, подвергнутого электровзрывному легированию углеграфитовыми волокнами и последующей электронно-пучковой обработке. Рассмотрен процесс растворения углеграфитовых волокон на каждом этапе обработки. Проведено сравнение с результатами теоретических модельных представлений.

Ключевые слова: растворение углерода, титан, волокна, сканирующая электронная микроскопия.

Модификация поверхности материала концентрированными потоками энергии позволяет добиться значительного улучшения эксплуатационных свойств материала. Одним из перспективных методов поверхностной обработки материала является электровзрывное легирование (ЭВЛ) с последующей электронно-пучковой обработкой (ЭПО) [1]. Такая обработка обеспечивает значительное повышение твердости и износостойкости поверхности самых различных материалов. На первом этапе такой комбинированной обработки при науглероживании титана с использованием углеграфитовых волокон добиваются равномерного распределения углерода в матрице. На втором этапе с помощью ЭПО происходит растворение частиц углерода и образование однородного слоя карбида титана [2].

Накопленный значительный экспериментальный материал по модифицированию поверхностных свойств титана и его сплавов за счет ЭВЛ и ЭПО [1–4] требует адекватного теоретического описания. Были предложены модели формирования наноструктурных слоев [5], генерации термоупругих волн [6], растворения частиц углерода в титане [7] при воздействии концентрированных потоков энергии. В работе [8] рассмотрен вопрос о распределении углерода в карбиде титана и в жидком растворе титана с углеродом с учетом диаграммы состояний и изменения температуры за счет фазовых переходов и теплообмена с окружающей средой. Представленная модель и расчеты по ней позволили показать, что частицы углерода микрометрового (~10 мкм) диапазона растворяются за время порядка 10 с. Это время много больше времени воздействия на материал концентрированным потоком энергии. При размерах частиц порядка нанометра время растворения становится равным 10 нс по порядку величины. В этом случае частица углерода успевает раствориться за время воздействия при электронно-пучковой обработке.

Полученные теоретические зависимости позволили сделать важный вывод, что в процессе комбинированной обработки следует использовать именно углеграфитовые волокна, диаметр микрофибрилл в которых порядка десятков нанометров, что позволит их растворять за время воздействия при электронно-пучковой обработке.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 11-02-91150-ГФЕН-а, № 11-02-12091-офи-м-2011) и госзадания Минобрнауки № 2 4807 2011

² Громов Виктор Евгеньевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики, Сибирский государственный индустриальный университет (СибГИУ), Новокузнецк

E-mail: gromov@physics.sibsib.ru

³ Райков Сергей Валентинович – кандидат технических наук, старший научный сотрудник УНИ, Сибирский государственный индустриальный университет (СибГИУ), Новокузнецк.

⁴ Шерстобитов Денис Александрович – младший научный сотрудник УНИ, Сибирский государственный индустриальный университет (СибГИУ), Новокузнецк

⁵ Иванов Юрий Федорович – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, Институт сильноточной электроники СО РАН

E-mail: yufi55@mail.ru

⁶ Хаимзон Борис Бернардович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра физики и методики преподавания физики, Кузбасская государственная педагогическая академия (КузГПА)

E-mail: khaimzon@yandex.ru

⁷ Коновалов Сергей Валерьевич – кандидат технических наук, доцент, кафедра физики, Сибирский государственный индустриальный университет (СибГИУ)

E-mail: konovalov@physics.sibsib.ru

Предложенная физическая модель и математический расчет позволяют утверждать, что в нанометровом диапазоне размера ячейки неоднородности, формирующие гетерогенную структуру после ЭВЛ, полностью модифицируются с помощью ЭПО за счет увеличения времени охлаждения, обусловленного теплотой реакций и темпом внешнего охлаждения.

Целью настоящей работы является сопоставление результатов и выводов модельных представлений [8] с экспериментальными данными эволюции структурно-фазовых состояний поверхности титанового сплава ВТ6, обработанных плазмой электрического взрыва углеграфитового волокна (далее по тексту УГВ) и подвергнутых последующей ЭПО. Как и в [1–4] поглощаемая мощность при ЭВЛ составляла $5,5 \text{ ГВт/м}^2$, масса взрывааемых УГВ $\sim 70 \text{ мг}$. Параметры ЭПО: плотность энергии пучка электронов в импульсе – 45 Дж/см^2 , время воздействия – 100 мкс , число импульсов – 10.

Исследования поверхности облучения, выполненные методами сканирующей электронной микроскопии [9, 10], выявили присутствие осколков УГВ (рис. 1). О том, что данные осколки сформированы углеродом, свидетельствуют изображения структуры, полученные в обратно отраженных электронах. На таких снимках области, обогащенные более легким элементом, имеют более темный контраст [10, 11] (рис. 1, б). По сравнению с титаном углерод имеет меньший атомный вес, поэтому выявленные стержневидные образования являются графитом – осколками УГВ.

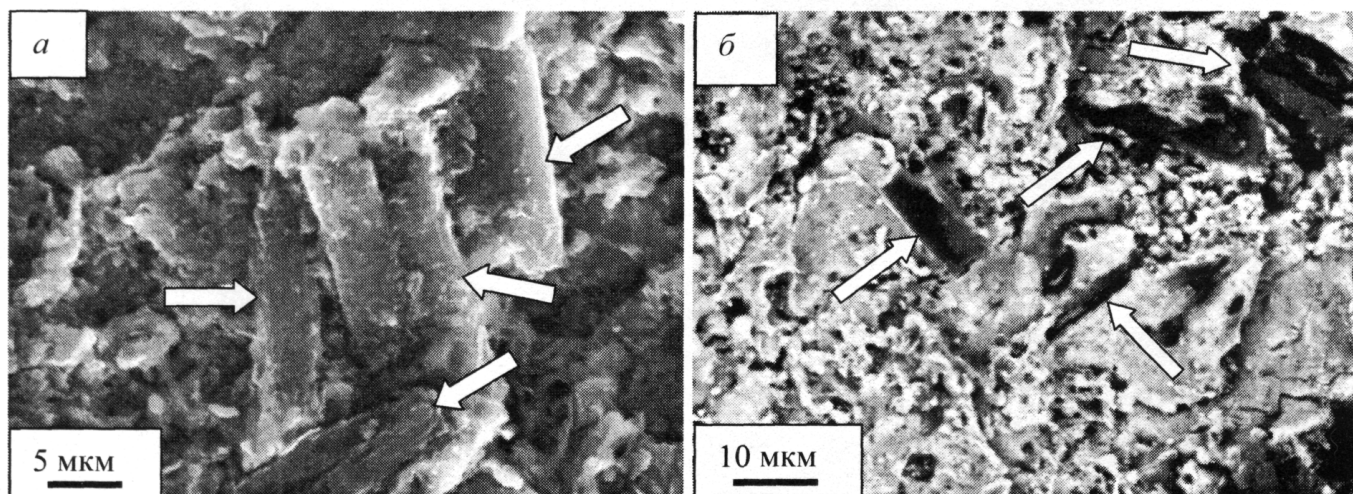


Рис. 1. Структура поверхности титанового сплава ВТ6, обработанного плазмой, формирующейся при электрическом взрыве углеграфитового волокна (указаны стрелками). Сканирующая электронная микроскопия; а) изображение получено во вторичных электронах, б) изображение получено в обратно отраженных электронах

Результаты статистического анализа поперечных размеров таких стержней приведены на рис. 2, а. Средние поперечные размеры стержней $3,25 \pm 1,05 \text{ мкм}$; реальные размеры стержней изменяются в пределах от $1,67 \text{ мкм}$ до $5,5 \text{ мкм}$.

Дополнительная ЭПО поверхности титанового сплава ВТ6, подвергнутого ЭВЛ, приводит к

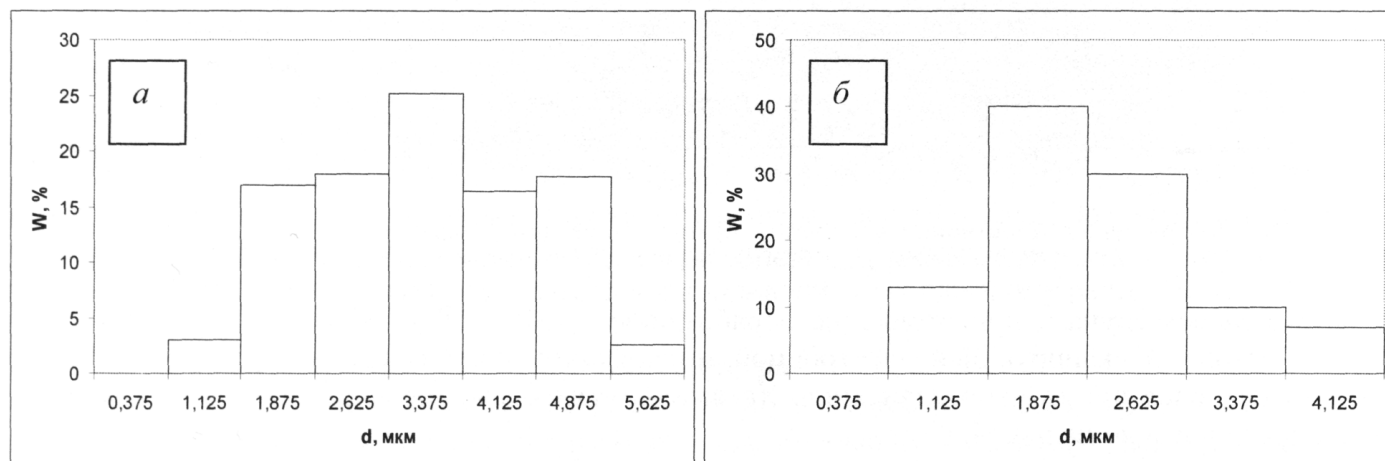


Рис. 2. Распределение по размерам (поперечные размеры) углеграфитовых волокон, выявленных в приповерхностном слое титанового сплава ВТ6; а) после электровзрывного легирования УГВ (дважды); б) после дополнительной ЭПО

практически полному растворению графитовых стержней в результате плавления поверхностного слоя. На поверхности формируется структура ячеистой и дендритной кристаллизации, характерное изображение которой приведено на рис. 3.

Эти результаты позволяют заключить, что ЭПО по указанному выше режиму поверхности титанового сплава ВТ6, сформировавшейся при ЭВЛ, сопровождается растворением углеродистых осколков, размерные характеристики которых приведены на рис. 2, а.

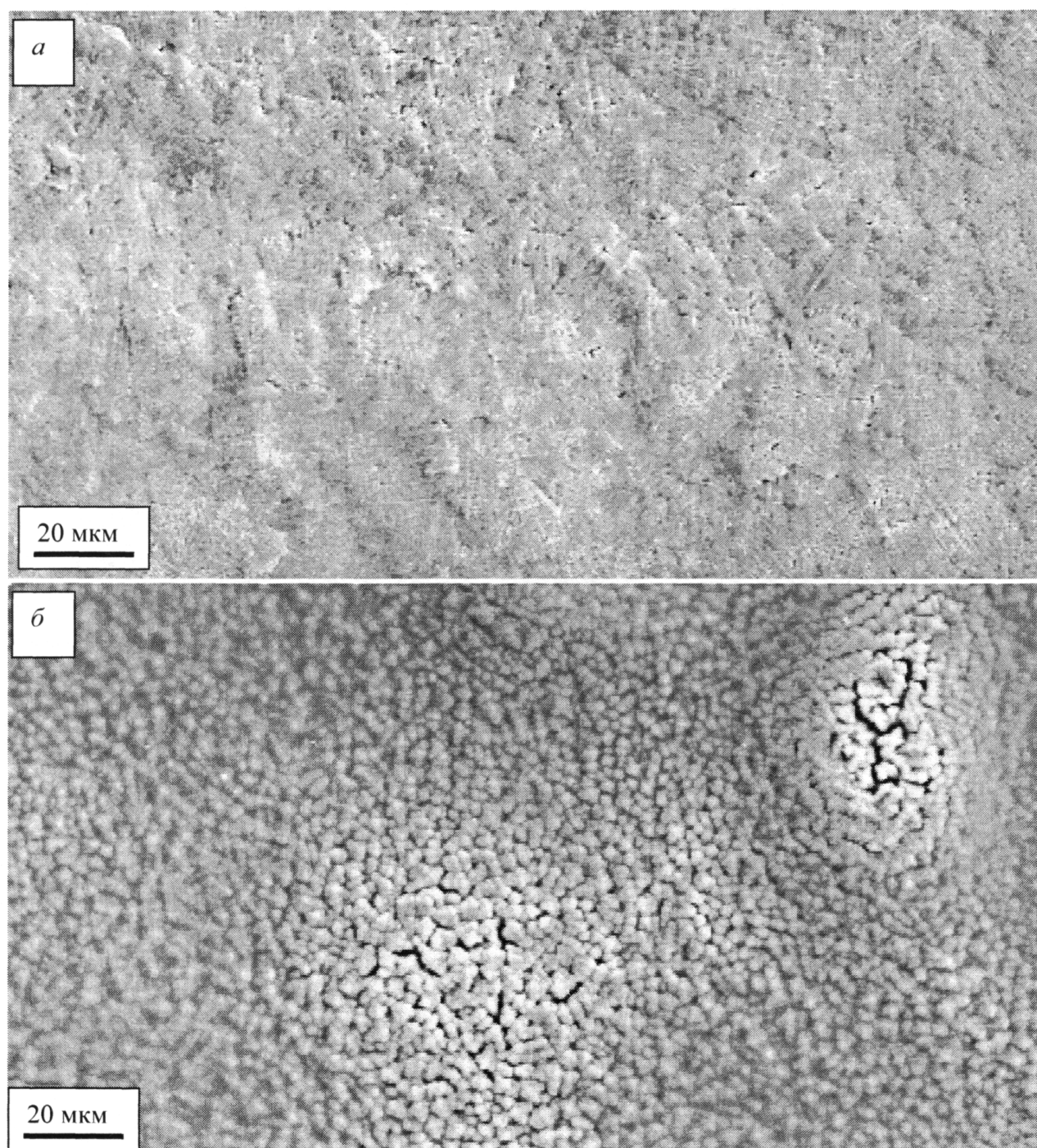


Рис. 3. Структура дендритной (а) и ячеистой (б) кристаллизации поверхности титанового сплава ВТ6 после ЭВЛ и последующей ЭПО. Сканирующая электронная микроскопия

В отдельных случаях приготовление обработанных ЭВЛ + ЭПО образцов сплава ВТ6 для анализа методами сканирующей электронной микроскопии сопровождалось разрушением поверхностного слоя путем его отслаивания. Характерное изображение формирующейся при этом структуры приведено на рис. 4.

Анализируя представленные на данном рисунке изображения, можно обнаружить стержневидные образования, расположенные в подслое, т.е. на некотором расстоянии от поверхности облучения. Можно предположить, что расслаивание модифицированной поверхности происхо-

дит по границе раздела жидкой и твердой фаз, т.е. по дну ванны расплава. Размерные характеристики выявленных стержней приведены на рис. 2, б. Средние поперечные размеры стержней $2,24 \pm 0,71$ мкм; реальные размеры стержней изменяются в пределах от 1,25 мкм до 3,75 мкм.

Таким образом, выполненные исследования выявили сложную кинетику растворения оскол-

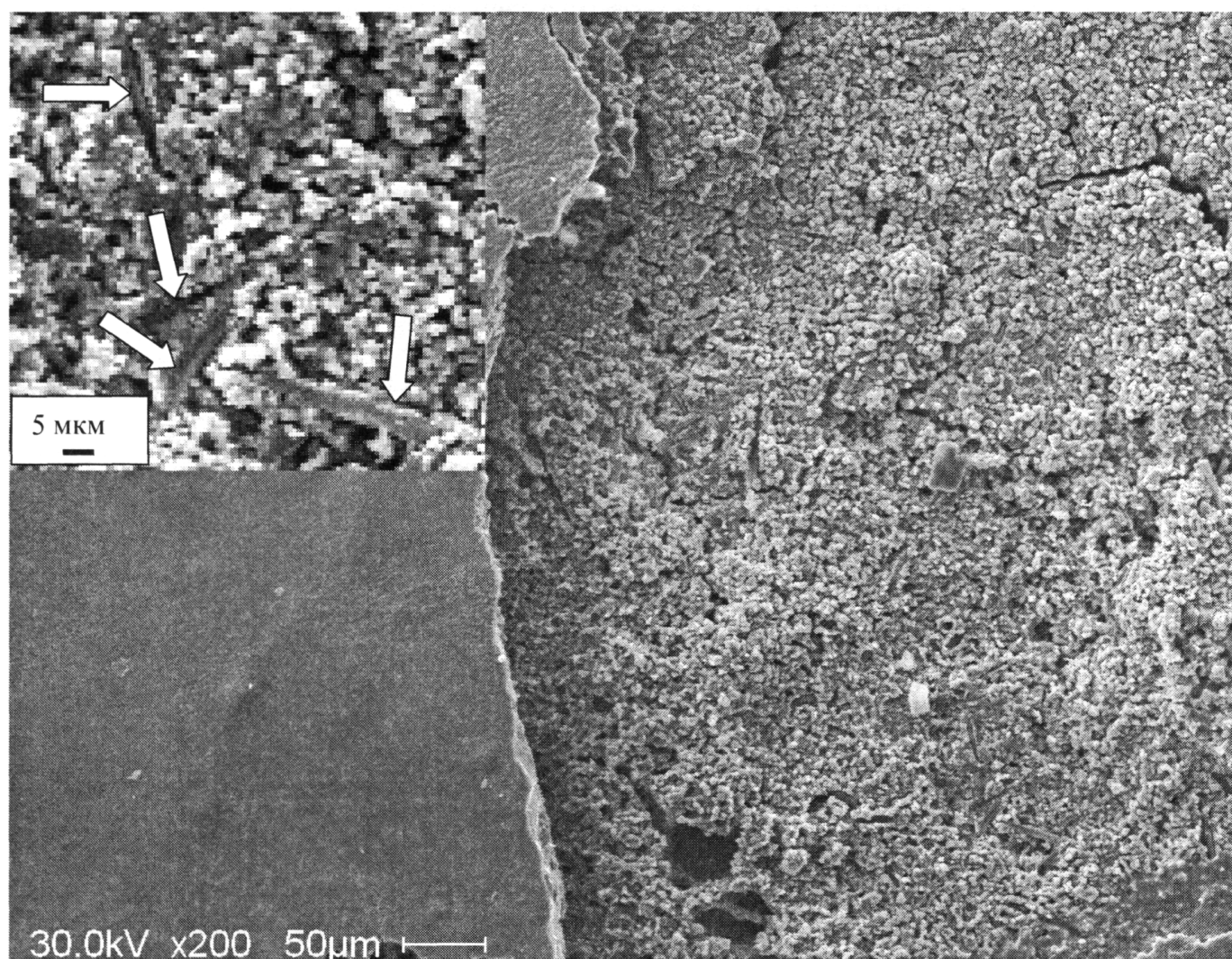


Рис. 4. Структура поверхности и подповерхностного слоя титанового сплава BT6, обработанного плазмой, формирующейся при электрическом взрыве углеграфитового волокна и дополнительно облученной электронным пучком. Сканирующая электронная микроскопия.

ков углеграфитовых волокон, попадающих в поверхностный слой при электровзрывном легировании. При указанном режиме электронно-пучковой обработки осколки углеграфитового волокна практически полностью растворяются в поверхностном слое, находящемся в состоянии расплава, и частично растворяются в переходном слое, отделяющем расплавленный слой от слоя, находящегося в твердом состоянии. Наблюдается существенное расхождение экспериментально установленных результатов с результатами теоретических оценок. Время растворения УГВ оказалось существенно меньше, чем следует из теории для волокон данного диаметра. Это можно объяснить следующим образом. На рис. 1 не выявлена тонкая структура УГВ. Согласно [12] УГВ состоят из тончайших микрофибрилл, имеющих ленточный вид толщиной порядка нм и шириной порядка 10 нм. При воздействии на поверхность материала электронным пучком жидкий титан протекает между этими микрофибриллами, что и приводит к их быстрому растворению.

Литература

1. Формирование структурно-фазовых состояний металлов и сплавов при электровзрывном легировании и электронно-пучковой обработке / Е.А. Будовских, Е.С. Ващук, В.Е. Громов и др. – Новокузнецк: Интер-Кузбасс, 2011. – 207 с.

2. Структура, фазовый состав и свойства поверхностных слоев титановых сплавов после электровзрывного легирования и электронно-пучковой обработки / Ю.Ф. Иванов, В.Е. Громов, Е.А. Будовских и др. – Новокузнецк: Интер-Кузбасс, 2012. – 434 с.
3. Структура, фазовый состав и свойства титана после электровзрывного легирования и электронно-пучковой обработки: монография / Ю.Ф. Иванов, С.В. Карпий, М.М. Морозов и др. – Новокузнецк: Изд-во НПК, 2010. – 173 с.
4. Структурно-фазовые состояния титана после электровзрывного легирования и последующей электронно-пучковой обработки / С.В. Карпий, М.М. Морозов, Е.А. Будовских и др. // Успехи физики металлов. – 2010. – Т. 11, № 3. – С. 273–293.
5. Гидродинамическая модель образования наноструктурных слоев / В.Д. Сарычев, А.Ю. Грановский, С.Н. Старовацкая, В.Е. Громов // Изв. вузов. Чер. металлургия. – 2012. – № 6. – С. 87–89.
6. Сарычев, В.Д. Математическая модель генерации термоупругих волн при воздействии концентрированных потоков энергии на материалы / В.Д. Сарычев, М.С. Волошина, В.Е. Громов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2011. – Т. 8, № 4. – С. 71–76.
7. Математическая модель растворения частиц углерода в титане при воздействии концентрированных потоков энергии / В.Д. Сарычев, Б.Б. Хаимзон, Н.А. Соскова, В.Е. Громов // Титан. – 2012. – № 1. – С. 4–8.
8. Диффузионная модель растворения частиц углерода в титане при воздействии концентрированных потоков энергии / Б.Б. Хаимзон, В.Д. Сарычев, Н.А. Соскова, В.Е. Громов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2012. – № 2. – С. 19–21.
9. Энгель, Л. Растровая электронная микроскопия. Разрушение: справочник / Л. Энгель, Г. Клингеле; пер. с нем. Б. Е. Левина; под ред. М. Л. Бернштейна. – М.: Металлургия, 1986. – 230 с.
10. Сканирующая электронная микроскопия и рентгеноспектральный микроанализ в примерах практического применения / М.М. Кристалл, И.С. Ясников, В.И. Полунин и др. – М.: Техносфера, 2009. – 208 с.
11. Брандон, Д. Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля / Д. Брандон, У. Каплан. – М.: Техносфера, 2006. – 384 с.
12. Материаловедение / Б.Н. Арзамасов, В.И. Макарова, Г.Г. Мухин и др.; под общ. ред. Б.Н. Арзамасова. – М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2003. – 648 с.

ANALYSIS OF CARBON DISSOLUTION IN TITANIUM UNDER ELECTRON BEAM TREATMENT

V.E. Gromov¹, S.V. Raykov², D.A. Sherstobitov³, Yu.F. Ivanov⁴, B.B. Khaimzon⁵, S.V. Konovalov⁶

Analysis of structure phase state of titanium alloy BT6 subjected to electroexplosive alloying by carbon graphite fibers and following electron beam treatment is carried out by methods of scanning electron microscopy. The carbon graphite fibres dissolution process on each stage of treatment is considered. The comparison with the results of theoretical model representations is realized.

Keywords: carbon dissolution, titanium, fibres, scanning electron microscopy.

¹ Gromov Viktor Evgenievich is Dr Sc (Physics and Mathematics), Professor, Head of Physics Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk

E-mail gromov@physics.sibsui.ru

² Raykov Sergey Valentinovich is Cand Sc (Engineering), Senior Researcher, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk

³ Sherstobitov Sergey Aleksandrovich is Junior Research Fellow, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk

⁴ Ivanov Yuriy Fedorovich is Dr Sc (Physics and Mathematics), Professor, Chief Scientist Officer, Institute of High Current Electronics SB RAS

E-mail yufi55@mail.ru

⁵ Khaimzon Boris Bernardovich is Cand Sc (Physics and Mathematics), Docent, Department of Physics and Methodic of Teaching Physics, Kuzbass State Pedagogical Academy

E-mail khaimzon@yandex.ru

⁶ Konovalov Sergey Valerievich is Cand Sc (Engineering), docent, Physics Department, Siberian State Industrial University

E-mail konovalov@physics.sibsui.ru

References

1. Budovskikh E.A., Vashhuk E.S., Gromov V.E., Ivanov Yu.F., Koval' N.N. *Formirovanie strukturno-fazovykh sostoyanij metallov i splavov pri elektrovzryvnom legirovanii i elektronno-puchkovoj obrabotke* [Formation of structural-phase states of metals and alloys at electroexplosive doping and electron-beam processing]. Novokuznetsk: Inter-Kuzbass, 2011. 207 p. (in Russ.).
2. Ivanov Yu.F., Gromov V.E., Budovskikh E.A. *et al.* *Struktura, fazovyy sostav i svoystva poverkhnostnykh sloev titanovykh splavov posle elektrovzryvnogo legirovaniya i elektronno-puchkovoj obrabotki* [The structure, phase composition and properties of the surface layers of titanium alloys after electroexplosive doping and electron-beam processing]. Novokuznetsk: Inter-Kuzbass, 2012. 434 p. (in Russ.).
3. Ivanov Yu.F., Karpij S.V., Morozov M.M., Koval' N.N., Budovskikh E.A., Gromov V.E. *Struktura, fazovyy sostav i svoystva titana posle e'lektrovzryvnogo legirovaniya i e'lektronno-puchkovoj obrabotki: monografiya* [The structure, phase composition and properties of titanium after electroexplosive doping and electron-beam processing: Monograph]. Novokuzneck: NPK, 2010. 173 p. (in Russ.).
4. Karpij S.V., Morozov M.M., Budovskikh E.A. *et al.* *Strukturno-fazovye sostoyaniya titana posle e'lektrovzryvnogo legirovaniya i posleduyushhej e'lektronno-puchkovoj obrabotki* [Structural and phase states of titanium after electroexplosive doping and subsequent electron-beam processing]. *Uspekhi fiziki metallov*. 2010. Vol. 11, no. 3. pp. 273–293. (in Russ.).
5. Sarychev V.D., Granovskij A.Yu., Starovackaya S.N., Gromov V.E. *Gidrodinamicheskaya model obrazovaniya nanostrukturnykh sloev* [Hydrodynamic model of nanostructured layers forming] / *Izvestiya vuzov. Chernaya metallurgiya*. 2012. no. 6. pp. 87–89. (in Russ.).
6. Sarychev V.D., Voloshina M.S., Gromov V.E. *Matematicheskaya model generacii termouprugikh voln pri vozdeystvii koncentrirovannykh potokov energii na materialy* [A mathematical model for the generation of thermoelastic waves under the influence of concentrated energy flows of materials]. *Fundamentalnye problemy sovremennogo materialovedeniya*. 2011. Vol. 8, no. 4. pp. 71–76. (in Russ.).
7. Sarychev V.D., Khaimzon B.B., Soskova N.A., Gromov V.E. *Matematicheskaya model rastvoreniya chastic ugleroda v titane pri vozdeystvii koncentrirovannykh potokov energii* [A mathematical model of dissolution of carbon particles in titanium when exposed to concentrated energy flows]. *Titan*. 2012. no. 1. pp. 4–8. (in Russ.).
8. Khaimzon B.B., Sarychev V.D., Soskova N.A., Gromov V.E. *Diffuzionnaya model rastvoreniya chastic ugleroda v titane pri vozdeystvii koncentrirovannykh potokov energii* [Diffusion model of dissolution of carbon particles in titanium when exposed to concentrated energy flows]. *Fundamentalnye problemy sovremennogo materialovedeniya*. 2012. no. 2. pp. 19–21. (in Russ.).
9. Engel L., Klingele G. *Rastrovaya elektronnaya mikroskopiya. Razrushenie: spravochnik* [Raster electron microscopy. Destruction: A Handbook]. Moscow: Metallurgiya, 1986. 230 p. (in Russ.). [Engel L., Klingele H. *Rasterelektronenmikroskopische Untersuchungen von Metallschaden*. Munchen, Wien, 1982].
10. Krishtall M.M., Yasnikov I.S., Polunin V.I., Filatov A.M., Ulyanenko A.G. *Skaniruyushchaya elektronnaya mikroskopiya i rentgenospektral'nyj mikroanaliz v primerax prakticheskogo primeneniya* [Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis in the practical application of]. Moscow: Tekhnosfera, 2009. 208 p.
11. Brandon D., Kaplan U. *Mikrostruktura materialov. Metody issledovaniya i kontrolya* [The microstructure of materials. Methods of research and monitoring]. Moscow: Tekhnosfera, 2006. 384 p. (in Russ.).
12. Arzamasov B.N., Makarova V.I., Mukhin G.G. *et al.* *Materialovedenie* [Materials Science]. Moscow: izdatelstvo MGTU im. N.E. Bauman, 2003. 648 p. (in Russ.).

Поступила в редакцию 17 октября 2012 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ИЗМЕРЕНИЮ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ ПО ФОРМЕ ПОВЕРХНОСТИ КАПЛИ ПРИ НАЛИЧИИ НЕСОВЕРШЕНСТВ В ЕЕ ПОДВЕСЕ ИЛИ ОПОРЕ

В.Г. Речкалов¹, В.П. Бескачко²

Предлагается метод нахождения формы поверхности капли, закрепленной на державке, имеющей произвольную форму и ориентацию в пространстве. Метод позволяет находить геометрические характеристики (объем, площадь поверхности, форму сечений) висящей капли при несовершенном подвесе и моделировать связанные с таким подвесом погрешности в определении поверхностного натяжения, возникающие в условиях натуральных экспериментов. Выполненные численные эксперименты показывают, что главным фактором, влияющим на точность определения поверхностного натяжения, является нарушение круговой симметрии державки.

Ключевые слова измерение поверхностного натяжения, форма капли, численные методы

Введение

Межфазное, поверхностное, натяжение представляет собой основную термодинамическую характеристику поверхностного слоя жидкостей и твердых тел на границе с различными фазами (газами, жидкостями, твердыми телами). Оно играет ключевую роль в физике дисперсных сред, физической и коллоидной химии, электрохимии и пр., определяя многие существенные параметры гетерогенных систем, такие как капиллярное давление жидкости под искривленной поверхностью, длину капиллярных волн на поверхности жидкости, краевой угол смачивания, электрокапиллярный эффект, число Бонда, число Вебера и др.

К настоящему времени существует множество статических и динамических методов определения поверхностного натяжения: по форме капли (лежащей или висящей), капиллярного поднятия, стоячих или бегущих волн, максимального давления в пузырьке и ряд других. Наиболее надежными и распространенными являются методы, основанные на наблюдении формы капли. С их помощью в ряде случаев удается получить довольно точные и согласованные друг с другом значения поверхностного натяжения для низкотемпературных и инертных в химическом отношении жидкостей. В случае высокотемпературных жидкостей – расплавов тугоплавких веществ (металлов, солей, оксидов) – данные об этой величине гораздо более противоречивы из-за того, что в этом случае трудно контролировать условия экспериментов столь же тщательно, как и при низких температурах. Вот что сказано об этом в фундаментальном справочнике физических величин под редакцией И.С. Григорьева и Е.З. Мейлихова: «...измерения разных авторов даже одним методом обычно дают неодинаковые значения для одних и тех же веществ. При отборе данных для настоящего справочника в большинстве случаев использовались сведения последних публикаций» [1, с. 331]. Таким образом, проблема точности измерения поверхностного натяжения остается открытой. Поэтому представляется целесообразным выяснить, насколько сильно скажутся возможные несовершенства в проведении опытов на оценках величины поверхностного натяжения. В настоящей работе это делается на примере экспериментов с висящей каплей.

Постановка задачи

Точность измерения поверхностного натяжения зависит от многих факторов. В методе измерения по форме поверхности капли существенное значение имеет предположение, что капля представляет собой тело вращения. В действительности форма капли зависит от формы держав-

¹ Речкалов Виктор Григорьевич – кандидат педагогических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет

E-mail: viktor-rechkalov@mail.ru

² Бескачко Валерий Петрович – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет

ки, на которой она подвешена (для случая висющей капли). На практике державка имеет цилиндрическую форму и располагается в горизонтальной плоскости только приближенно, что нарушает цилиндрическую симметрию капли. Учет влияния указанных погрешностей на точность определения поверхностного натяжения приводит к необходимости расчета формы несимметричной капли.

Для решения этой задачи воспользуемся принципом минимума энергии: капля принимает такую форму, при которой она обладает минимумом потенциальной энергии при заданном объеме. Следовательно, в такой постановке рассматриваемая задача является задачей поиска условного экстремума.

Задача на поиск условного экстремума приводит к системе уравнений

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial x_i} + \lambda \frac{\partial V}{\partial x_i} = 0, \\ V = V_0 \end{cases}$$

где λ – неизвестный вспомогательный коэффициент, E – энергия капли, V – ее объем, V_0 – заданный объем, x_i – независимый геометрический параметр, определяющий форму капли.

К сожалению уравнения данной системы нелинейные. Однако если имеется хорошее приближение для формы капли, то можно написать:

$$V = V^{\{0\}} + \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_i} \Delta x_i.$$

Здесь и далее по одноименным индексам предполагается суммирование. Индекс $\{0\}$ означает, что величина рассчитывается по имеющемуся приближению для формы поверхности капли.

Используя формулу для полного дифференциала функции нескольких переменных, получаем:

$$\frac{\partial E}{\partial x_i} = \frac{\partial E^{\{0\}}}{\partial x_i} + \frac{\partial^2 E^{\{0\}}}{\partial x_i \partial x_j} \Delta x_j.$$

В результате приходим к следующей системе уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 E^{\{0\}}}{\partial x_i \partial x_j} \Delta x_j + \lambda \frac{\partial^2 V^{\{0\}}}{\partial x_i \partial x_j} \Delta x_j = -\frac{\partial E^{\{0\}}}{\partial x_i} - \lambda \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_i}, \\ \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_j} \Delta x_j = V_0 - V^{\{0\}}. \end{cases}$$

К сожалению и эта система уравнений все еще не является линейной из-за неизвестного вспомогательного коэффициента λ , который тоже должен быть определен. Рассматривая его наравне с другими переменными и считая известным некоторое начальное значение λ_0 , приходим к системе линейных уравнений, которую можно решить любым из известных методов:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial^2 E^{\{0\}}}{\partial x_i \partial x_j} + \lambda_0 \frac{\partial^2 V^{\{0\}}}{\partial x_i \partial x_j} \right) \Delta x_j + \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_i} \Delta \lambda = -\frac{\partial E^{\{0\}}}{\partial x_i} - \lambda_0 \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_i}, \\ \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_j} \Delta x_j = V_0 - V^{\{0\}}. \end{cases}$$

Будем искать решение методом последовательных приближений. При каждой итерации коэффициенты системы и свободные члены находятся по последнему найденному решению. Верхний индекс при этом принимает значение последнего найденного приближения. Поиск решения прекращается, когда разность значений некоторого контрольного параметра для двух соседних итераций не превышает заданной величины. В качестве такого параметра удобно использовать объем капли. Как показывает опыт, последовательность приближенных решений очень быстро сходится. Обычно достаточно от трех до пяти последовательных итераций, чтобы объемы отличались не более чем на 10^{-5} мм³.

Метод приближенного решения

При построении алгоритма решения удобнее считать, что решение ищется не для заданного объема, а для заданного веса. Вместо объема в этом случае мы должны будем подставить величину $\rho g V$, где ρ – плотность жидкости, g – ускорение свободного падения. Если после этого каждое уравнение поделить на ρg , получим:

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{\rho g} \frac{\partial^2 E}{\partial x_i \partial x_j} + \lambda_0 \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right) \Delta x_j + \frac{\partial V}{\partial x_i} \Delta \lambda = -\frac{1}{\rho g} \frac{\partial E}{\partial x_i} - \lambda_0 \frac{\partial V}{\partial x_i}, \\ \frac{\partial V}{\partial x_j} \Delta x_j = V_0 - V. \end{cases} \quad (1)$$

Верхние индексы в системе уравнений (1), обозначающие номер приближения, мы опустили.

За нулевое приближение принимается форма осесимметричной капли, рассчитанная по методу Адамса [2]. При этом точки поверхности капли, граничащие с твердой опорой, изменяются в соответствии с заданной формой державки.

Если форма сечения державки сильно отличается от круга, то поиск решения ведется постепенно путем плавной деформации опорного контура капли. На рис. 1 показана плавная деформация опорного сечения капли в процессе решения.

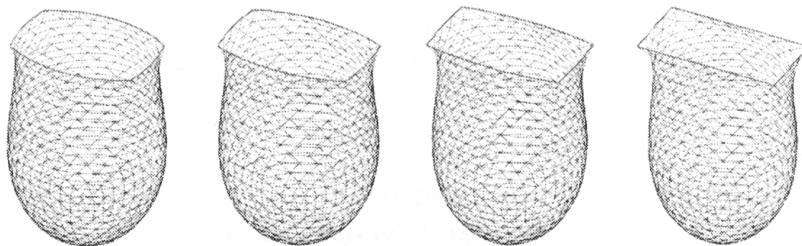


Рис. 1. Постепенная деформация опорного сечения капли к прямоугольному сечению

Для вычисления приближенных функций энергии капли (гравитационной и поверхностной), а также объема капля разбивается на конечные элементы. Последние выбираются в виде пирамид (тетраэдров) с вершинами в начале координат (рис. 2). При этом направления векторов $\vec{r}_i$ считаем заданными. Форма капли, следовательно, будет зависеть только от расстояний r_i точек до начала координат. Это позволяет уменьшить количество неизвестных сразу в три раза.

Объем тетраэдра выражается как функция r_i :

$$V^{\{e\}} = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} r_{ix} & r_{jx} & r_{kx} \\ r_{iy} & r_{jy} & r_{ky} \\ r_{iz} & r_{jz} & r_{kz} \end{vmatrix} = \frac{1}{6} r_i r_j r_k \begin{vmatrix} r_{ix}^0 & r_{jx}^0 & r_{kx}^0 \\ r_{iy}^0 & r_{jy}^0 & r_{jy}^0 \\ r_{kz}^0 & r_{kz}^0 & r_{kz}^0 \end{vmatrix} = \frac{1}{6} r_i r_j r_k \Delta^{\{e\}}. \quad (2)$$

Верхний индекс в фигурных скобках обозначает номер конечного элемента. Через r_{im}^0 обозначены единичные направляющие векторы, а r_i – расстояния от вершин треугольников основания тетраэдров до начала координат. Определитель, составленный из координат направляющих векторов, является величиной постоянной в соответствии с нашим выбором способа задания поверхности капли. Верхний индекс $\{e\}$ в обозначении объема и определителя означает номер конечного элемента.

Полный объем капли находится как сумма объемов отдельных элементов $V = \sum_{\{e\}} V^{\{e\}}$.

Определители, стоящие в правой части выражения для объема конечного элемента, вычисляются один раз по координатам точек нулевого приближения. В дальнейшем они считаются постоянными величинами, и мы имеем очень простое выражение для объема, как функцию произведений координат вершин треугольных элементов на поверхности капли.

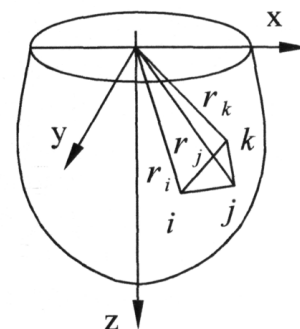


Рис. 2. Конечный элемент в виде тетраэдра

Вычисление площади поверхности капли

Площадь поверхности конечно-элементной модели капли складывается из суммы площадей оснований тетраэдров. Площадь основания тетраэдра найдем из векторного произведения

$$S^{\{e\}} = \frac{1}{2} |\bar{r}_1 \times \bar{r}_2|, \text{ где } \bar{r}_1 = \bar{r}_j - \bar{r}_i \text{ и } \bar{r}_2 = \bar{r}_k - \bar{r}_i.$$

$$S^{\{e\}} = \frac{1}{2} |(\bar{r}_j - \bar{r}_i) \times (\bar{r}_k - \bar{r}_i)| = \frac{1}{2} |\bar{r}_i \times \bar{r}_j + \bar{r}_j \times \bar{r}_k + \bar{r}_k \times \bar{r}_i|,$$

$$\bar{r}_i \times \bar{r}_j = r_i r_j \bar{r}_i^0 \times \bar{r}_j^0, \bar{r}_j \times \bar{r}_k = r_j r_k \bar{r}_j^0 \times \bar{r}_k^0, \bar{r}_k \times \bar{r}_i = r_k r_i \bar{r}_k^0 \times \bar{r}_i^0.$$

Векторные произведения единичных направляющих векторов вычисляются один раз по координатам точек нулевого приближения, поэтому для них полезно ввести самостоятельное обозначение и рассматривать их как константы:

$$\bar{r}_i^0 \times \bar{r}_j^0 = \bar{a}, \bar{r}_j^0 \times \bar{r}_k^0 = \bar{b}, \bar{r}_k^0 \times \bar{r}_i^0 = \bar{c}.$$

Сумму векторов $\bar{r}_i \times \bar{r}_j + \bar{r}_j \times \bar{r}_k + \bar{r}_k \times \bar{r}_i$ обозначим $\begin{bmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \end{bmatrix}$.

С учетом введенных обозначений можем записать

$$A_x = r_i r_j a_x + r_j r_k b_x + r_k r_i c_x, A_y = r_i r_j a_y + r_j r_k b_y + r_k r_i c_y, A_z = r_i r_j a_z + r_j r_k b_z + r_k r_i c_z.$$

Выражение для площади боковой поверхности отдельного элемента и всей конечно-элементной модели капли:

$$S^{\{e\}} = \frac{1}{2} \sqrt{A_x^2 + A_y^2 + A_z^2}, S = \sum_{\{e\}} S^{\{e\}}. \quad (3)$$

Поверхностная энергия капли, деленная на ρg , равна

$$\frac{1}{\rho g} E_s = \frac{\sigma}{\rho g} S = \frac{\sigma}{\rho g} \sum_{\{e\}} S^{\{e\}} = \sum_{\{e\}} \frac{\sigma}{\rho g} S^{\{e\}} = \sum_{\{e\}} c S^{\{e\}}, \quad (4)$$

где c – капиллярный коэффициент.

Гравитационная энергия капли

$$\frac{1}{\rho g} E_g \approx \frac{1}{\rho g} \sum_{\{e\}} \rho g V^{\{e\}} z_c^{\{e\}} = \sum_{\{e\}} V^{\{e\}} z_c^{\{e\}},$$

где $z_c^{\{e\}}$ – вертикальная координата центра тяжести отдельного тетраэдра.

Для тетраэдра $\bar{r}_c = \frac{1}{4}(\bar{r}_i + \bar{r}_j + \bar{r}_k)$, следовательно, $z_c^{\{e\}} = \frac{1}{4}(r_i r_{iz}^0 + r_j r_{jz}^0 + r_k r_{kz}^0)$.

Подставляя полученное ранее выражение для объема, получаем выражение для гравитационной энергии одного конечного элемента:

$$V^{\{e\}} z_c^{\{e\}} = \frac{\Delta^{\{e\}}}{24} (r_i^2 r_j r_k r_{iz}^0 + r_i r_j^2 r_k r_{jz}^0 + r_i r_j r_k^2 r_{kz}^0). \quad (5)$$

Полученные выражения позволяют перейти от абстрактных геометрических параметров x_i в системе уравнений (1) к переменным r_i и вычислить все необходимые для решения системы коэффициенты.

Примеры расчетов

На рис. 3 приведены примеры расчетов формы капли, висящей на круглой и наклонной державке (а), на прямоугольной державке (б) и формы лежащей капли, опирающейся на прямоугольный контур (в).

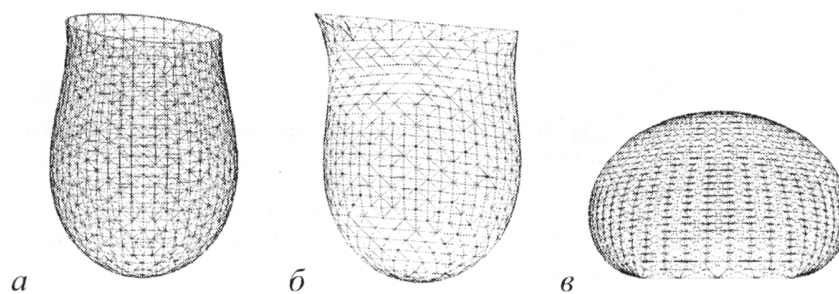


Рис. 3. Примеры расчетов

На рис. 4 приводится пример расчета с высоким разрешением, где поверхность разбивалась на 17 364 элемента 8 731 узлом.

Для капли, подвешенной на прямоугольном основании, была проведена экспериментальная проверка, которая показала хорошее соответствие расчетов с экспериментом.

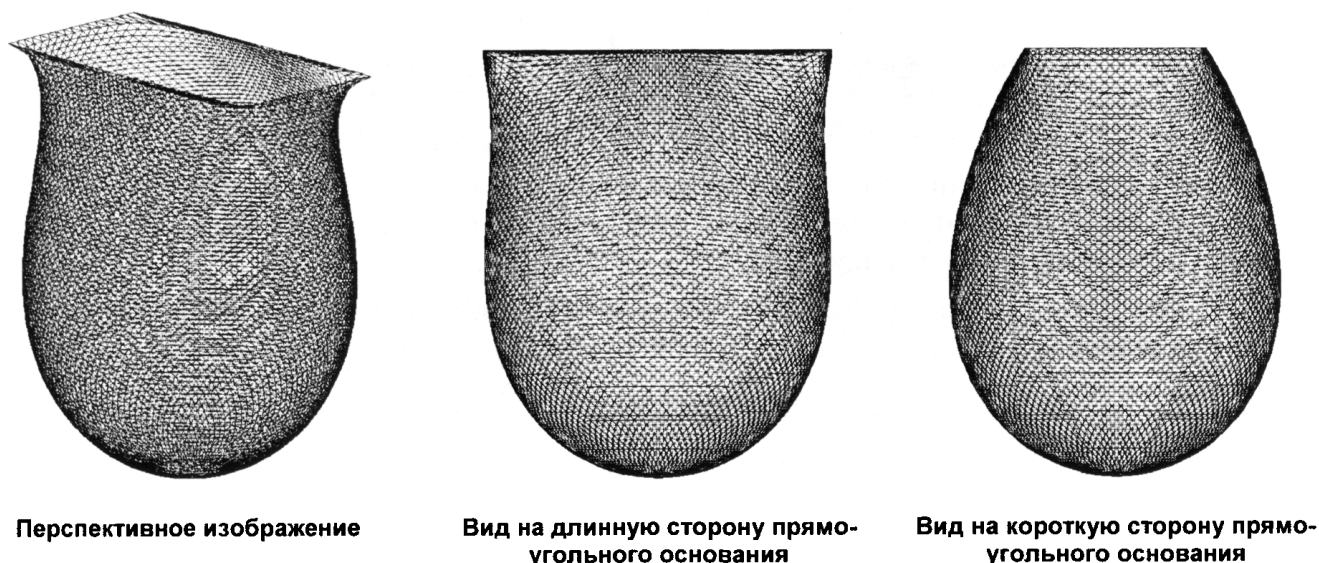


Рис. 4. Высокое разрешение

Моделирование процесса измерения поверхностного натяжения для случая несовершенства формы и ориентации державки капли

Координаты осевых сечений капли определялись при помощи программы «Форма», реализующей описанный выше метод расчета. Координаты находились для двух сечений, проведенных через минимальный и максимальный диаметры сечения державки. Затем по этим координатам по методике, описанной в [3], рассчитывалось поверхностное натяжение. Несовершенства формы капли приводят к появлению погрешностей в оценке поверхностного натяжения. Конечно, погрешности зависят и от размеров используемых конечных элементов. Меньшие элементы, позволяя получить большую точность, в то же время повышают вычислительную сложность и серьезно увеличивают время счета. В то же время, даже для самых мелких из использованных элементов количество точек на профиле капли получается значительно меньше того, что может быть получено в реальном эксперименте. Поэтому мы сравнивали полученные значения коэффициента поверхностного натяжения не с табличным значением для данной жидкости, а с тем значением, которое было получено при обработке расчетного профиля неискаженной капли, подвешенной на круглой горизонтальной державке.

На рис. 5 приведены результаты расчета погрешностей в определении поверхностного натяжения, связанных с несовершенством формы державки. Они получены для капли воды ($\sigma = 72,8$ мН/м), подвешенной на державке в форме эллипса с параметрами: большая полуось 1,681 мм, малая полуось 1,668 мм, эксцентриситет 0,1217 (такие параметры имела одна из державок в натурном эксперименте).

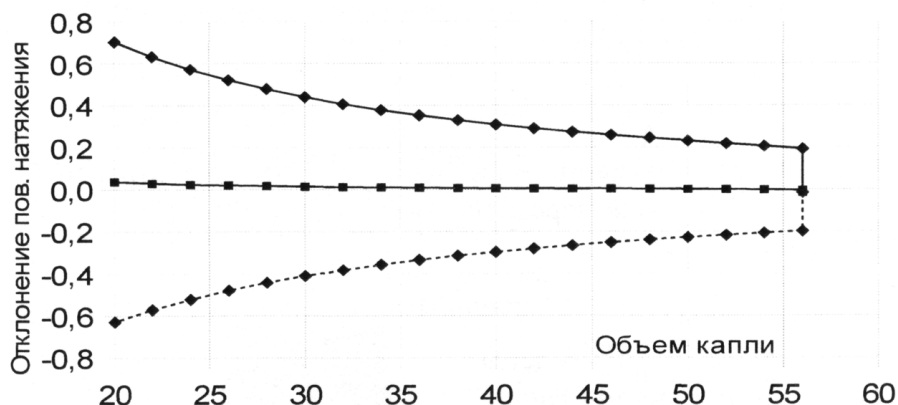


Рис. 5. Отклонение оценок поверхностного натяжения от «истинного» значения (в мН/м) в зависимости от объема капли (мм³). Верхняя кривая – значения, полученные обработкой профиля капли, проходящего через короткую ось опорного эллипса. Нижняя кривая – для профиля, проходящего через длинную ось эллипса. Кривая в центре – средние значения

Из рис. 5 видно, что для данного капилляра погрешность измерения поверхностного натяжения, связанная с неточностью его изготовления, наиболее существенна для малых капель и

уменьшается с увеличением объема капли тем медленнее, чем больше этот объем. Другой важный вывод заключается в том, что средние значения поверхностного натяжения, полученные по форме двух взаимно перпендикулярных сечений, практически совпадают с точными значениями.

На рис. 6 приведены результаты расчета погрешностей в определении поверхностного натяжения для капли, висящей на круглой, но наклонной державке (наклон державки $1,4^\circ$). Такая державка проектируется на горизонтальную плоскость в виде эллипса. Расчет сделан для вертикальных сечений, содержащих большую и малые оси этого эллипса.

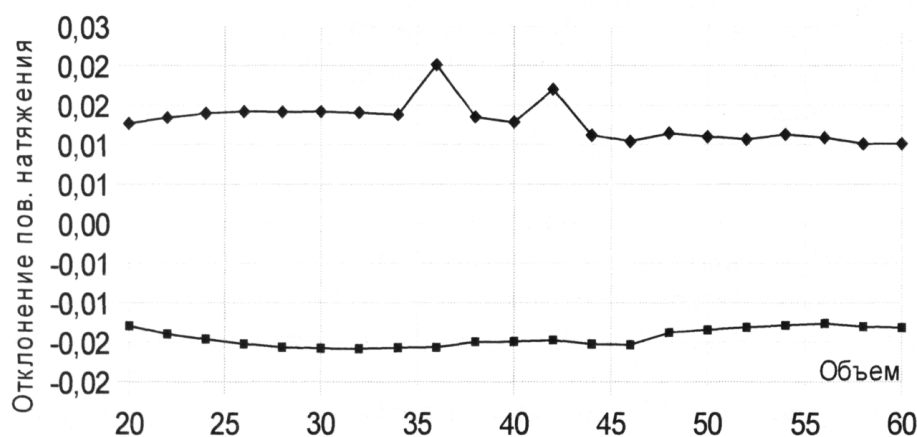


Рис. 6. Отклонение измеренного значения поверхностного натяжения от «истинного» значения (в мН/м) в зависимости от объема капли (мм³). Верхняя и нижняя кривые получены обработкой профилей капли, проходящих через короткую и длинную оси эллипса соответственно

Несмотря на то, что наклон в $1,4^\circ$ весьма большой и должен быть замечен при настройке установки, погрешность, связанная с ним, не превышает 0,02 мН/м. Кроме того, эта погрешность практически не зависит от объема капли в широком диапазоне размеров.

Заключение

Предложен и программно реализован метод расчета формы поверхности капли, прикрепленной к державке произвольной формы и общего положения. Метод позволяет находить геометрические характеристики (объем, площадь поверхности, форму сечений) висящей капли при несовершенном подвесе и моделировать связанные с таким подвесом погрешности в определении поверхностного натяжения, возникающие в условиях натурных экспериментов.

Результаты моделирования показывают, что наиболее важным фактором, влияющим на точность определения поверхностного натяжения по профилю висящей капли, является нарушение круговой симметрии державки, тогда как отклонение (в разумных пределах) ее плоскости от горизонтальной менее существенно. Кроме того, в ситуациях, когда можно ожидать, что требуемая симметрия подвеса нарушена, желательно определять профиль капли в нескольких проекциях, а полученные для них значения поверхностного натяжения усреднять.

Литература

1. Физические величины: справочник / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др.; под. ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. — М.: Энергоатомиздат, 1991. — 1232 с.
2. Adams, J.C. An attempt to test the theories of capillary action / J.C. Adams. — Cambridge: Deighton, Bell and CO, 1883. — 60 p.
3. Компьютерная обработка изображения в методе определения коэффициента поверхностного натяжения жидкости по форме поверхности капли / В.Г. Речкалов, В.Л. Ушаков, Г.П. Пызин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». — 2010. — Вып. 3. — № 30(206) — С. 83–88.

SIMULATION OF EXPERIMENTS TO MEASURE SURFACE TENSION BY THE SHAPE OF A DROP SURFACE AT THE EXISTANCE OF IRREGULARITY IN ITS HANGER OR BEARING**V.G. Rechkalov¹, V.P. Beskachko²**

We suggest a technique to determine surface shape for a drop suspended to a hanger of an arbitrary form and orientation in space. This technique allows researchers to obtain geometrical characteristics (such as volume, surface area, cross-sectional areas) of the drop suspended to a flawed hanger, and to find experimental errors in determining surface tension that are associated with using such hanger. Our numerical experiments show that the main source of error in determining surface tension is braking of circular symmetry of the hanger.

Keywords: surface tension measurements, the shape of a drop, numerical methods.

References

1. Babichev A.P., Babushkina N.A., Bratkovskij A.M. *et al. Fizicheskie velichiny: spravochnik* [Physical values: a handbook]. Moscow: Energoatomizdat, 1991. 1232 p. (in Russ.).
2. Adams J.C. *An attempt to test the theories of capillary action*. Cambridge: Deighton, Bell and CO, 1883. 60 p.
3. Rechkalov V.G., Pyzin G.P., Ushacov V.L., Beskachko V.P. Kompyuternaya obrabotka izobrazheniya v metode opredeleniya koefficienta poverkhnostnogo natyazheniya zhidkosti po forme poverkhnosti kapli [Computer-driven processing of the liquid drop shape image for determination of surface tension coefficient]. *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mexanika. Fizika»*. 2010. Issue 3. no. 30(206). pp. 83–88. (in Russ.).

Поступила в редакцию 24 октября 2012 г.

¹ Rechkalov Viktor Grigorevich is Cand Sc (Pedagogical), Associate Professor, General and Teoretical Physics Department, South Ural State University

E-mail viktor-rechkalov@mail.ru

² Beskachko Valeriy Petrovich is Dr Sc (Physics and Mathematics) Professor, General and Teoretical Physics Department, South Ural State University

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДЕФОРМАЦИИ ХИРАЛЬНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК¹

С.А. Созыкин², Е.Р. Соколова³, К.А. Тельной⁴, В.П. Бескачко⁵, Г.П. Вяткин⁶

Приводятся результаты квантово-механических расчетов механических свойств хиральных углеродных нанотрубок. Оценены условия, при которых граничными эффектами при моделировании можно пренебречь. Предел прочности, модули Юнга и сдвига находились по энергии деформированных нанотрубок оптимизированной геометрии. Определены предельные деформации нанотрубок, при которых они еще не испытывают разрушения.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, модуль Юнга, модуль сдвига, предел прочности.

Введение. В настоящее время одной из самых перспективных и быстроразвивающихся областей материаловедения является изучение свойств углеродных нанотрубок (УНТ). Эксперименты показывают, что УНТ представляют собой материалы с рекордно высоким значением модуля Юнга (≈ 1 ТПа) [1, 2]. Это обусловлено совершенством их структуры и сильной химической связью между атомами углерода, составляющими нанотрубку. Однако, в силу малости размеров УНТ (диаметр от одного до нескольких десятков нанометров, длина порядка десятков микрометров) подобные эксперименты являются весьма трудоемкими, их результаты носят по большей части лишь качественный характер, не позволяя исследовать детали поведения УНТ при различных видах механического нагружения и связь этого поведения с параметрами трубок. Эти обстоятельства служат стимулом для развития теоретических методов предсказания свойств УНТ и, в частности, методов их компьютерного моделирования. Последние весьма разнообразны и базируются на разных принципах: от классической молекулярной механики до квантовой молекулярной динамики. Применение различных подходов (классического и квантового), а также различных методов внутри этих подходов приводит к тому, что полученные результаты согласуются только по порядку величины [3–6]. Успех в реализации классического подхода сильно зависит от выбора материальных констант и параметров взаимодействия, особенно при состояниях системы, далеких от равновесия. Сами же эти константы и параметры обычно оцениваются подгонкой под имеющиеся опытные данные и поэтому зависят от их состава и качества. Этого недостатка лишены расчеты из первых принципов, для применения которых опытные данные не нужны. Однако они весьма трудоемки. Этим объясняется фрагментарность литературных данных о свойствах УНТ, полученных из первых принципов. Особенно это относится к классу нанотрубок, не обладающих зеркальной симметрией – хиральных.

Целью настоящей работы является исследование деформированных состояний хиральных УНТ первопринципными методами квантовой механики.

Модель. С точки зрения атомистического моделирования углеродные нанотрубки имеют очень большую длину. По этой причине изучение свойств УНТ проводят, используя одно из двух приближений – модель молекулярного кластера или периодические граничные условия. При оценке модулей сдвига для моделирования процессов закручивания УНТ более удобна первая модель, в которой из нанотрубки вырезается фрагмент определенной длины, рассматриваемый как изолированная молекула. Для большей стабильности таких объектов оборванные связи на концах нанотрубки насыщают водородом.

Моделирование свойств УНТ производилось с помощью квантово-механического пакета Firefly [7], в котором реализован ряд полуэмпирических и *ab initio* методов квантовой химии. Ра-

¹ Работа выполнялась при финансовой поддержке Минобрнауки (государственное задание № 2012065)

² Созыкин Сергей Анатольевич – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: sergey.sozykin@gmail.com

³ Соколова Екатерина Романовна – студент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет

⁴ Тельной Константин Александрович – студент, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет

⁵ Бескачко Валерий Петрович – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет

⁶ Вяткин Герман Платонович – профессор, доктор химических наук, член-корреспондент Российской Академии Наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет

нее этот пакет использовался нами при изучении механических свойств зеркальных углеродных нанотрубок [8–10]. Изложенные в работе результаты получены в приближениях Хартри–Фока (предел прочности) и теории функционала электронной плотности (модули Юнга и сдвига). Использовался обменно-корреляционный функционал B3LYP и базисный набор 6-31G.

В данной работе в качестве объектов исследования были выбраны хиральные УНТ с индексами хиральности (5,2), (5,3), (6,2), (7,1), (5,4), (6,3), (6,4), (7,3), (6,5), (7,4), (7,6), перечисленными в порядке увеличения диаметра трубок, изменяющегося в пределах от 0,49 до 0,88 нм. Длины исследуемых моделей варьировались от 1,1 до 2,3 нм и ограничивались доступными нам вычислительными ресурсами (кластер Скиф-Аврора, пиковая производительность 117,64 Тфлоп).

Методика расчета. В рамках классической механики известны следующие выражения для модулей Юнга и сдвига:

$$E = \frac{2\Delta W}{Sl\varepsilon^2} \quad (1)$$

$$G = \frac{2\Delta W}{Sl\gamma^2}, \quad (2)$$

где ΔW – изменение полной энергии при деформации растяжения (кручения), S – площадь поперечного сечения нанотрубки, l – длина нанотрубки, ε – относительное удлинение, γ – угол закрутки.

Алгоритм вычислений механических свойств УНТ состоял в следующем:

1) Проводилась оптимизация геометрии ненапряженной стартовой конфигурации нанотрубки, определялась ее полная энергия и координаты атомов.

2) Создавалась напряженная (деформированная) структура.

3) Производилась оптимизация геометрии нескольких напряженных структур с зафиксированными крайними атомами углерода, которые отличались друг от друга степенью растяжения или закрутки. Для каждой напряженной структуры определялись координаты атомов, полная энергия и ее избыток ΔW по сравнению с недеформированным состоянием. Результатом вычислений являлась зависимость ΔW от деформации. Искомые механические характеристики E и G находились подгонкой выражений (1) и (2) под расчетные зависимости $\Delta W(\varepsilon)$ и $\Delta W(\gamma)$.

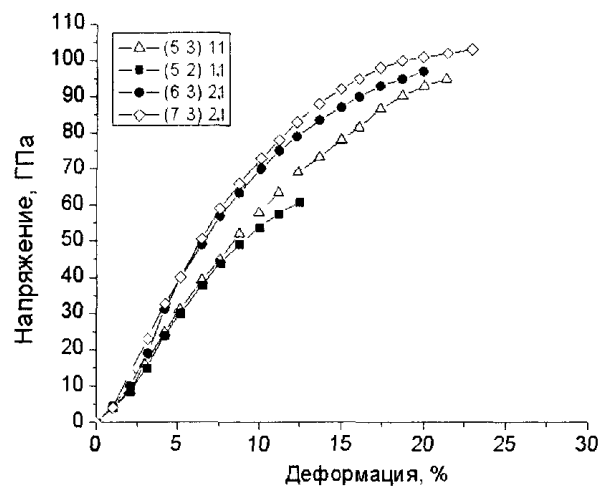


Рис. 1. Зависимости напряжения от деформации для исследованных хиральных нанотрубок

Перед выполнением расчетов механических свойств были сделаны предварительные численные эксперименты методом Хартри–Фока, чтобы выяснить характер зависимости «напряжение–деформация» при растяжении во всем интервале существования нанотрубок. Результаты расчетов для двух «коротких» трубок ((5,2) и (5,3)) длиной $l = 1,1$ нм и двух «длинных» трубок ((6,3) и (7,3)) длиной 2,1 нм представлены на рис. 1. В этих расчетах на каждом шаге 2) упомянутого выше алгоритма длина трубки увеличивалась на 1 % до тех пор, пока трубка не разрывалась. Предел прочности и предельная деформация нанотрубки соответствуют координатам крайней точки каждой из показанных на рисунке кривых. Видно, что за исключением самой тонкой трубки ((5,2)), УНТ имеют примерно одинаковые характеристики при разрыве: предельные деформации около 20 % и предел прочности около 100 ГПа. Для трубки (5,2) эти характеристики составляют 13 % и 61 ГПа соответственно. Возможно, что резкое падение прочностных характеристик есть проявление специфических краевых эффектов, возникающих при моделировании деформированных состояний коротких хиральных трубок (см. ниже).

Кривые «напряжение–деформация» имеют выпуклый вид, поэтому область малых деформаций, где эти зависимости еще можно считать линейными, простирается не дальше 5 %. Поскольку последняя оценка является всего лишь качественной, для контроля во всех приведенных ниже расчетах вычисления проводились в двух различных интервалах деформации растяжения: «умеренных» деформаций ($1 \leq \varepsilon \leq 5$ %, шаг $\Delta\varepsilon = 1$ %) и «малых» деформаций ($0,1 \leq \varepsilon \leq 0,5$ %, шаг $\Delta\varepsilon =$

0,1 %). Выбранные из аналогичных соображений интервалы деформации при кручении составили $0,01 \leq \gamma \leq 0,1$ рад/нм, шаг $\Delta\gamma = 0,02$ рад/нм – для умеренных деформаций и $0,002 \leq \gamma \leq 0,01$ рад/нм, шаг $\Delta\gamma = 0,002$ рад/нм – для малых деформаций.

Результаты и их обсуждение. В связи с использованием модели молекулярного кластера возникает вопрос о роли размерных эффектов. На рис. 2 показано, как изменяются модули Юнга изучаемого семейства УНТ в зависимости от длины l рассматриваемого фрагмента. Из рис. 2, а видно, что при моделировании в режиме умеренных деформаций модули Юнга коротких фрагментов нанотрубок (1,1–1,5 нм) зависят от их индексов хиральности тем сильнее, чем короче трубка. Для $l \approx 1$ нм различия в величинах E составляют около 40 %, однако какой-либо ясной зависимости E от индексов хиральности обнаружить не удастся. Это связано, скорее всего, со своеобразием краевых эффектов, возникающих при моделировании конечного кластера хиральных трубок. Дело в том, что края хиральных трубок «рваные» в том смысле, что граничные атомы, положения которых при моделировании фиксируются, не укладываются на плоскость, перпендикулярную оси трубки, нарушая осевую симметрию граничных условий и самого деформированного состояния модели. К концу указанного интервала длин (при $l \approx 1,5$ нм) разброс значений E заметно уменьшается, а за его пределами (при $l \approx 1,6$ –2,2 нм) этот разброс составляет величину порядка 10 %. Этот результат подтверждается данными, приведенными на рис. 2, б, полученными в режиме малых деформаций. Здесь в интервале l от 1,6 нм до 2,2 нм отличия в модулях Юнга разных нанотрубок также не превышают 10 %, однако значения E всех нанотрубок (кроме трубки (7,6)) монотонно и медленно возрастают с увеличением l . Сравнивая результаты, полученные в режимах умеренных и малых деформаций (рис. 2, а и 2, б), видим, что в последнем режиме оценки для E в целом выше, чем в первом режиме. Скорее всего, это связано с тем, что нелинейная связь между напряжениями и деформациями проявляет себя уже в интервале умеренных деформаций $0 \div 5\%$ (см. рис. 1). Таким образом, при оценке модуля Юнга размерные эффекты, связанные с конечной длиной моделируемого фрагмента УНТ, сильнее всего сказываются для самых коротких из исследованных трубок. Когда их длина превышает 1,6–1,8 нм, эти эффекты если и сказываются, то довольно слабо.

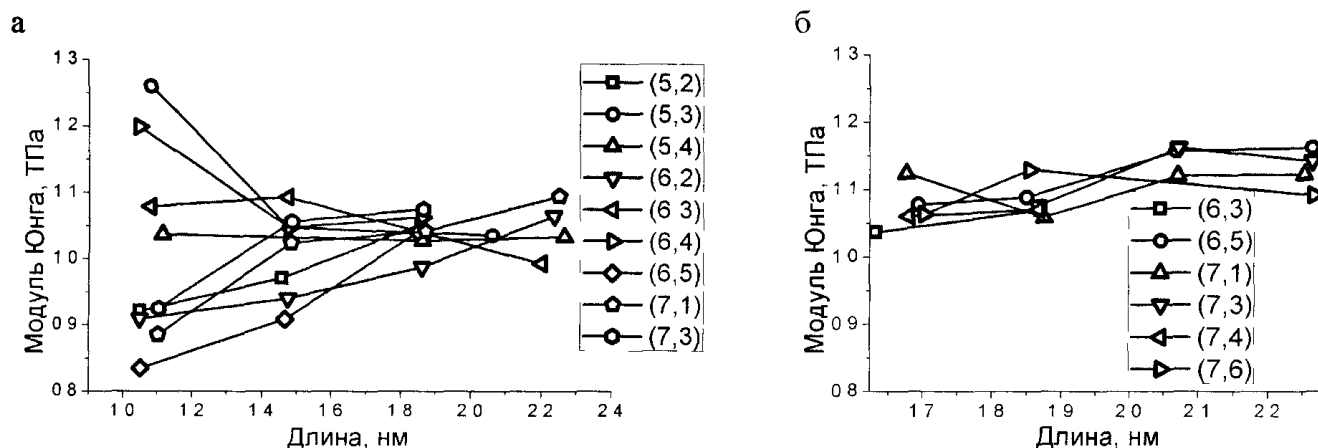


Рис. 2. Зависимости модулей Юнга хиральных нанотрубок от их длины и диаметра полученные: а) в области «умеренных» деформаций, б) в области «малых» деформаций

Результаты расчетов модулей сдвига G представлены на рис. 3. Как и в рассмотренном выше случае модулей Юнга, модули сдвига, полученные в области «умеренных деформаций» (углов закрутки в данном случае), сильно изменяются в зависимости от длины и индексов хиральности деформируемых нанотрубок (рис. 3, а). Прозрачная связь между этими индексами и поведением модуля сдвига здесь также отсутствует и по той же, видимо, причине, что и раньше – ввиду потери симметрии в граничных условиях. В области малых деформаций разброс значений модулей сдвига несколько меньше, как и при рассмотрении модулей Юнга (см. рис. 3, б и 2, б). При $l \geq 2$ нм величина G слабо зависит от типа и длины нанотрубки, что позволяет предположить, что $G \approx 0,5$ ТПа для всех рассмотренных нанотрубок не слишком малой длины, и, вероятно, для всех достаточно длинных нанотрубок вообще.

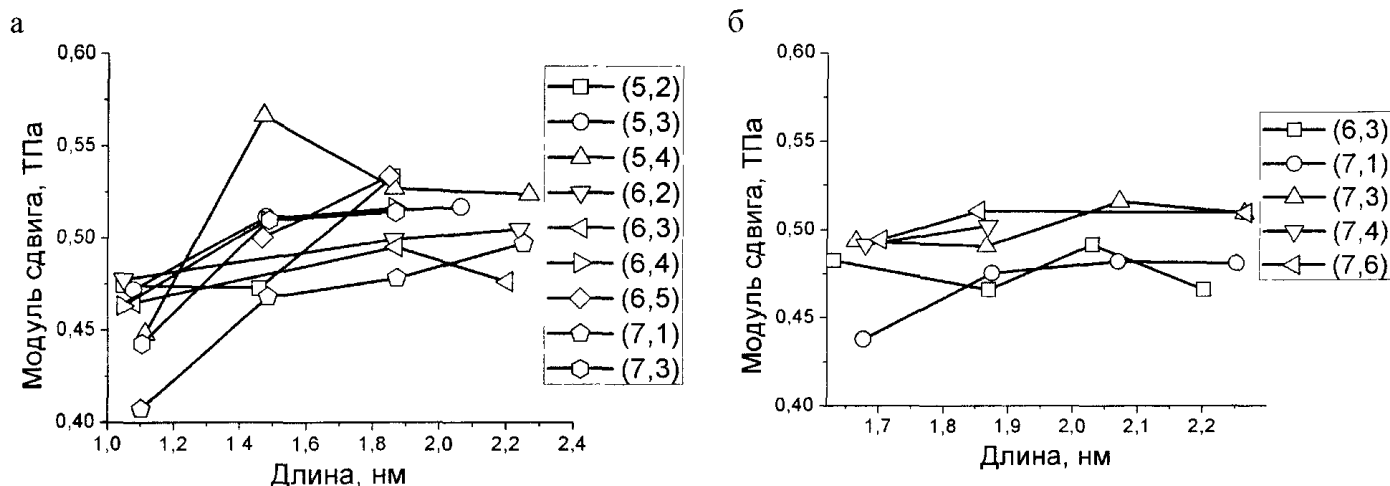


Рис. 3. Зависимости модулей сдвига хиральных нанотрубок от их длины и диаметра полученные: а) в области «умеренных» деформаций, б) в области малых деформаций

Хиральные нанотрубки имеют винтовую структуру, поэтому не очевидно, что их механические свойства одинаковы при закручивании из состояния равновесия «по винту» и «против винта». Выполненные нами численные эксперименты с трубками (5,2) и (6,2), однако, не выявили между модулями сдвига, полученными в противоположных направлениях деформирования, разницы большей, чем погрешности расчета. Учитывая трудоемкость методов первопринципного моделирования, интересно выяснить также вопрос о том, является ли оно необходимым при решении данной задачи или иначе – не может ли эта задача быть решена менее затратными методами, например, с использованием полуэмпирических методов. С этой целью была выполнена серия расчетов механических характеристик УНТ в режиме малых деформаций с использованием метода РМЗ. Выяснилось, что при расчете модулей Юнга его предсказания хорошо согласуются с результатами вычислений из первых принципов, завышая последние примерно на 5%. Однако при расчете модулей сдвига согласие между методами только качественное, причем РМЗ систематически занижает данные первопринципных расчетов на 20–25 %.

Заключение. Таким образом, в ходе проведенного исследования установлено следующее.

1. Модули Юнга хиральных УНТ лежат в интервале 1,04 – 1,16 ТПа. При оценке модуля Юнга размерные эффекты, связанные с конечной длиной моделируемого фрагмента УНТ длиной > 1,6 нм сказываются довольно слабо.
2. Значения модуля сдвига G исследуемых образцов составляют около 0,5 ТПа и имеют тенденция к стабилизации при увеличении длины модели нанотрубки.
3. Несмотря на нарушение симметрии при кручении хиральных нанотрубок «по винту» и «против винта» модули сдвига оказались одинаковыми с точностью до погрешности вычислений.

Литература

1. Krishnan, A. Young's modulus of single-walled nanotubes / A. Krishnan, E. Dujardin, T.W. Ebbesen, P.N. Yianilos, M.J. Treacy // *Physical Review B*. – 1998. – V. 58. – P. 14013–14019.
2. Wong, E.W. Nanobeam mechanics: elasticity, strength, and toughness of nanorods and nanotubes / E.W. Wong, P.E. Sheehan, C.M. Lieber // *Science*. – 1997. – V. 277. – P. 1971–1975.
3. Giannopoulos, G.I. Evaluation of the effective mechanical properties of single walled carbon nanotubes using a spring based finite element approach / G.I. Giannopoulos, P.A. Kakavas, N.K. Anifantis // *Computational Materials Science*. – 2008. – V. 41. – P. 561–569.
4. Kalamkarov, A.L. Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties / A.L. Kalamkarov, A.V. Georgiades, S.K. Rokkam, V.P. Veedu, M.N. Ghasemi-Nejhad // *International Journal of Solids and Structures*. – 2006. – V. 43. – P. 6832–6854.
5. Gupta, S.S. Continuum structures equivalent in normal mode vibrations to single-walled carbon nanotubes / S.S. Gupta, R.C. Batra // *Computational Materials Science*. – 2008. – V. 43. – P. 715–723.
6. Avila, A.F. Molecular Mechanics Applied to Single-Walled Carbon Nanotubes / A.F. Avila, G.S.R. Lacerda // *Materials Research*. – 2008. – V. 11. – C. 325–333.
7. Alex, A. Granovsky, Firefly version 7.1.G, [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)

8. Созыкин, С.А. Механические свойства комплексов углеродной нанотрубки (7,7) с одиночными атомами Li, Na, S и Se / С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – Вып. 7. – № 34(293). – С. 182–185.

9. Тельной, К.А. Структура и механические свойства фторированных углеродных нанотрубок / К.А. Тельной, С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – Вып. 7. – № 34(293). – С. 191–194.

10. Бескачко, В.П. Механические свойства однослойных углеродных нанотрубок. / В.П. Бескачко, С.А. Созыкин, Е.Р. Соколова // Все материалы. Энциклопедический справочник. – 2010. – № 7. – С. 19–23.

QUANTUM-CHEMICAL MODELING OF DEFORMATION PROCESSES OF CHIRAL CARBON NANOTUBES

S.A. Sozykin¹, E.R. Sokolova², K.A. Telnoy³, V.P. Beskachko⁴, G.P. Vyatkin⁵

The paper presents the results of quantum-mechanical calculations of the mechanical properties of chiral carbon nanotubes. We assess the conditions under which the boundary effects can be neglected in the simulation. Tensile strength, Young's modulus and shear energy for optimized nanotubes geometry were identified. The ranges of strains of nanotubes in which they have not experienced fracture. were defined

Keywords: carbon nanotubes, Young modulus, shear modulus, ultimate stress.

References

1. Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T.W., Yianilos P.N., Treacy M.J. Young's modulus of single-walled nanotubes. *Physical Review B*. 1998. Vol. 58. pp. 14013–14019.

2. Wong E.W., Sheehan P.E., Lieber C.M. Nanobeam mechanics: elasticity, strength, and toughness of nanorods and nanotubes. *Science*. 1997. Vol. 277. pp. 1971–1975.

3. Giannopoulos G.I., Kakavas P.A., Anifantis N.K. Evaluation of the effective mechanical properties of single walled carbon nanotubes using a spring based finite element approach. *Computational Materials Science*. 2008. Vol. 41. pp. 561–569.

4. Kalamkarov A.L., Georgiades A.V., Rokkam S.K., Veedu V.P., Ghasemi-Nejhad M.N. Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties. *International Journal of Solids and Structures*. 2006. Vol. 43. pp. 6832–6854.

5. Gupta S.S., Batra R.C. Continuum structures equivalent in normal mode vibrations to single-walled carbon nanotubes. *Computational Materials Science*. 2008. Vol. 43. pp. 715–723.

6. Avila A.F., Lacerda G.S.R. Molecular Mechanics Applied to Single-Walled Carbon Nanotubes. *Materials Research*. 2008. Vol. 11. pp. 325–333.

7. Granovsky A.A. Firefly version 7.1.G, [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)

8. Sozykin S.A., Beskachko V.P. Mekhanicheskie svoystva kompleksov uglerodnoj nanotrubki (7,7) s odinochnymi atomami Li, Na, S i Se [Mechanical properties of the complexes of carbon nanotube (7,7) with single Li, Na, S and Se atoms] *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematika. Mekhanika. Fizika"*. 2012. Issue 7. no. 34(293). pp. 182–185. (in Russ.).

9. Telnoj K.A., Sozykin S.A., Beskachko V.P. Struktura i mekhanicheskie svoystva ftorirovannykh uglerodnykh nanotrubok [Structure and mechanical properties of fluorinated carbon nanotubes] *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematika. Mekhanika. Fizika"*. 2012. Issue 7. no. 34(293). pp. 191–194. (in Russ.).

10. Beskachko V.P., Sozykin S.A., Sokolova E.R. *Mekhanicheskie svoystva odnosloinykh uglerodnykh nanotrubok. Vse materialy. Entsiklopedicheskii spravochnik* (The mechanical properties of single-walled carbon nanotubes. All materials. Encyclopedic Handbook.). 2010. no. 7. pp. 19–23. (in Russ.).

Поступила в редакцию 11 января 2013 г.

¹ Sozykin Sergey Anatolevich is Post-graduate student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University. E-mail: sergey.sozykin@gmail.com

² Sokolova Ekaterina Romanovna is student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

³ Telnoj Konstantin Aleksandrovich is student, Department of Optics and Spectroscopy, South Ural State University

⁴ Beskachko Valeriy Petrovich is Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

⁵ Vyatkin German Platonovich is Dr.Sc. (Chemistry), Professor, Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

РАДИОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТОЛКНОВИТЕЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ ГАЗОВОГО РАЗРЯДА

И.А. Шевяков¹, В.И. Тамбовцев², А.А. Кучуркин³

Представлены исследования на ЭВМ радиофизических свойств низкотемпературной плазмы в переходной области: от состояния ионизованного газа до состояния газовой плазмы. В качестве физической модели рассматривается столкновительный ионизованный газ низкого давления газоразрядной лампы. Рассмотрение полученных модельных зависимостей позволяет сделать вывод о значительном влиянии частоты столкновений электронов на распространение радиоволны через среду. Методами СВЧ диагностики определяется критическая частота для радиопрозрачности.

Ключевые слова: ионизованный газ, столкновительная плазма, разряд низкого давления, комплексная проводимость, волновой вектор, дисперсионное уравнение, радиопрозрачность, СВЧ диагностика.

Введение

Ионизованный газ в различном состоянии занимает большую часть окружающего нас пространства: от слабоионизованного до газовой плазмы. Исследуемый в работе столкновительный ионизованный газ разряда низкого давления в своём объеме содержит чередующиеся области с различными радиофизическими свойствами. Научный и практический интерес представляет исследование области перехода между ионизованным газом и плазменным состоянием. В рамках феноменологического подхода на примерах предложенных физических моделей рассматриваются именно свойства среды в переходной области. Радиопрозрачность и степень отражения определяются также методами СВЧ диагностики. Полученные результаты радиофизических экспериментов соответствуют данным модельных исследований.

Исследуемая среда

Обратимся к электронной компоненте ионизованного газа, которая определяет физические свойства исследуемой среды. Частота радиопрозрачности должна превышать критическую частоту ω_0 , которая либо равняется электронной плазменной частоте $\omega_p = 2\pi\nu_p$ для идеальной плазмы, либо равняется частоте столкновений электронов ν_e , если превышает величину плазменной частоты [1].

Степень ионизации определяется скоростями прямых и обратных процессов. Условие равновесия ионизации при электронном ударе и рекомбинации при тройных столкновениях имеет вид: $k_1 n_a n_e = k_2 n_i n_e^2$, где n_a , n_i и n_e – концентрации атомов, ионов и электронов; k_1 и k_2 – константы скоростей процессов. Таким же соотношениями определяется равновесие при термической ионизации – происходят идентичные процессы.

В термодинамически равновесной среде концентрация заряженных частиц определяется формулой Саха. Формула также применима при детальном равновесии в стационарном случае [2]. Запишем формулу Саха для концентрации электронов n_e :

$$n_e = (2\pi m_e)^{3/4} (kT)^{1/4} P_0^{1/2} h^{-3/2} \exp\left(-\frac{\chi_r}{2kT}\right), \quad (1)$$

где m_e – масса электрона, χ_r – энергия ионизации, h – постоянная Планка, T – кинетическая температура, P_0 – давление нейтрального газа.

В смеси газов рассматривается легкоионизируемая компонента, концентрация которой n_0 . Естественно, что $n_e \leq n_0$. Но, если не хватает легкоионизируемой компоненты, то пополнение

¹ Шевяков Игорь Андреевич – инженер-конструктор, Опытнo-Конструкторское Бюро, ОАО Челябинский Радиозавод «Полёт»
E-mail: regnlager@mail.ru

² Тамбовцев Владимир Иванович – доктор физико-математических наук, профессор Приборостроительного факультета, Южно-Уральский государственный университет
E-mail: tamboval@mail.ru

³ Кучуркин Артём Александрович – инженер, Мечел Сервис Глобал
E-mail: matan_gus@list.ru

электронной концентрации происходит за счёт следующей по степени ионизации компонентой. В расчёте используется температура электронов, которая в газоразрядной плазме превышает 10^4 К. Температура «тяжёлой» компоненты (ионы, атомы и молекулы) не достигает 400 К.

Столкновительный ионизованный газ (СИГ) – это трёхкомпонентная среда электронов, ионов и атомов (молекул) с относительно малой степенью ионизации. Радиус Дебая–Хюккеля – δ характеризует масштаб квазинейтральности или электрической неоднородности СИГ (здесь и далее предполагается, что параметры приводятся в усреднённом виде). Кулоновское взаимодействие частиц мало, в сравнении с kT , при выполнении неравенства: $e/4\pi\epsilon_0\delta < kT/e$, где ϵ_0 – электрическая постоянная (уравнения представлены в СИ). Основными характеристиками СИГ являются ν_e – частота столкновений электронов и плазменная частота:

$$\omega_p = \left(\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m_e} \right)^{1/2}. \quad (2)$$

Плазменные колебания могут развиваться и существовать на интервале между двумя столкновениями $\tau_e = 1/\nu_e$.

Характерные параметры для ионизованного газа и газовой плазмы:

$$\begin{aligned} \omega_p \tau_e > 1, \delta \ll L, N_\delta \gg 1 & \text{ – газовая плазма;} \\ \omega_p \tau_e < 1, \delta \ll L, \tau_M = \epsilon_0/\sigma, N_\delta \gg 1 & \text{ – ионизованный газ.} \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь L – линейный масштаб исследуемой среды, N_δ – количество заряженных частиц в сфере Дебая, τ_M – максвелловское время установления квазинейтральности (для СИГ связано с ν_e), σ – коэффициент электропроводности. При малом N_δ – газ становится слабоионизованным, и тепловое движение «маскирует» действие кулоновских сил. Также при $\nu_e > \omega_p$ электроны сталкиваются с частицами газа столь часто, что характер их движения определяется газодинамическими, а не электрическими силами [3].

Характер поведения электронов в целом определяется дифференциальным уравнением движения (относительно координаты Z):

$$m_e \frac{d^2 z_e}{dt^2} = -eE_z + \nu_e m_e \frac{d(z_0 - z_e)}{dt} + \frac{e^2 n_e}{\epsilon_0} (z_0 - z_e). \quad (4)$$

Последнее слагаемое в представленной форме определяет наведённое поле за счёт динамо-электрического процесса, например, в ударной волне, но здесь это не рассматриваем. Если исключить влияние внешнего поля E и массового движения газа, получается дифференциальное уравнение с плазменной частотой ω_p (2).

В рамках феноменологического подхода радиофизические свойства исследуемой среды описываются материальными уравнениями среды. Диэлектрические свойства среды характеризуются относительной диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\omega)$, а проводящие свойства – проводимостью $\sigma(\omega)$. В переходной области применимы комплексные характеристики. Комплексная проницаемость ϵ в мнимой части содержит проводимость: $\epsilon = \epsilon - i\sigma/(\epsilon_0\omega)$, что связано с наличием «токов потерь».

Представим проводимость в комплексной форме: $\sigma = \sigma_r - i\sigma_i$, где мнимая часть характеризует диэлектрические свойства среды. Рассмотрим материальное уравнение для плотности тока: $j = \sigma E$, где $j = en_e u$. Запишем уравнение движения в комплексной форме для электронов (5), имеющих скорость $u(t) = U \exp(i\omega t)$:

$$m_e \frac{du(t)}{dt} = i\omega m_e u(t) = -eE - \nu_e m_e u(t), \quad (5)$$

Из материального уравнения и уравнения движения получаем действительную – σ_r и мнимую – σ_i компоненты комплексной проводимости:

$$\sigma_r = \frac{e^2 n_e}{m_e} \frac{\nu_e}{\nu_e^2 + \omega^2}; \quad \sigma_i = \frac{e^2 n_e}{m_e} \frac{\omega}{\nu_e^2 + \omega^2}, \quad (6)$$

Распространение волны через исследуемую среду

Считаем, что выполняются условия (4) для длины волны: $\lambda > \delta$. Распространение СВЧ поля в ионизованном газе описывается уравнениями макроскопической электродинамики [4].

Применив операцию *rot* к первому уравнению Максвелла и исключив магнитную составляющую, получаем уравнение волны с частотой ω для слоя за фронтом УВ для поперечных составляющих электрического поля:

$$\frac{d^2 E_{xy}(t, z)}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2} E_{xy}(t, z) = \frac{i\omega\sigma}{\epsilon_0 c^2} E_{xy}(t, z), \quad (7)$$

Здесь z – продольная и x, y – поперечные координаты.

Решением (7) является плоская волна:

$$E_{xy}(t, z) = E_0 \exp i(\omega t - kz), \quad (8)$$

где $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число.

Представим k в комплексной форме: $k = \beta - i\alpha$, где β – фазовая постоянная, α – постоянная затухания. Подставляя (8) в (7), получаем для k :

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{1 + \frac{\sigma_i}{\epsilon_0 \omega} - i \frac{\sigma_r}{\epsilon_0 \omega}}, \quad (9)$$

Подставив из (2) ω_p , а из (6) σ_r и σ_i , получим дисперсионное уравнение:

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{v_e^2 + \omega^2} - i \frac{\omega_p^2 v_e}{(v_e^2 + \omega^2)\omega}}, \quad (10)$$

А. Проведём анализ уравнения (10) для случая, когда $\omega \gg v_e$ и для $v_e < \omega_p$. Пренебрегаем явно малой величиной v_e^2 , получаем:

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \left(1 + i \frac{v_e}{\omega}\right)}. \quad (11)$$

1. При $\omega > \omega_p$ и $\beta \gg |\alpha|$ волна распространяется с малым затуханием:

$$\alpha = \frac{v_e}{2c} \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)^{-1/2}. \quad (12)$$

Фазовая скорость волны превышает скорость света:

$$u_f = \frac{\omega}{\beta} = c \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)^{-1/2}. \quad (13)$$

2. При частоте, вблизи критической ω_0 , происходит резкое изменение постоянной затухания и фазовой постоянной (см. рис. 1) [5]. При $v_e = 0$ (условно) переход происходит при плазменной частоте: $\omega = \omega_0 = \omega_p$, когда $k = 0$.

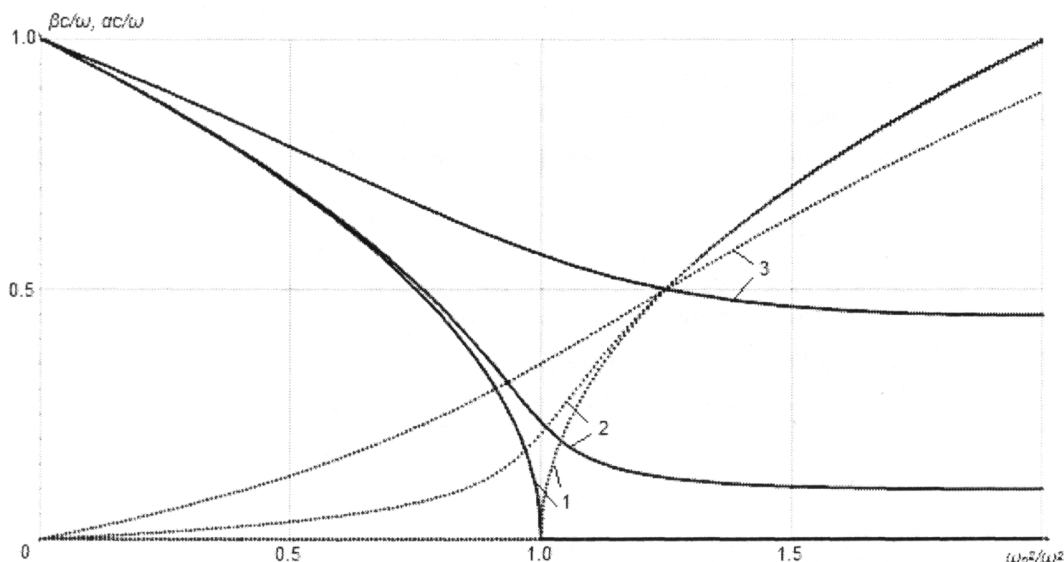


Рис. 1. Зависимости β и α (пунктир) от ω в безразмерных координатах при $\omega \gg v_e$: 1) $v_e/\omega = 0$; 2) $v_e/\omega = 0,1$; 3) $v_e/\omega = 0,5$

3. При $\omega_p > \omega$ волна затухает. Глубина скин-слоя δ

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{c}{\omega \sqrt{\omega_p^2 / \omega^2 - 1}} = \frac{\lambda}{2\pi \sqrt{\omega_p^2 / \omega^2 - 1}}, \quad (14)$$

где λ – длина волны в вакууме.

Если размер плазменного слоя l превышает δ , то волна не проникает в среду и отражается от её границы. Здесь затухание волны не может быть связано с тепловыми потерями.

Б. Рассмотрим пример другого важного случая, когда $v_e \gg \omega_p$. Столкновения не дают развиться плазменным колебаниям. Как показано в (3), СИГ не является плазмой, но кулоновское взаимодействие играет важную роль.

1. При $\omega \gg v_e$ из под корня в (10) удаляем малую мнимую часть. Возвращаемся к варианту А.1 – распространение волн с малым затуханием с фазовой скоростью, превышающей скорость света:

$$u_f = \frac{\omega}{\beta} = c \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + v^2} \right)^{-1/2}. \quad (15)$$

2. Критическая частота находится из (10) когда $k = 0$. (рис. 2) [4]. Следовательно, при $v_e \gg \omega_p$ критическая частота равняется частоте столкновений: $\omega_0 = v_e$.

3. При $\omega \ll v_e$ волна затухает. В выражении (11) под корнем следует оставить единицу и мнимую часть:

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - i \frac{\omega_p^2}{v_e \omega}}. \quad (16)$$

Из (16) можно определить α , если $\beta = 0$. Для скин-слоя [5] получаем:

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\lambda \sqrt{\omega v_e}}{2\pi \omega_p}, \quad (17)$$

Затухание в рассматриваемом случае вызвано активными потерями (в отличие от А.3), что сказывается на эффекте отражения.

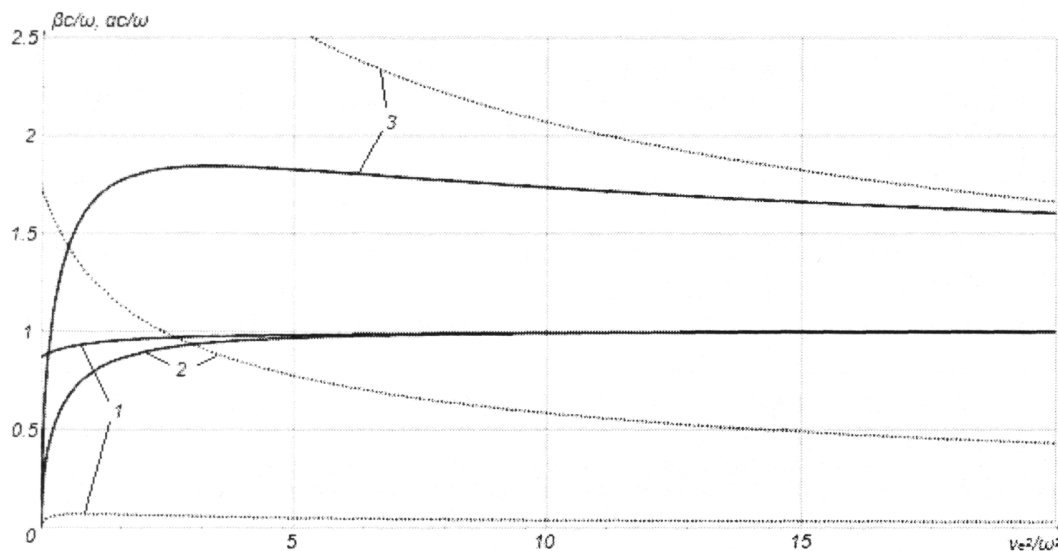


Рис. 2. Зависимости β и α (пунктир) от ω в безразмерных координатах при $v_e \gg \omega_p$: 1) $\omega_p / \omega = 0,5$; 2) $\omega_p / \omega = 2$; 3) $\omega_p / \omega = 5$

СВЧ диагностика исследуемой среды

Лампа дневного света размещается перед рупорной антенной СВЧ передатчика. Параметры СВЧ генератора на диоде Гана: мощность излучения 10 мВт, частота 9 ГГц (генератор не пере-страивается), длина волны 33 мм. Приёмная рупорная антенна располагается либо за лампой – исследования на поглощение, либо под углом, близким к 180° – исследования на отражение. Отметим, что отражённый сигнал практически отсутствует. Детектор приёмника выполнен на СВЧ-

диоде. Параметры цеховой газоразрядной лампы: напряжение питания 220 В, частота 50 Гц, мощность лампы 60 Вт, габариты 36 мм х 120 см. Рабочим веществом служит смесь газов с парами ртути [6]. Характерная структура тлеющего разряда низкого давления представлена на рис. 3.

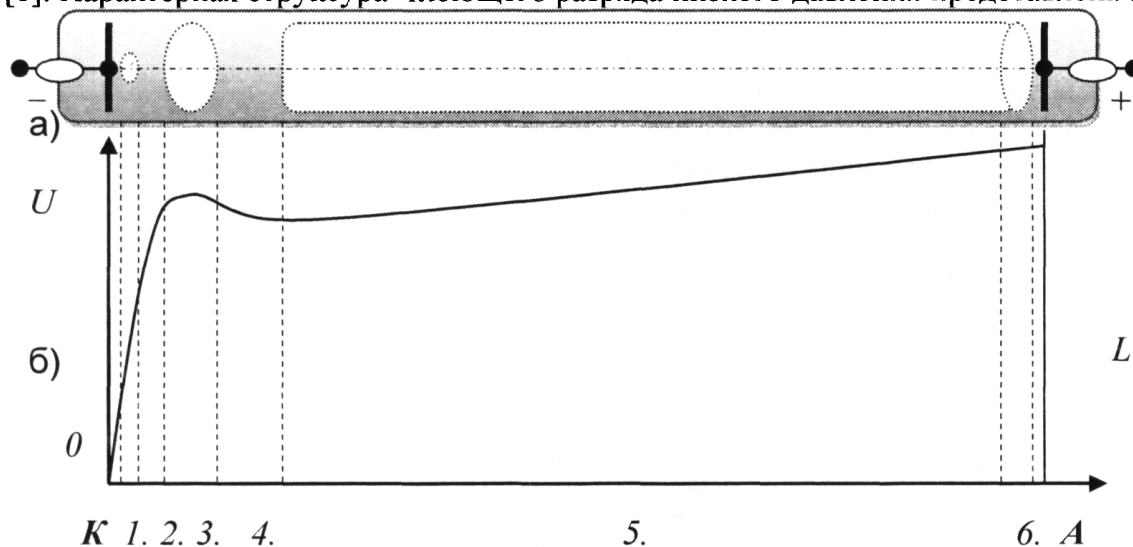


Рис. 3. Тлеющий разряд низкого давления в лампе постоянного тока: а) внешний вид тлеющего разряда; б) изменение потенциала U на тлеющем разряде по длине L лампы. Обозначения: К – катод, А – анод, 1 – катодное пятно, 2 – катодное тёмное пространство, 3 – яркое отрицательное свечение, 4 – фарадеево тёмное пространство, 5 – положительный тлеющий столб, 6 – анодное свечение.

На рис. 4 представлено изменение сигнала СВЧ при просвечивании. Отражённый сигнал не наблюдается: среда либо поглощает, либо прозрачна.

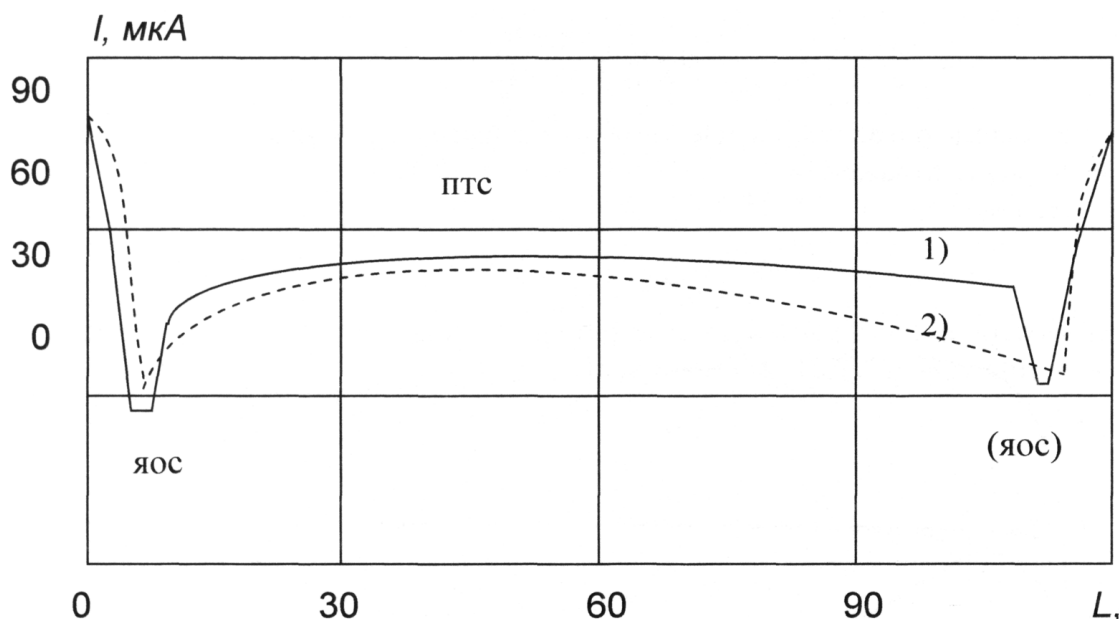


Рис. 4. Изменение сигнала СВЧ просвечивания газоразрядной лампы – с разрешения М.А. Ивановой и В. Неручева: 1) лампа дневного света; 2) биологически активная лампа Флора

Лампы питаются переменным напряжением, что симметричную форму получаемых сигналов относительно длины L . Максимальному поглощению соответствуют наиболее яркие участки отрицательного свечения (яос). С учётом эффекта «подсвечивания» следует считать, что именно в этих участках образуется плазма. В центральной же области для положительного тлеющего столба (птс), скорее всего, ионизованный газ плазменного состояния не достигает. Температура электронов в столбе разряда низкого давления достигает 10^4 К, а средняя по сечению концентрация электронов $n_e = 10^{16} \text{ м}^{-3}$ [1]. Расчётное значение плазменной частоты по (3) – $\nu_p = 10^9$ Гц.

Проведены опыты с перестраиваемым генератором на установке измерителя коэффициента стоячей волны по напряжению «Р2-61» [1]. Диапазон от 8 до 12 ГГц. На рис. 5 представлена схема измерительного блока. В стандартный волновод, сечение которого 23 мм х 10 мм, вертикально

встраивается ультрафиолетовая ртутная лампа низкого давления FL 16 6/black: длина трубки 190 мм, диаметр – 16 мм. Внутреннее пространство заполнено аргоном ($P_{Ar} = 400$ Па) с парами ртути ($P_{Hg} = 0,93$ Па). В колбу впаяны парные электроды. Положительный столб разряда занимает пространство от фарадеевского темного пространства катода и до анода. Лампа зафиксирована в волноводной вставке между согласованной нагрузкой и трактом отраженной волны в пучности (на частоте 8 ГГц). Сигнал выводится на индикатор. Результаты представлены на рис. 6 и рис. 7.

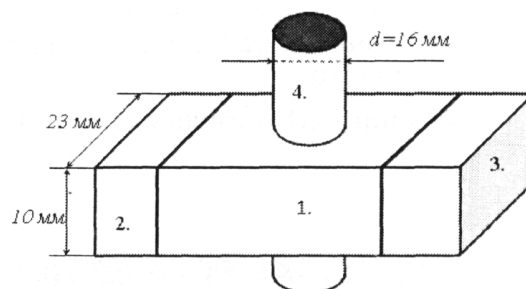


Рис. 5. Измерительный блок:
1) волноводная вставка; 2) тракт отражённой волны; 3) согласованная нагрузка; 4) лампа УФ

В обычном состоянии (лампа выключена, рис. 6) газовый промежуток является радиопрозрачным во всём частотном диапазоне. При включении лампы играет роль торцевой согласованной нагрузки, если СИГ электрического разряда не прозрачен. При достижении критической частоты условие согласования изменяются, что приводит к увеличению мощности выходного сигнала (рис. 7).

Отсечка в опыте на критической частоте определяется для момента, когда При включенной лампы за счёт отражения от тлеющего разряда, отмечается увеличение мощности более чем на 10 дБ. Это наблюдается при 10,3 ГГц. Следовательно, частота столкновений $\nu_e < 10,3 \cdot 10^9$ Гц, превышает расчётное значение $\nu_p = 10^9$ Гц.

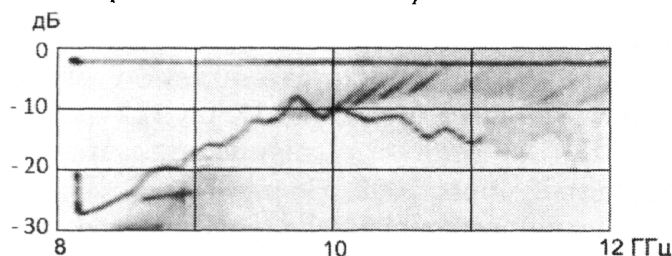


Рис. 6. На фото представлена диаграмма при выключенной УФЛ

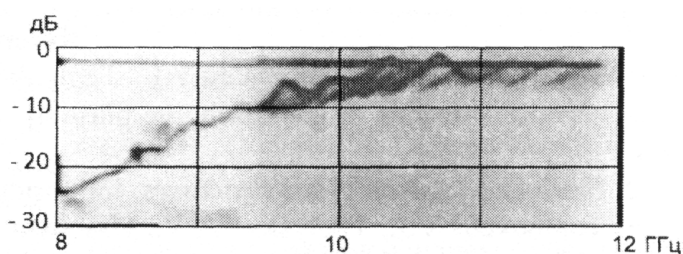


Рис. 7. На фото представлена диаграмма при включенной УФЛ. Усиление сигнала на 10 дБ на частоте 10,3 ГГц

Основные результаты

Показано, что трехкомпонентный ионизованный газ в зависимости от частоты столкновений электронов обладает различными физическими свойствами: от слабоионизованного до плазменного состояния. В работе представлена физическая модель исследуемой среды. Вычислительный эксперимент позволяет исследовать изменения основных параметров среды в переходной области.

Показано аналитически, что критическая частота для радиопрозрачности равняется частоте столкновений для газа, не достигшего плазменного состояния, – это соответствует физическим представлением. В плазменном состоянии критическая частота равняется электронной плазменной частоте.

Модельные эксперименты в СВЧ-диапазоне с лампой дневного света показали, что в большей части объёма – в области «птс», не достигается плазменного состояния, но в областях «яос» ионизованный газ переходит в плазменное состояние. Для ультрафиолетовой лампы на частоте 10,3 ГГц (и выше до 12 ГГц) возникает отражение электромагнитной волны, – ионизованный газ находится в плазменном состоянии.

Литература

1. Кучуркин, А.А. СВЧ диагностика газоразрядной плазмы / А.А. Кучуркин, В.И. Тамбовцев, А.В. Тепляков // Труды МФТИ. – 2010. – Т. 2, № 37. – С. 122–125.
2. Bradt, H.V. Astrophysics Processes / H.V. Bradt. – Cambridge University Press, 2008. – 536 p.
3. Тамбовцев, В.И. Ионный звук в частично ионизованном газе / В.И. Тамбовцев, А.В. Тепляков, В.К. Усачёв // Вестник Челябинского государственного университета. Физика. – 2008. – Вып. 3. – № 25. – С. 74–77.
4. Голант, В.Е. СВЧ методы исследования плазмы / В.Е. Голант. – М.: Наука, 1968. – 328 с.

5. Шевяков, И.А. О радиопрозрачности естественного и возмущённого газа слоя D основания ионосферы / И.А. Шевяков, В.И. Тамбовцев, А.А. Кучуркин // Труды XI международной конференции «Физика и технические приложения волновых процессов». – Екатеринбург: УрФУ. – 2012. – С. 297–299.

6. Рохлин, Г.Н. Разрядные источники света / Г.Н. Рохлин. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 720 с.

RADIO PHYSICAL PROPERTIES OF COLLISIONAL PLASMA IN GAS DISCHARGE

I.A. Shevyakov¹, V.I. Tambovcev², A.A. Kuchurkin³

The paper presents the research of radio physical properties of low-temperature plasma in the transition region using the computer: from the state of the ionized gas to the state gas plasma. The analysis of simulative dependence proves the significant effect of electron collision frequency on radio wave propagation through the medium. The collision ionized low-pressure gas of discharge lamp is considered as physical model. The critical frequency for radio transparency is determined by microwave diagnostics.

Keywords: *ionized gas, collisional plasma, radio transparency, microwave diagnostics, wave vector, the complex conductivity, low pressure discharge.*

References

1. Kuchurkin A.A., Tambovcev V.I., Teplyakov A.V. SVCh diagnostika gazorazryadnoj plazmy [Microwave diagnostics of gas-discharge plasma]. *Trudy MFTI*. 2010. Vol. 2, no. 37. pp. 122–125. (in Russ.).

2. Bradt H.V. *Astrophysics Processes*. Cambridge University Press, 2008. 536 p.

3. Tambovcev V.I., Teplyakov A.V., Usachyov V.K. Ionnyj zvuk v chastichno ionizovannom gaze [Ion sound in a partially ionized gas]. *Vestnik Chelyabinskogo gosudarstvennogo universiteta. Fizika*. 2008. Issue 3. no. 25. pp. 74–77. (in Russ.).

4. Golant V.E. SVCh metody issledovaniya plazmy [Ultra-high frequency methods of plasma analysis]. Moscow: Nauka, 1968. 328 p. (in Russ.).

5. Shevyakov I.A., Tambovcev V.I., Kuchurkin A.A. O radioprozrachnosti estestvennogo i voz-mushhyonnogo gaza sloya D osnovaniya ionosfery [Dynamoelectric processes in electric power systems and in lower ionosphere]. *Trudy XI mezhdunarodnoj konferencii «Fizika i texnicheskie prilozheniya vol-novyx processov»* [Physics and engineering applications of wave processes. Proceedings of XI International Conference.]. Ekaterinburg: UrFU. 2012. pp. 297–299. (in Russ.).

6. Rokhlin G.N. *Razryadnye istochniki sveta* [Discharge sources of light]. Moscow: Energoatomizdat, 1991. 720 p. (in Russ.).

Поступила в редакцию 18 декабря 2012 г.

¹ Shevyakov Igor Andreevich is design engineer, Experimental Design Office, Open Joint-Stock Company Chelyabinsk Radio Manufacturing Plant "Polet" ("Flight").

E-mail: regnlager@mail.ru

² Tambovcev Vladimir Ivanovich is Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor of Instrument Engineering Department, South Ural State University.

E-mail: tamboval@mail.ru

³ Kuchurkin Artyom Alexandrovich is Engineer, Mechel Service Global.

E-mail: matan_gus@list.ru

КВАЗИСОБОЛЕВЫ ПРОСТРАНСТВА ℓ_p^m

Д.К. Аль-Делфи¹

Впервые рассмотрены понятия квазибанаховых пространств последовательностей ℓ_p^m , $m \in R$, $p \in (0, +\infty)$. Доказаны аналоги теоремы вложения Соболева. Также рассмотрен квазиоператор Лапласа.

Ключевые слова: квазинормы, квазибанахово пространство, квазисоболевы пространства, квазиоператор Лапласа, квазиоператор Грина.

Введение

Пусть $\Omega \subset R^n$ – ограниченная область с границей класса C^∞ . К настоящему времени хорошо изучены функциональные пространства Соболева $W_p^m(\Omega)$, $m \in \{0\} \cup N$, $p \in [1, +\infty)$; где $W_p^m(\Omega) = L_2(\Omega)$ – пространства Лебега [1]. Также хорошо известна [1] теорема вложения Соболева: при всех $m \in N$, $\ell = 0, 1, \dots, m-1$, $p, q \in [1, +\infty)$ таких, что $\frac{1}{p} + \frac{m-\ell}{n} \leq \frac{1}{q} < 1$, имеют место плотные и непрерывные вложения

$$W_p^m(\Omega) \subset W_q^\ell(\Omega) \quad (1)$$

Нашей задачей является распространение данного результата на квазисоболевы пространства последовательностей

$$\ell_p^m = \left\{ x = \{x_k\} : \sum_{k=1}^{\infty} \left(\lambda_k^{\frac{m}{2}} |x_k| \right)^p < +\infty \right\},$$

где $p \in (0, +\infty)$, $m \in R$, $\{\lambda_k\}$ – монотонно неубывающая последовательность положительных чисел такая, что $\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_k = +\infty$. Статья содержит три части, в первой приводятся основные факты теории квазибанаховых пространств, почерпнутые из [2], а во второй излагаются аналоги теоремы вложения Соболева. В заключение вводится в рассмотрение квазиоператор Лапласа.

1. Квазисоболевы пространства.

Пусть $\mathcal{S}$ – линейное вещественное (простоты ради) пространство. Квазинормированным пространством называется упорядоченная пара $(\mathcal{S}, \|\cdot\|_p)$, где квазинорма $\|\cdot\|_p : \mathcal{S} \rightarrow R$ удовлетворяет следующим аксиомам:

- (i) $\forall x \in \mathcal{S} \quad \|\cdot\|_p \geq 0$, причем $\|\cdot\|_p = 0$ точно тогда, когда $x = 0$, где 0 – нуль пространства $\mathcal{S}$;
- (ii) $\forall x \in \mathcal{S} \quad \forall \alpha \in R \quad \|\alpha x\|_p = |\alpha| \|\cdot\|_p$;
- (iii) $\forall x, y \in \mathcal{S} \quad \|\cdot\|_p \leq \text{const} \left(\|\cdot\|_p + \|\cdot\|_p \right)$, где константа $\text{const} \geq 1$ и не зависит ни от x , ни от y .

В дальнейшем квазинормированное пространство $(\mathcal{S}, \|\cdot\|_p)$ будем отождествлять с линейным пространством $\mathcal{S}$. Последовательность $\{x_k\} \subset \mathcal{S}$ называется сходящейся к $x \in \mathcal{S}$, если

¹ Джавад К Аль-Делфи – аспирант кафедры уравнений математической физики, механико-математический факультет, Южно-Уральский государственный университет, Al-Mustansiriyah University, Багдад, Ирак
E-mail: rassian71@mail.ru

$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_k - x\| = 0$. Этот факт будем записывать так: $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x$. Последовательность называется фундаментальной, если $\lim_{k, r \rightarrow \infty} (x_k - x_r) = 0$.

Пространство $\mathcal{B}$ называется квазибанаховым, если любая фундаментальная последовательность в нем сходится к некоторой точке этого пространства. Отметим сразу, что любое банахово пространство является квазибанаховым, а обратное, вообще говоря, неверно.

Пример 1. Пространства ℓ_p^m – квазибанаховы при всех $p \in (0, +\infty)$, однако они банаховы только при $p \in [1, +\infty)$.

Теорема 1. Квазисоболевы пространства ℓ_p^m , $m \in \mathbb{R}$, $p \in \mathbb{R}_+$, являются квазибанаховыми.

Приведем набросок доказательства. На, очевидно, линейном пространстве ℓ_p^m построим функцию $\| \cdot \|_p^m : \ell_p^m \rightarrow \mathbb{R}$ по формуле

$$\|x\|_p^m = \left(\sum_{k=1}^{\infty} \left(\lambda_k^{\frac{m}{2}} |x_k| \right)^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

Эта функция, очевидно, удовлетворяет аксиомам (i) и (ii) квазинормы. Рассмотрим вектор $y = \left\{ \lambda_k^{\frac{m}{2}} x_k \right\} \in \ell_p$, поэтому $\| \cdot \|_p^m$ удовлетворяет и аксиоме (iii), причем $\text{const} = 2^{\frac{1}{p}}$ при $p \in (0, 1)$, и $\text{const} = 1$ при $p \in [1, +\infty)$ [2].

Рассмотрим фундаментальную в ℓ_p^m последовательность $\{x_k\}$. Ее координатные последовательности $\{x_k^i\}_{k=1}^{\infty}$, $k \in \mathbb{N}$, фундаментальны и в силу полноты $\mathbb{R}$ сходятся к x^k . Полученный предел $x = \{x^k\}$ и будет искомым [2].

2. Теоремы вложения.

Пусть U и F – два квазибанаховых пространства. Будем говорить, что

- U вложено в F , если U подмножество F , то есть $U \subseteq F$;
- U плотно вложено в F , если вдобавок замыкание $\overline{U} = F$;
- U плотно и непрерывно вложено в F , если вдобавок для всех $u \in U$ $\|u\|_U \geq C_p \|u\|_F$,

где $C \in \mathbb{R}_+$ – некоторая константа не зависящая от u .

Теорема 2. При всех $p \in \mathbb{R}_+$, $m \in \mathbb{R}$, $\ell \leq m$, имеют место плотные и непрерывные вложения ℓ_p^m в ℓ_p^ℓ .

Доказательство. Вложение $\ell_p^m \subset \ell_p^\ell$ очевидно. Докажем плотность вложения.

Пусть $x \in \ell_p^\ell$, рассмотрим последовательность $\{x_k\}$, где $x_1 = (x^1, 0, \dots)$, $x_2 = (x^1, x^2, 0, \dots)$, ... $x_k = (x^1, x^2, \dots, x^k, 0, \dots)$, ... Очевидно, $\{x_k\} \in \ell_p^\ell$, причем $x_k \rightarrow x$ в квазинорме ℓ_p^ℓ . Непрерывность вложения тоже очевидна.

3. Квазиоператор Лапласа.

Пусть U и F – квазибанаховы пространства, линейный оператор $L : U \rightarrow F$ назовем непрерывным, если его область определения $\text{dom } L = U$ и $\|u\|_U \geq C_p \|Lu\|_F$ при всех $u \in U$, а $C \in \mathbb{R}_+$ – константа, не зависящая от u . Линейный оператор $L \in \mathcal{L}(U; F)$ назовем топлинейным изоморфизмом, если существует обратный оператор $L^{-1} \in \mathcal{L}(F; U)$.

Введем в рассмотрение квазиоператор Лапласа $\Lambda x = \{\lambda_k x_k\}$, где $x \in \ell_p^m$.

Теорема 3. При всех $p \in R_+$ и $m \in R$ квазиоператор Лапласа $\Lambda: \ell_p^{m+2} \rightarrow \ell_p^m$ – тоplineйный изоморфизм.

Доказательство. Непрерывность оператора Λ очевидна в силу

$$\| \Lambda x \|_p^m = \left(\sum_{k=1}^{\infty} \left(\lambda_k^{m+1} |x_k| \right)^p \right)^{\frac{1}{p}} = \|x\|_p^{m+2}.$$

Построим обратный оператор $\Lambda^{-1}x = \{ \lambda_k^{-1} x_k \}$ (квазиоператор Грина). Очевидно, $\Lambda^{-1} \Lambda x = x$ при всех $x \in \ell_p^{m+2}$ и $\Lambda \Lambda^{-1} x = x$ при всех $x \in \ell_p^m$. Далее,

$$\| \Lambda^{-1} x \|_p^{m+2} = \left(\sum_{k=1}^{\infty} \left(\lambda_k^{m+1} |x_k| \right)^p \right)^{\frac{1}{p}} = \|x\|_p^m.$$

Замечание. Обобщение всех приведенных выше результатов на случай комплексных квазисоболевых пространств ℓ_p^m очевидно.

В заключение автор выражает свою искреннюю благодарность профессору Г.А. Свиридюку за постановку задачи и проявленный интерес к работе.

Литература

1. Трибель, Х. Теория интерполяций, функциональные пространства, дифференциальные операторы / Х. Трибель. – М: Мир, 1980. – 664 с.
2. Al-Delfi, J.K. Quasi-Banach space for the sequence space ℓ_p , where $0 < p < 1$ / J.K. Al-Delfi // Journal of college of Education (Iraq – Baghdad). Mathematics. – 2007. – № 3. – P. 285–295.

Поступила в редакцию 28 февраля 2013 г.

QUASI-SOBOLEV SPACES ℓ_p^m

Jawad K. Al-Delfi¹

Firstly, the notion of quasi-Banach spaces for the sequence spaces ℓ_p^m , $m \in R$, $p \in (0, +\infty)$ has been considered and we have been proved analogs of the Sobolev embedding theorem. Also, the notion quasi-operator Laplace has been considered.

Keywords: quasi-norm, Quasi-Banach space, Quasi-Sobolev spaces, Laplace' Quasi-operator, Green' Quasi-operator.

Reference

1. Triebel H. *Interpolation theory, function spaces, differential operators*. Moscow: Mir, 1980. 664 p. (in Russ).
2. Al-Delfi J.K. Quasi-Banach space for the sequence space ℓ_p , where $0 < p < 1$. *Journal of college of Education (Iraq – Baghdad). Mathematics*. 2007. no. 3. pp. 285–295.

¹ Jawad K. Al-Delfi is Post-graduate student, Equations of Mathematical Physics Department, South Ural State University, Al-Mustansiriyah University, Baghdad Iraq
E-mail: rassian71@mail.ru

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$

Э.Н. Рыбина¹, А.Н. Брызгалов², Л.М. Свирская³, В.В. Викторов⁴,
П.В. Волков⁵, Д.Е. Живулин⁶

Исследованы образцы твердых растворов системы $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$, полученные методом направленной кристаллизации. Определены параметры решётки и магнитная восприимчивость кристаллов в зависимости от концентрации Nd^{3+} . Неодим замещает иттрий и в связи с близостью ионных радиусов данных элементов не наблюдается изменений параметров решётки твёрдых растворов. Магнитная восприимчивость подчиняется закону Кюри. Высказано предположение об антиферромагнитном упорядочении ближайших катионов f - f электронов Nd^{3+} в пределах парных ближайших соседей.

Ключевые слова: твердый раствор; алюмоиттриевый гранат, легированный неодимом; магнитная восприимчивость твердых растворов.

Введение

Среди лазерных кристаллов гранатов широкое практическое применение нашел иттрий-алюминиевый гранат (ИАГ), активированный ионами неодима $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$. На основе этого кристалла создаются импульсные и непрерывные лазеры, применяемые в промышленных технологиях: связи, геодезии, медицине и других наукоёмких технологиях. В настоящее время методика выращивания монокристаллов $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$ хорошо разработана и допускает легирование ионами Nd^{3+} концентрацией 0,2–1,4 ат. %. Результаты теоретических и экспериментальных работ [1–6], посвященных исследованию спектроскопических и физических характеристик в кристаллах со структурой граната, показали отсутствие систематического анализа, направленного на выявление влияния примеси неодима на магнитные и физико-химические свойства с различными концентрациями Nd^{3+} в кристаллах этого класса.

Целью настоящей работы является изучение влияния примеси неодима на магнитную восприимчивость и тонкую структуру твёрдых растворов $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$.

Теория для Nd^{3+} разработана Эллиотом и Стивенсом [7]. Этот $4f^3$ -ион имеет 10-кратно вырожденное основное состояние $^4I_{9/2}$, а следующее возбуждённое ($^4I_{11/2}$) лежит примерно на 300 К выше. Кристаллическое поле расщепляет основное состояние на пять дублетов, причем только один из них заселён при температурах порядка 200 К и ниже. Таким образом, как и в большинстве редкоземельных ионов, Nd^{3+} имеет дублетное основное состояние [8].

Исследование кристаллов

Исследования проводили на кристаллах $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$ в виде пластин 20×20 мм и толщиной до 3 мм в концентрационной области 0,15–1,23 ат. % Nd^{3+} , выращенных методом направленной кристаллизации. Для измерений магнитной восприимчивости и параметров решетки ИАГ образцы измельчали в агатовой ступке до среднего размера кристаллика 0,1 мкм.

¹ Рыбина Эльвира Нафизовна – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический Университет

E-mail elvirarybina@mail.ru

² Брызгалов Александр Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет

E-mail brizgalovan@cspu.ru

³ Свирская Людмила Моисеевна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет

E-mail svirskayalm@mail.ru

⁴ Викторов Валерий Викторович – доктор химических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет

E-mail viktorovvv@cspu.ru

⁵ Волков Петр Вячеславович – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет

E-mail peter-007@mail.ru

⁶ Живулин Дмитрий Евгеньевич – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический Университет

E-mail zhivulin-74@mail.ru

Параметр кристаллической решетки образцов определяли методом рентгеноструктурного анализа на установке ДРОН-3М ($Co_{ка}$) с приставкой для цифровой регистрации данных. Расчет и индентирование рентгенограмм проводили, используя электронную базу данных порошковой дифрактометрии ICSD. Для повышения точности определения параметров кристаллической решетки съемку дифрактограммы проводили на брэгговских углах $\Theta > 60$ [4] в дискретном режиме с шагом по углу 0,01 и временем экспозиции в каждой точке 5 с. Погрешность в определении параметра решетки не превышала $\pm 0,018 \text{ \AA}$.

Магнитную восприимчивость образцов измеряли по методу Фарадея [10]. Известно [8], что все редкоземельные металлы (РЗМ) относятся к парамагнетикам ланжевенновского типа. ИАГ без примеси неодима диамагнитен, тогда как оксид неодима парамагнитен. При образовании твёрдого раствора $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$ по мере увеличения концентрации неодима парамагнитная восприимчивость растворов с учетом поправки подчиняется закону Кюри:

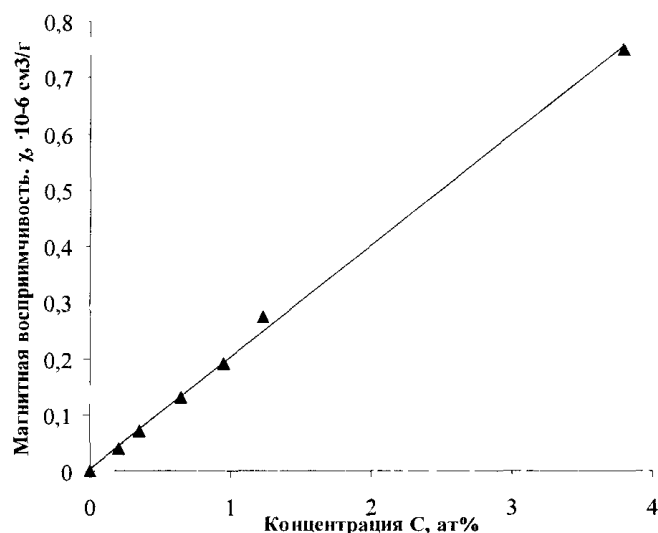
$$\chi_{Nd^{3+}} = \frac{N_{Nd^{3+}} \mu_B^2 \mu_{эф}^2}{3kT}, \quad (1)$$

где $N_{Nd^{3+}}$ – число катионов неодима в единице массы твёрдого раствора, μ_B – магнетон Бора ($\mu_B = 9,27 \cdot 10^{-21}$ эрг/Гс), $\mu_{эф}$ – эффективный магнитный момент катиона Nd^{3+} , T – абсолютная температура [11].

Поскольку $f-f$ -обменная модель лучше всего описывает свойства РЗМ, то основное внимание уделяли результатам исследований по описанию экспериментальных данных магнитной восприимчивости χ .

По данным рентгеноструктурного анализа зависимость параметров решетки ИАГ от концентрации Nd^{3+} практически отсутствует и находится в пределах $12,010 \pm 0,0018 \text{ \AA}$. Последнее, вероятно, связано с тем, что Nd^{3+} в ИАГ замещает катионы Y^{3+} , т. к. ионные радиусы Nd^{3+} и Y^{3+} отличаются менее чем на 2 % и соответствуют 0,99 $\text{\AA}$ и 0,97 $\text{\AA}$. В свою очередь, ионный радиус Al^{3+} равен 0,57 $\text{\AA}$, что почти в два раза меньше, чем у Nd^{3+} [12].

На рисунке представлена зависимость магнитной восприимчивости твёрдых растворов от концентрации Nd^{3+} при комнатной температуре. Из рисунка видно выполнение закона Кюри, однако эффективный магнитный момент катионов Nd^{3+} , вычисленный согласно экспериментальным данным несколько ниже, чем теоретический расчет (см. таблицу).



Изменение магнитной восприимчивости
в твердых растворах $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$
от концентрации Nd^{3+} при комнатной температуре

Эффективные магнитные моменты, рассчитанные из экспериментальных данных по формуле (1)

Концентрация C , ат. %	Магн. воспр. χ , $\times 10^{-6} \text{ см}^3/\text{г}$	Концентрация катионов Nd^{3+}	Эффективный магнитный мо- мент $\mu_{эф}$, эрг/Гс
0,2	0,04	$8,36 \cdot 10^{18}$	2,63
0,35	0,07	$14,63 \cdot 10^{18}$	2,63
0,65	0,13	$27,17 \cdot 10^{18}$	2,63
0,95	0,19	$39,72 \cdot 10^{18}$	2,63
1,23	0,245	$51,42 \cdot 10^{18}$	2,63
3,79	0,75	$158,44 \cdot 10^{18}$	2,63

При этом теоретически вычисленный магнитный момент Nd^{3+} равен $3,62\mu_B$. Вычисления проводили следующим образом. Эффективный магнитный момент $\mu_{эф}$ определяли по выражению

$$\mu_{эф} = g\mu_B \sqrt{J(J+1)}, \quad (2)$$

где J – полный момент, определяемый в соответствии с правилом Хунда, $J = L - S$, поскольку слой заполнен менее чем наполовину. Для иона Nd^{3+} с электронной конфигурацией $4f^3 5s^2 p^6$ суммарное орбитальное квантовое число $L = 6$, а суммарный спин $S = 3/2$. Поэтому $J = 9/2$. При этом фактор Ланде электронной оболочки, определяемый формулой (3) [13], принимает значение $g = 0,727$:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (3)$$

Следовательно, согласно (2) теоретическое значение $\mu_{\text{эфф}} = 3,62\mu_B$, что согласуется с [13].

Различие между экспериментальным и теоретическим значениями магнитных моментов, по-видимому, связано с f - f взаимодействиями ближайших катионов Nd^{3+} в пределах пар. В лёгких редких землях, к числу которых относится неодим, реализуется антиферромагнитный обмен электронов через кислород. Глубокое расположение $4f$ -слоёв практически исключает их перекрытие в решётке, поэтому прямое f - f -обменное взаимодействие отсутствует [12]. Однако возможно косвенное s - f -обменное взаимодействие.

Обсуждение результатов

Измерены параметры решётки и магнитная восприимчивость твёрдых растворов $(\text{Y}_{1-x}\text{Nd}_x)_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$. Показано, что параметры решётки не зависят от концентрации неодима, что связано, вероятно, с тем, что Nd^{3+} изоморфно замещает Y^{3+} , а ионные радиусы Nd^{3+} и Y^{3+} практически одинаковы. Значения эффективных магнитных моментов согласно экспериментальным данным не зависят от концентрации Nd^{3+} и составляют $2,63\mu_B$, тогда как теоретически рассчитанный по правилу Хунда эффективный магнитный момент Nd^{3+} соответствует $3,62\mu_B$. Меньшее значение экспериментальных эффективных магнитных моментов по сравнению с теоретическим, по-видимому, связано с антиферромагнитным f - f взаимодействием ближайших соседних пар.

Литература

1. Каминский, А.А. Лазерные кристаллы / А.А. Каминский. – М.: Наука, 1975. – 256 с.
2. Каминский, А.А. Физика и спектроскопия лазерных кристаллов / А.А. Каминский. – М.: Наука, 1986. – 272 с.
3. Лазер на кристаллах иттрий-эрбий-алюминиевого граната // Труды ИОФАН. – 1989. – Т. 19. – С. 41–46.
4. Оптически плотные активные среды // Труды ИОФАН. – 1990. – Т. 26. – С. 22–29.
5. Спектроскопия оксидных кристаллов для квантовой электроники // Труды ИОФАН. – 1991. – Т. 29. – С. 56.
6. Judd–Ofelt analysis of the Er^{3+} ($4f^{11}$) absorption intensities in Er^{3+} -doped garnets / Sardar D.K., Bradley W.M., Perez J.J. *et al.* // J. Appl. Phys. – 2003. – V. 93, № 5. – P. 2602–2607.
7. Bertrand, J.A. Polynuclear complexes with hydrogen-bonded bridges. 4. Structure and magnetic properties of dinuclear copper(II) complexes of amino alcohols / J.A. Bertrand, E. Fujita, D.G. VanDerveer // Inorg. Chem. – 1980. – V. 19, № 7. – P. 2022–2028.
8. Карлин, Р. Магнетохимия / Р. Карлин; пер. с англ. – М.: Мир, 1989. – 400 с.
9. Crystal Structure and Magnetic Properties of *catena*- μ -Sulfato-[N,N'-bis(2-hydroxyethyl)dithiooxamido(2-)-N,O,S:N',O',S']bis[aquacopper(II)]: A Chain of Copper(II) Dinuclear Units with a 594-cm^{-1} Singlet-Triplet Separation and a $5.61\text{-\AA}$ Copper-Copper Distance / J.J. Girerd, S. Jeannin, Y. Jeannin, O. Kahn // Inorg. Chem. – 1978. – V. 17, № 11. – P. 3034–3040.
10. Калинников, В.Т. Введение в магнетохимию. Метод статистической магнитной восприимчивости в химии / В.Т. Калинников, Ю.В. Ракитин. – М.: Наука, 1980. – 302 с.
11. Вонсовский, С.В. Магнетизм / С.В. Вонсовский. – М.: Наука, 1971. – 1032 с.
12. Самсонов, Г.В. Физико-химические свойства окислов: справочник / Г.В. Самсонов. – М.: Металлургия, 1978. – 472 с.
13. Киттель, Ч. Введение в физику твёрдого тела / Ч. Киттель. – М.: Наука, 1978. – 791 с.

THE MAGNETIC PROPERTIES OF SOLID SOLUTIONS $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$

E.N. Rybina¹, A.N. Bryzgalov², L.M. Svirskaya³, V.V. Viktorov⁴, P.V. Volkov⁵, D.E. Zhivulin⁶

Samples of solid solutions $(Y_{1-x}Nd_x)_3Al_5O_{12}$ system obtained by directional crystallization are analyzed. The parameters of the lattice and the magnetic susceptibility of the crystals as function of the Nd^{3+} concentration are determined. Neodymium replaces yttrium and due to the proximity of the ionic radii of these elements there is no change in the lattice parameters of solid solutions. The magnetic susceptibility obeys the Curie's law. It is suggested that there is an antiferromagnetic ordering of the cations closest f - f electrons within Nd^{3+} pairs of the nearest neighbors.

Keywords: solid solution, Yttrium Aluminum Garnet doped with neodymium, magnetic susceptibility of solid solutions.

References

1. Kaminskij A.A. *Lazernye kristally* [Laser crystals]. Moscow: Nauka, 1975. 256 p. (in Russ.).
2. Kaminskij A.A. *Fizika i spektroskopiya lazernykh kristallov* [Physics and Spectroscopy of Laser Crystals]. Moscow: Nauka, 1986. 272 p. (in Russ.).
3. Lazer na kristallakh ittrij-erbij-alyuminiyevogo granata [Yttrium-erbium-aluminum garnet laser]. *Trudy IOFAN*. 1989. Vol. 19. pp. 41–46. (in Russ.).
4. Opticheski plotnye aktivnye sredy [Optically dense active media]. *Trudy IOFAN*. 1990. Vol. 26. pp. 22–29. (in Russ.).
5. Spektroskopiya oksidnykh kristallov dlya kvantovoj elektroniki [Spectroscopy of oxide crystals for quantum electronics]. *Trudy IOFAN*. 1991. Vol. 29. p. 56. (in Russ.).
6. Sardar D.K., Bradley W.M., Perez J.J., Gruber J.B., Zandi B., Hutchinson J.A., Trussell C.W., Kokta M.R. Judd–Ofelt analysis of the Er^{3+} ($4f^{11}$) absorption intensities in Er^{3+} -doped garnets. *J. Appl. Phys.* 2003. Vol. 93, no 5. pp. 2602–2607. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1543242>
7. Bertrand J.A., Fujita E., VanDerveer D.G. Polynuclear complexes with hydrogen-bonded bridges. 4. Structure and magnetic properties of dinuclear copper(II) complexes of amino alcohols. *Inorg. Chem.* 1980. Vol. 19, no. 7. pp. 2022–2028.
8. Karlin R. *Magnetokhimiya* [Magnetochemistry]. Moscow: Mir, 1989. 400 p. (in Russ.). [Carlin R.L. *Magnetochemistry*. Springer-Verlag, 1986. 328 p.].
9. Girerd J.J., Jeannin S., Jeannin Y., Kahn O. Crystal Structure and Magnetic Properties of catena- μ -Sulfato-[N,N'-bis(2-hydroxyethyl)dithiooxamido(2-)-N,O,S:N',O',S']bis[aquacopper(II)]: A Chain of Copper(II) Dinuclear Units with a 594-cm^{-1} Singlet-Triplet Separation and a $5.61\text{-\AA}$ Copper-Copper Distance. *Inorg. Chem.* 1978. Vol. 17, no. 11. pp. 3034–3040.
10. Kalinnikov V.T., Rakitin Yu.V. *Vvedenie v magnetokhimiyu. Metod statisticheskoy magnitnoy vospriimchivosti v khimii* [Introduction to Magnetochemistry. Statistical method of magnetic susceptibility in Chemistry]. Moscow: Nauka, 1980. 302 p. (in Russ.).
11. Vonsovskij S.V. *Magnetizm* [Magnetism]. Moscow: Nauka, 1971. 1032 p. (in Russ.).
12. Samsonov G.V. *Fiziko-khimicheskie svoystva oksidov: spravochnik* [Physico-chemical properties of oxides: A Handbook]. M.: Metallurgiya, 1978. 472 p. (in Russ.).
13. Kittel Ch. *Vvedenie v fiziku tvyordogo tela* [Introduction to Solid State Physics]. Moscow: Nauka, 1978. 791 p. (in Russ.).

Поступила в редакцию 29 ноября 2012 г.

¹ Rybina Elvira Nafizovna is Post-Graduate Student, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University
E-mail: elvirarybina@mail.ru

² Bryzgalov Aleksandr Nikolaevich is Dr Sc (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University
E-mail: brizgalovan@cspu.ru

³ Svirskaya Lyudmila Moiseevna is Cand Sc (Physics and Mathematics), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University
E-mail: svirskayalm@mail.ru

⁴ Viktorov Valeriy Viktorovich is Dr Sc (Chemistry), Professor, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University
E-mail: viktorovvv@cspu.ru

⁵ Volkov Petr Vyacheslavovich is Post-Graduate Student, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University
E-mail: peter-007@mail.ru

⁶ Zhivulin Dmitry Evgenievich is Post-Graduate Student, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University
E-mail: zhivulin-74@mail.ru

МЕЖЧАСТИЧНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ В СИСТЕМЕ ЖЕЛЕЗО–УГЛЕРОД И ПРОБЛЕМА МАРТЕНСИТНОГО ПЕРЕХОДА

П.В. Чирков¹, А.А. Мирзоев²

Проведено атомистическое компьютерное моделирование тетрагонального искажения решетки в системе железо–углерод при мартенситном переходе с использованием современных потенциалов погруженного атома. Показано, что существующие ЕАМ-потенциалы позволяют неплохо описать концентрационную зависимость величины тетрагональности, но не могут правильно описать аналогичную зависимость для температуры перехода.

Ключевые слова: мартенситный переход, молекулярно-динамическое моделирование, потенциал погруженного атома.

Введение

В настоящее время железо и его сплавы с углеродом (стали) являются важнейшими материалами современной техники. При быстром охлаждении (закалке) сталей происходит образование мартенситной (тетрагональной структуры), сопровождающееся существенным ростом твердости и прочности. Изучение кристаллической решетки мартенсита, впервые приведенное Курдюмовым Г.В. [1], показало, что мартенситу присуща тетрагональная решетка, которую следует рассматривать как несколько растянутую решетку ОЦК-железа. Возникновение тетрагональности и бездиффузионный характер мартенситного ГЦК-ОЦК превращения был объяснен Бейном [2], который обратил внимание, что ГЦК решетку можно превратить в объемно-центрированный куб при небольшом сжатии вдоль оси OZ и растяжении в направлениях осей OX и OY (бейновская деформация). Октапоры ГЦК решетки вместе с располагающимися в них атомами углерода переходят только в октапоры типа «Z» решетки ОЦК-железа. При этом все атомы углерода растягивают решетку в одном Z-направлении, и она из кубической превращается в тетрагональную.

Хотя схема Бейна весьма наглядна, она не может объяснить факт длительного сохранения тетрагональности и необратимости мартенситного перехода. С. Зинер [3], а позднее А.Г. Хачатурян и Г.А. Шаталов [4] предложили термодинамическую теорию упорядочения атомов углерода в октаэдрических порах z-типа, по которой преимущественное расположение атомов углерода в «Z»-порах соответствует равновесному состоянию, то есть минимуму свободной энергии. Указанные авторы рассчитали упругую энергию ОЦК кристалла с внедренными атомами. Теория Хачатуряна показывает, что для комнатной температуры при концентрации углерода 2,55 ат. % должно наблюдаться скачкообразное возрастание степени тетрагональности: от 1 (кубическая решетка) до 1,012. При меньших содержаниях углерода для комнатной температуры теория предсказывает образование кубического мартенсита. Однако сравнение экспериментальных данных [5, 6] по степени тетрагональности мартенсита и теоретических результатов показало, что при содержании углерода менее, чем 1 ат. % теория дает сильно завышенные значения. Особенно сильным это различие становится ниже 0,55 ат. % углерода. Можно заключить, что в представленном виде теория Хачатуряна является неточной по отношению к сталям, содержащим менее 1 ат. % углерода. Перспективным методом решения данных затруднений можно считать атомистическое компьютерное моделирование.

В работе [7] Удянским был предложен комбинированный подход, заключающийся в использовании термодинамической теории Хачатуряна для расчета температуры образования мартенсита, в котором атомы углерода находятся в октопорах одного направления. Для вычисления энергии упругих деформаций вместо статистической теории среднего поля было использовано атомистическое моделирование методом минимизации энергии с потенциалами погруженного атома (ЕАМ). Такой подход позволил улучшить результаты теории Хачатуряна при низких концентра-

¹ Чирков Павел Владимирович – магистр, кафедра общей и теоретической Физики, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: p.chirkow@yandex.ru

² Мирзоев Александр Аминулаевич – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

циях углерода, в частности получено минимальное значение концентрации углерода, при котором образуется тетрагональная структура. Однако применение метода минимизации энергии позволяет исследовать только статические характеристики перехода. В связи с этим, нам кажется интересным применение ЕАМ-потенциалов, использованных в [6] для моделирования методом молекулярной динамики термодинамических характеристик процесса.

Методы

В работе использован пакет молекулярной динамики LAMMPS с потенциалом погруженного атома. В данной работе были использованы современные потенциалы ЕАМ-типа [8–10].

Потенциал Лау [8] создан для моделирования кластеров вакансия-углерод, при оптимизации его параметров были использованы данные первопринципных расчетов о энергии связи атома углерода с вакансией. Потенциал Бекар [9] предназначен для малых концентраций С, т.к. в нем отсутствует парное взаимодействие углерод-углерод. При его создании использовались результаты *ab initio* моделирования энергии связи атомов углерода в различных конфигурациях в ОЦК-Fe. В потенциале Хепберна [10], так же как и в [9] потенциал для чистого железа взят из работы Менделева [11]. При создании потенциала были использованы результаты моделирования из первых принципов взаимодействия углерода с вакансией и междоузельным атомом.

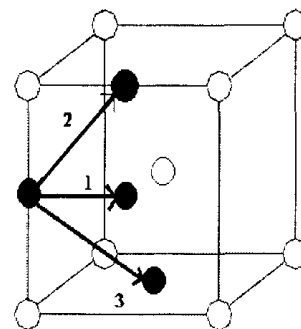


Рис. 1. Три первые координационные сферы октаэдрических междоузлий

Следуя работе [7], энергию упругих деформаций V_{ρ}^{si} можно оценить как

$$V_{\rho}^{si} = E_{\rho}^{rel}(\text{Fe} + 2\text{C}) - E_{\rho}^0(\text{Fe} + 2\text{C}) - 2(\Phi^{rel} - \Phi^0),$$

где $\Phi^0 = E^0(\text{Fe} + 1\text{C}) - E(\text{Fe})$ энергия внедрения атома углерода в кристаллическую решетку, $E(\text{Fe})$ – энергия кристаллической решетки железа, $E_{\rho}^{rel}(\text{Fe} + 2\text{C})$ энергия системы, содержащие атомы Fe и 2 атома С на расстоянии ρ . Величины $E_{\rho}^{rel}(\text{Fe} + 2\text{C})$ и Φ^{rel} вычисляются подобно $E_{\rho}^0(\text{Fe} + 2\text{C})$ и Φ^0 , но после оптимизации геометрии решетки методом минимизации сил и потенциальной энергии системы, которая осуществляется таким образом, чтобы атомы углерода оставались в центрах октаэдрических междоузлий на расстоянии ρ . Первые три возможные конфигурации атомов углерода показаны на рис. 1. Атомы 1, 3 расположены в центрах граней, а 2 – на середине ребра. Расстояния между атомами С в этих случаях соответственно равны: $0,5a_0$, $a_0\sqrt{2}/2$, $a_0\sqrt{3}/2$, где a_0 – параметр решетки ОЦК-железа, не содержащего углерода.

Результаты и обсуждение

На рис. 2 представлены результаты энергии упругих деформаций рассчитанных в рамках

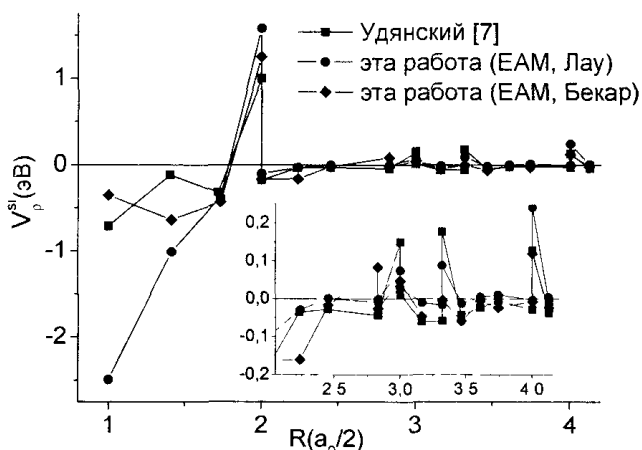


Рис. 2. Энергия упругого взаимодействия. По оси абсцисс – расстояние между атомами углерода в половинах параметра решетки.

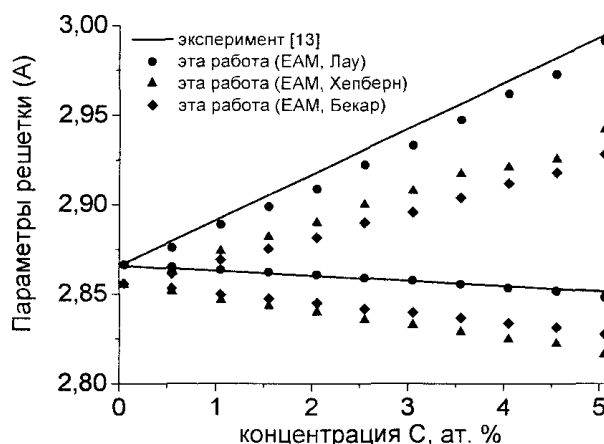


Рис. 3. Зависимость от содержания С постоянных решеток мартенсита, рассчитанные методом минимизации полной энергии системы

уточненной теории среднего поля [7] потенциала Лау и Бекар, результаты для потенциала Хепберна лежат в пределах 3–20 эВ и не указаны на рис. 2. Следует обратить внимание на далекодействующий осциллирующий характер взаимодействия, объясняющийся слабым убыванием поля деформаций кристаллической решетки. Результаты потенциала Лау наиболее близки к работе Удянского.

Наличие на графике двух точек с $R = a_0$, где a_0 - параметр ОЦК решетки в отсутствии атомов углерода, объясняется тем, что возможны две конфигурации атомов углерода на данном расстоянии. В первом случае между атомами С имеется атом Fe, при этом упругое взаимодействие положительно, т.е. соответствует отталкиванию углерода. В другом случае между атомами углерода нет атома железа, тогда энергия слабо отрицательна. Эти два значения энергии показывают избирательность заполнения октоэдрических междоузлий углеродом.

Помимо микроскопической величины энергии упругих деформаций была рассчитана концентрационная зависимость постоянных кристаллической решетки мартенсита (рис. 3), который хорошо иллюстрирует, что при возрастании концентрации углерода один параметр решетки возрастает (зависит от того, в октоэдры какого направления попали атомы С), а два других немного уменьшаются.

Стабильность тетрагональной упорядоченной структуры (все атомы С находятся в одной Z-подрешетке) исследовалась путем ее нагрева от $T = 100$ К до высоких температур ($T = 900$ К). Были использованы термо- и баростат Нозье–Гувера [12], число атомов железа составило 6 750, количество углерода изменялось в зависимости от концентрации. На рис. 4 представлены данные о доле атомов С, находящихся в X-, Y- и Z-подрешетках при нагреве расчетной ячейки с потенциалом Лау концентрацией углерода 1,4 ат. %, со скоростями нагрева 10 К/нс и 100 К/нс. Из рис. 4 видно, что при нагреве происходит равномерное распределение углерода по всем подрешеткам, при этом можно определить температуру T_c ,

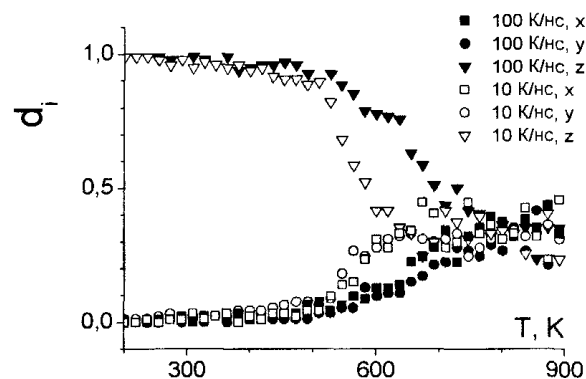


Рис. 4. Температурные зависимости долей атомов d_i углерода в подрешетках X-, Y- и Z-типов при скоростях нагрева 10 и 100 К/нс

при которой происходит полное разупорядочение атомов С, для скорости 10 К/нс $T_c = 580$ К. Чтобы убедиться, что перераспределение углерода не связано с большой скоростью нагрева, были проведены расчеты с постоянными температурами, которые показали, что точность определения T_c составляет 50 К.

Продлав аналогичные расчёты для различных концентраций углерода и каждого потенциала со скоростью нагрева 10 К/нс, были получены концентрационные зависимости температуры распада тетрагональной фазы, представленные на рис. 5, сплошная линия с квадратными маркерами

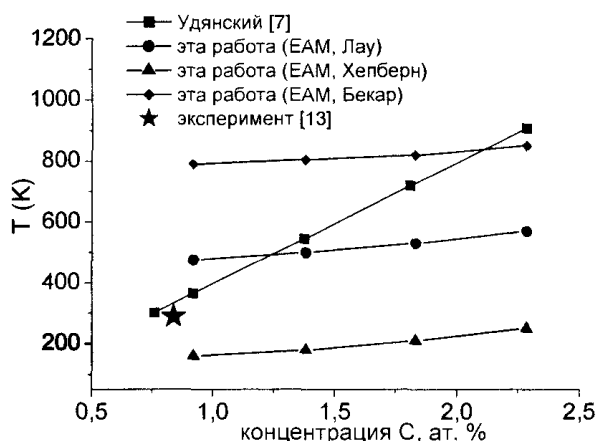


Рис. 5. Зависимость температуры распада тетрагональной фазы от содержания углерода

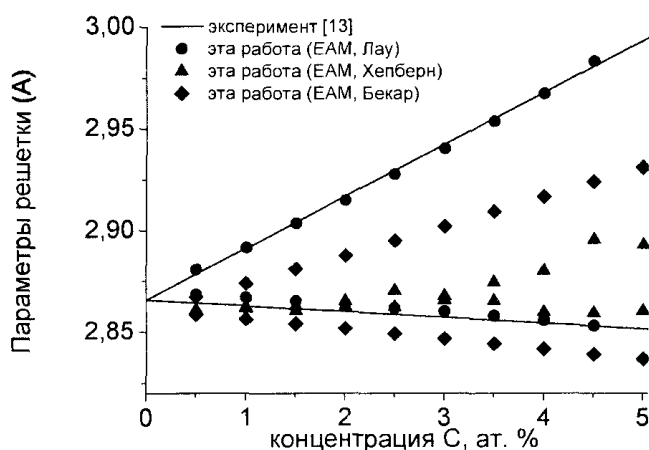


Рис. 6. Зависимость постоянных решеток мартенсита от содержания С, при 300 К

– результаты работы [7], при этом параметры теории среднего поля Хачатуряна были подобраны таким образом, чтобы воспроизвести экспериментальные данные [13]. В ходе данных расчетов была получена концентрационная зависимость постоянных решетки при 300 К, (рис. 6). Потенциал Лау [8] лучше других воспроизводит имеющиеся данные об упругом взаимодействии углерода и концентрационные зависимости постоянных решетки, тогда как потенциал Хепберна приводит к значительному отличию от эксперимента. Однако все рассмотренные потенциалы приводят к слабой концентрационной зависимости температуры мартенситного превращения и не в состоянии описать существующие экспериментальные результаты [1, 13].

Выводы

В данной работе с использованием ЕАМ потенциалов Лау [8], Бекар [9], Хепберна [10] были рассчитаны энергии упругого взаимодействия углерода в ОЦК решетке железа, зависимость температуры распада тетрагональной фазы от содержания. Так же был проведен расчет постоянных решетки методом минимизации энергии системы и молекулярной динамики при 300 К. Потенциал Лау [8] лучше других воспроизводит имеющиеся данные об упругом взаимодействии углерода и концентрационные зависимости постоянных решетки. Однако, ни один из потенциалов не дает согласие с концентрационной зависимостью температуры разупорядочения тетрагональной фазы [7]. Таким образом, для моделирования температурной стабильности мартенсита методом молекулярной динамики необходимо уточнение потенциала взаимодействия.

Литература

1. Курдюмов, Г.В. Превращения в железе и стали / Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. – М.: Наука, 1977. – 236 с.
2. Bain, E.C. The Nature of Martensite / E.C. Bain // Trans. AIME, Steel Div. – 1924. – V. 70. – P. 25–46.
3. Zener, C. Theory of Strain Interaction of Solute Atoms / C. Zener // Phys. Rev. – 1948. – V. 74. – Issue 6. – P. 639–647.
4. Хачатурян, А.Г. К теории упорядочения атомов углерода в кристалле мартенсита / А.Г. Хачатурян, Г.А. Шаталов // Физика металлов и металловедение – 1971. – Т. 32, № 1 – С. 5–13.
5. Гаврилюк, В.Г. Мессбауэровское исследование мартенситного превращения в сплавах Fe-Ni-C и Fe-Mn-C / В.Г. Гаврилюк, В.М. Надутов, О.Н. Разумов // УФЖ. – 1977. – Т. 22. – № 10 – С. 1728–1730.
6. Исследование строения железоуглеродистого мартенсита с помощью эффекта Мессбауэра / В.Н. Гриднев, В.Г. Гаврилюк, В.В. Немошкаленко и др. // Физика металлов и металловедение – 1977. – Т. 43, № 3. – С. 582–590.
7. Interplay between long-range elastic and short-range chemical interactions in Fe-C martensite formation / A. Udyansky, J. von Pezold, V.N. Bugaev *et al.* // Phys. Rev. – 2009. – V. 79. – Issue 12. – P. 224112.
8. Lau, T. Many-Body Potential for Point Defect Clusters in Fe-C Alloys / T. Lau, C.J.F. Forst // Phys. Rev. Lett. – 2007. – V. 98. – Issue 21. – P. 215501.
9. Atomistic modeling of an Fe system with a small concentration of C / C.S. Becquart, J.M. Raulot, G. Bencteux *et al.* // Comp. Mat. Sc. – 2007. – V. 40. – Issue 1. – P. 119–129.
10. Hepburn, D.J. Metallic-covalent potential for carbon in iron / D.J. Hepburn, G.J. Ackland // Phys. Rev. B – 2008. – V. 78. – Issue 16. – P. 165115
11. Ackland, G.J. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron // J. Phys: Condens. Matter – 2004. – V. 16. – P. 2629–2642.
12. Hoover W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions / W.G Hoover // Phys. Rev. A – 1985. – V. 31. – Issue 3. – P. 1695–1697.
13. Liu, X. Lattice-parameter variation with carbon content of martensite. I. X-ray-diffraction experimental study / X. Liu, F. Zhong // Phys. Rev. B – 1995. – V. 52. – Issue 14. – P. 9970.

INTERATOMIC POTENTIAL FOR IRON-CARBON SYSTEM AND MARTENSITIC PHASE TRANSITION PROBLEM

P.V. Chirkov¹, A.A. Mirzoev²

Computer simulation of tetrahedral lattice distortion of iron-carbon system was performed. Modern embedded atom potentials for Fe-C system were used. It was shown that existing potentials can reproduce tetrahedral lattice distortion and don't allow to describe concentration dependence of martensite thermal stability.

Keywords: martensitic phase transition, molecular dynamic, embedded atom potential

References

1. Kurdyumov G.V., Utevskij L.M., Entin R.I. *Prevrashheniya v zheleze i stali* [Transformation in iron and steel]. Moscow: Nauka, 1977. 236 p. (in Russ.).
2. Bain E.C. The Nature of Martensite. *Trans. AIME, Steel Div.* 1924. Vol. 70. pp. 25–46.
3. Zener C. Theory of Strain Interaction of Solute Atoms. *Phys. Rev.* 1948. Vol. 74. Issue 6. pp. 639–647.
4. Khachaturyan A.G., Shatalov G.A. K teorii uporyadocheniya atomov ugleroda v kristalle martensita. *Fizika metallov i metallovedenie.* 1971. Vol. 32, no. 1. pp. 5–13. (in Russ.).
5. Gavriluk V.G., Nadutov V.M., Razumov O.N. Messbauerovskoe issledovanie martensitnogo prevrashheniya v splavakh Fe-Ni-C i Fe-Mn-C. *Ukrainian Journal of Physics.* 1977. Vol. 22, no. 10. pp. 1728–1730. (in Russ.).
6. Gridnev V.N., Gavriluk V.G., Nemoshkalenko V.V., Polushkin Yu.A., Razumov O.N. *Fizika metallov i metallovedenie.* 1977. Vol. 43, no. 3. pp. 582–590. (in Russ.).
7. Udyansky A., von Pezold J., Bugaev V.N., Friak M., Neugebauer J. Interplay between long-range elastic and short-range chemical interactions in Fe-C martensite formation. *Phys. Rev.* 2009. Vol. 79. Issue 12. p. 224112.
8. Lau T., Forst C.J.F. Many-Body Potential for Point Defect Clusters in Fe-C Alloys. *Phys. Rev. Lett.* 2007. Vol. 98. Issue 21. p. 215501.
9. Becquart C.S., Raulot J.M., Bencteux G., Domain C., Perez M., Garruchet S., Nguyen H. Atomistic modeling of an Fe system with a small concentration of C. *Comp. Mat. Sc.* 2007. Vol. 40. Issue 1. pp. 119–129. <http://dx.doi.org/10.1016/j.commatsci.2006.11.005>
10. Hepburn D.J., Ackland G.J. Metallic-covalent potential for carbon in iron. *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 78. Issue 16. p. 165115.
11. Ackland G.J. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron. *J. Phys: Condens. Matter.* 2004. Vol. 16. p. 2629–2642.
12. Hoover W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Phys. Rev. A.* 1985. Vol. 31. Issue 3. p. 1695–1697.
13. Liu X., Zhong F. Lattice-parameter variation with carbon content of martensite. I. X-ray-diffraction experimental study. *Phys. Rev. B.* 1995. Vol. 52. Issue 14. p. 9970.

Поступила в редакцию 19 октября 2012 г.

¹ Chirkov Pavel Vladimirovich is Master Student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University
E-mail p_chirkow@yandex.ru

² Mirzoev Aleksandr Aminulaevich is Dr Sc (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University
E-mail mirzoev@physics.susu.ac.ru

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 редакцию предоставляется электронная (документ MS Word 2003) версия работы объемом не более 8 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 (не более 500 знаков с пробелами), 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, аннотация (или 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, масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации, 11 pt. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 pt, 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. Если рисунок создан не средствами MS Office, то желательно предоставить рисунки и в виде отдельных файлов.

7. Адрес редакции журнала «Вестник ЮУрГУ» серии «Математика. Механика. Физика»: Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, физический факультет, кафедра ОиТФ, ответственному редактору профессору Бескачко Валерию Петровичу. [Prof. Beskachko Valeriy Petrovich, General and Theoretical Physics Department, SUSU, 76, Lenin prospect, Chelyabinsk, Russia, 454080].

8. Адрес электронной почты: vestnik@physics.susu.ac.ru

9. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта ЮУрГУ (<http://www.susu.ac.ru>) следуя ссылкой: «Информация о научных исследованиях», «издательская деятельность», «Вестник ЮУрГУ», «Серии».

10. Журнал распространяется по подписке. Подписной индекс журнала «Вестник ЮУрГУ», серия «Математика. Механика. Физика»: 29211, каталог «Пресса России». Интернет-каталог агентства «Книга-Сервис», подписной индекс: E29211. Электронная версия: см. www.elibrary.ru.

11. Плата с аспирантов за публикацию не взимается.

**ВЕСТНИК
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА**

**Серия
«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»**

2013, том 5, № 1

Редактор Н.М. Лезина

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 05.04.2013. Формат 60×84 1/8. Печать графорежная.
Усл. печ. л. 13,95. Тираж 500 экз. Заказ 62/261.

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