

ВЕСТНИК



**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

**2022
Т. 14, № 2**

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

СЕРИЯ

«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»

Решением ВАК России включен в Перечень рецензируемых научных изданий

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

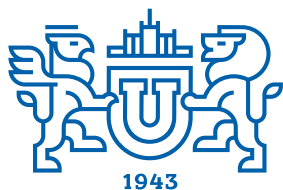
Основной целью серии «Математика. Механика. Физика» является публикация и распространение оригинальных результатов научных исследований в области математики, механики и физики, а также их приложений в естественных, технических и экономических науках.

Редакционная коллегия

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

Редакционный совет

д.т.н., профессор **Богомолов А.В.** (Государственный научный центр Российской Федерации – Федеральный медицинский биофизический центр имени А.И. Бурназяна, г. Москва)
д.ф.-м.н., профессор **Бровко Г.Л.** (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва)
д.ф.-м.н., профессор **Бучельников В.Д.** (Челябинский государственный университет, г. Челябинск)
профессор **Гундетти Д.** (Болонский университет, г. Болонья, Италия)
д.ф.-м.н., профессор **Жуковский В.И.** (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва)
к.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Заляпин И.В.** (Университет Невады, г. Рино, США)
д.ф.-м.н., профессор **Зелик С.В.** (Университет Суррея, г. Гилфорд, Великобритания)
д.ф.-м.н., профессор **Короткий А.И.** (Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, г. Екатеринбург)
Ph. D., профессор **Ким Джейван** (Корейский институт передовых исследований KIAS, г. Сеул, Южная Корея)
Ph. D., профессор **Ким Кишик** (INHA-Университет, г. Инчон, Южная Корея)
д.ф.-м.н., профессор **Кундикова Н.Д.** (Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург)
д.ф.-м.н., профессор **Меньших В.В.** (Воронежский институт МВД Российской Федерации, г. Воронеж)
д.ф.-м.н., профессор **Пинчук С.И.** (Университет штата Индиана, г. Блумингтон, США)
Ph. D., ассистент-профессор **Пузырев Е.С.** (Университет Вандербильта, г. Нэшвилл, США)
д.т.н., профессор **Равшанов Н.К.** (Ташкентский университет информационных технологий, г. Ташкент, Узбекистан)
д.т.н., профессор **Уткин Л.В.** (Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург)
Prof. dr. ir. **Ферпуст И.** (Католический университет, г. Лёвен, Бельгия)
д.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Штраус В.А.** (Университет Симона Боливара, г. Каракас, Венесуэла)



BULLETIN

OF THE SOUTH URAL
STATE UNIVERSITY

2022

Vol. 14, no. 2

SERIES

“MATHEMATICS.
MECHANICS. PHYSICS”

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

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

South Ural State University

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

Editorial Board

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

Editorial Council

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

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

АНИСОВ В.О. Линейная дифференциальная игра удержания с поломкой.....	5
ЖУКОВСКИЙ В.И., ЖУКОВСКАЯ Л.В., КУДРЯВЦЕВ К.Н., РОМАНОВА В.Э. Об одной модификации равновесия по Нэшу	13
NEUSTROEVA L.V. On Uniqueness in the Problems of Determining Point Sources in Mathematical Models of Heat and Mass Transfer	31
РЯЖСКИХ А.В. Теплопроводность в однородной полосе с линейным изменением толщины при граничных условиях первого рода	44
ТУРМЕТОВ Б.Х., КАРАЧИК В.В. Задача Неймана для нелокального бигармонического уравнения.....	51

Механика

ЗАРИПОВА Д.Д., КОВАЛЕВ Ю.М. Моделирование криволинейных поверхностей в задачах газовой динамики	59
---	----

Физика

KARLUN M.V., ANIKINA E.V., BESKACHKO V.P. Ab initio Modelling of a Bilayer Graphene .	64
КОВАЛЕВ Ю.М., ПОМЫКАЛОВ Е.В., ШЕРШНЕВА О.А. Моделирование разогрева энергетических материалов	72

CONTENTS

Mathematics

ANISOV V.O. Linear Differential Holding Game with a Break.....	5
ZHUKOVSKIY V.I., ZHUKOVSKAYA L.V., KUDRYAVTSEV K.N., ROMANOVA V.E. On One Modification of Nash Equilibrium	13
NEUSTROEVA L.V. On Uniqueness in the Problems of Determining Point Sources in Mathematical Models of Heat and Mass Transfer	31
RYAZHSHIKH A.V. Thermal Conductivity in a Homogeneous Strip with a Linear Change in Thickness under Boundary Conditions of the First Kind	44
TURMETOV B.Kh., KARACHIK V.V. Neumann Boundary Condition for a Nonlocal Biharmonic Equation	51

Mechanics

ZARIPOVA D.D., KOVALEV Yu.M. Modeling of Curved Surfaces in Gas Dynamics Problems ...	59
---	----

Physics

KAPLUN M.V., ANIKINA E.V., BESKACHKO V.P. Ab Initio Modelling of a Bilayer Graphene.	64
KOVALEV Yu.M., POMYKALOV E.V., SHERSHNEVA O.A. Modeling of Heating of Energy Materials	72

ЛИНЕЙНАЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ ИГРА УДЕРЖАНИЯ С ПОЛОМКОЙ

В.О. Анисов

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: dik_gamer@mail.ru

Аннотация. Рассматривается линейная дифференциальная игра удержания с простым движением. Данная игра рассматривается со стороны первого игрока, которому необходимо удерживать состояние системы в заданном выпуклом терминальном множестве на протяжении всего времени игры, несмотря на возможную поломку и управление второго игрока. Под поломкой понимается мгновенная остановка первого игрока в заранее неизвестный момент времени, через определенное время он устранит поломку и продолжит движение. Вектограммами управлений игроков являются n -мерные выпуклые компакты, которые зависят от времени. Для построения u -стабильного моста используется второй метод Л.С. Понтрягина. Так строится многозначное отображение на основе альтернированного интеграла Л.С. Понтрягина, после чего доказывается, что построенное отображение является u -стабильным мостом для рассматриваемой игры, если выполняется ряд условий. В конце статьи рассматривается простой пример на плоскости, где вектограммы игроков есть круги с центром в начале координат и с постоянным радиусом, причем радиус круга первого игрока строго больше второго. В данном примере строится u -стабильный мост по предложенному методу в статье и находится экстремальная стратегия для первого игрока на построенный u -стабильный мост.

Ключевые слова: дифференциальная игра, удержание, альтернированный интеграл, стабильный мост.

Введение

Нарушение динамики в дифференциальных играх преследования-уклонения в числе первых рассмотрел М.С. Никольский [1–4]. Так, в статье [3] используется второй метод Л.С. Понтрягина [5] для построения u -стабильного моста [6, с. 52].

В данной статье будет рассмотрено нарушение динамики в линейной дифференциальной игре удержания. Как и в статье [3], будет рассмотрена разовая поломка у первого игрока, при возникновении которой он обездвижен на некоторое время, данная поломка происходит в заранее неизвестный момент времени. Вектограммами управлений игроков являются n -мерные выпуклые компакты, которые зависят от времени. Поставленная игра удержания будет рассматриваться со стороны первого игрока, которому необходимо удерживать состояние системы в заданном выпуклом терминальном множестве на протяжении всего времени игры, несмотря на возможную поломку и управление второго игрока. Для построения u -стабильного моста используется второй метод Л.С. Понтрягина. Так строится многозначное отображение, которое равно пересечению альтернированных интегралов Л.С. Понтрягина на терминальное множество при фиксированном моменте поломки, пересечение берется по времени поломки и по верхнему пределу интегрирования альтернированного интеграла. Также приводится доказательство, что построенное отображение является u -стабильным мостом для рассматриваемой игры, если выполняется ряд условий. В подтверждение существования в конце статьи будет рассмотрен простой случай на плоскости, где вектограммами управлений игроков являются круги постоянного радиуса с центром в начале координат. В данном примере строится u -стабильный мост по предложенному методу, а также строится экстремальная стратегия [6, с. 57] на данный мост.

В первой части статьи описывается постановка рассматриваемой задачи удержания, во второй части вводится в рассмотрение используемый математический аппарат и строится u -стабильный мост, а в третьей части рассматривается простой пример.

Постановка задачи

Пусть задано выпуклое ограниченное множество $M \subset \mathbb{R}^n$, временной отрезок $[0, T]$ и начальный фазовый вектор системы $z(0) = z_0 \in M$, тогда если на протяжении $t \in [0, T]$ выполнялось включение $z(t) \in M$, то игра заканчивается и побеждает первый игрок, иначе, если в некоторый момент $t_* \in (0, T]$ данное включение нарушилось, тогда игра заканчивается и побеждает второй игрок.

Положим $\mathbb{R}_+ = \{x \in \mathbb{R} : x \geq 0\}$. Для достижения своих целей игроки строят допустимые управления, с помощью которых происходит воздействие на систему. Для упрощения рассуждений вектограммы управлений игроков будут заданы выпуклыми компактами P и Q из \mathbb{R}^n , а множитель, зависящий от времени, будет учтен в виде коэффициента. Допустимое управление первого игрока задается функцией $u : [0, T] \times \mathbb{R}^n \rightarrow P$, коэффициент задается интегрируемой функцией $a : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}_+$. В заранее неизвестный момент времени $\theta \in [0, T]$ может произойти поломка на время h . Для математического описания поломки введем функцию φ_θ , которая имеет вид

$$\varphi_\theta(t) = \begin{cases} 0 & t \in [\theta, \theta + h] \\ 1 & \text{иначе} \end{cases}.$$

Допустимое управление второго игрока задается функцией $v : [0, T] \times \mathbb{R}^n \rightarrow Q$, коэффициент задается интегрируемой функцией $b : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}_+$.

В силу выше сказанного движение системы можно описывать линейным дифференциальным уравнением

$$\frac{dz}{dt} = b(t) \cdot v(t, z(t)) - a(t) \cdot \varphi_\theta(t) \cdot u(t, z(t)), \quad z(0) = z_0, \quad v(t, z(t)) \in Q, \quad u(t, z(t)) \in P, \quad t \in [0, T]. \quad (1)$$

Дадим определение движения системы (1), порожденного допустимыми управлениями игроков из начального положения z_0 . Возьмем разбиение ω временного отрезка $[0, T]$ с диаметром $d(\omega)$ следующим образом:

$$\omega : 0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{m+1} = T, \quad d(\omega) = \max_{0 \leq i \leq m} (t_{i+1} - t_i).$$

Построим ломаную

$$z_\omega(t) = z_\omega(t_i) - \left(\int_{t_i}^t \varphi_\theta(r) \cdot a(r) dr \right) \cdot u(t_i, z_\omega(t_i)) + \left(\int_{t_i}^t b(r) dr \right) \cdot v(t_i, z_\omega(t_i)), \quad (2)$$

при $z_\omega(t_0) = z_0, t \in [t_i, t_{i+1}]$. Семейство ломаных (2) является равномерно ограниченным и равномерно непрерывным согласно [7, с. 46], а значит, удовлетворяют условию теоремы Арцела [8, с. 104]. Под движением системы (1) с допустимыми управлениями u и v и с начальным условием $z(t_0) = z_0$ понимается любой предел подпоследовательности последовательности ломаных (2), которая равномерно сходится на отрезке $[0, T]$ при $d(\omega) \rightarrow 0$.

Построение стабильного моста

Введем в рассмотрение операции Минковского [5] над множествами.

Определение 1. Алгебраической суммой непустых множеств A и B из \mathbb{R}^n называется множество

$$A + B = \left\{ x \in \mathbb{R}^n : x = a + b, a \in A, b \in B \right\} = \bigcup_{b \in B} (A + b).$$

Определение 2. Произведением непустого множества A из \mathbb{R}^n на число β называется множество

$$\beta \cdot A = \left\{ x \in \mathbb{R}^n : x = \beta \cdot a, a \in A \right\}.$$

Определение 3. Геометрической разностью непустых множеств A и B из \mathbb{R}^n называется множество

$$A \div B = \left\{ x \in \mathbb{R}^n : x + B \subset A \right\} = \bigcap_{b \in B} (A - b).$$

Введем в рассмотрение интеграл Ауманна [9, с. 326].

Определение 4. Пусть задано многозначное отображение $X: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$, значения которого являются непустыми компактами. Интегралом Ауманна от $X(t)$ на отрезке $[t_1, t_2]$ называется множество

$$\int_{t_1}^{t_2} X(r) dr = \left\{ \int_{t_1}^{t_2} x(r) dr : \text{измеримая } x(r) \in X(r) \text{ при почти всех } t_1 \leq r \leq t_2 \right\}.$$

Лемма 1 [3]. Пусть заданы некоторые непустые множества B, C и задано $\{A_i\}$ – семейство непустых множеств, которые зависят от параметра $i \in I$ и пусть $\exists j \in I: A_j = \bigcap_{i \in I} A_i$, тогда

$$\bigcap_{i \in I} [(A_i + B) \div C] = \left(\bigcap_{i \in I} A_i + B \right) \div C$$

Введем в рассмотрение *альтернированный интеграл Л.С. Понтрягина* [5] для рассматриваемой игры. Построим многозначные отображения $U_\theta(t) = \varphi_\theta(t) \cdot a(t) \cdot P$ и $V(t) = b(t) \cdot Q$ при $t \in [0, T]$. Так как значения данных отображений при $t \in [0, T]$ – это выпуклые компакты из \mathbb{R}^n , то данные отображения равномерно ограничены на отрезке $[0, T]$, то есть

$$\exists r \in \mathbb{R}: \forall t \in [0, T] \Rightarrow U(t) \subset r \cdot S, V(t) \subset r \cdot S,$$

где S – это n -мерный шар единичного радиуса с центром в начале координат. Возьмем разбиение ω отрезка $[0, T]$:

$$\omega: 0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{m+1} = T.$$

Положим

$$U_i = \int_{t_{i-1}}^{t_i} U_\theta(r) dr \quad V_i = \int_{t_{i-1}}^{t_i} V(r) dr \quad i = 1..m+1.$$

Положим $A_0 = M$ и определим A_{m+1} индуктивно

$$A_i = (A_{i-1} + U_i) \div V_i \quad i = 1..m+1.$$

Множество A_{m+1} называется *альтернированной суммой*, а пересечение A_{m+1} по всевозможным разбиениям ω отрезка $[0, T]$ называется *альтернированным интегралом Л.С. Понтрягина* и записывается в виде

$$W_\theta(0, T) = \int_{M, 0}^T [U_\theta(r) \div V(r)] dr.$$

В силу определения имеем, что $\forall t \in [0, T]$ выполняется $W_\theta(t, t) = M$.

В следующей лемме представлено ключевое свойство альтернированного интеграла, которое связывает его с u -стабильным мостом.

Лемма 2 [3]. $\forall t \in [0, T]$ и $\forall \varepsilon \in [0, T - t]$ выполняется следующее включение:

$$W_\theta(t, T) \subset \left[W_\theta(t + \varepsilon, T) + \int_t^{t+\varepsilon} U_\theta(r) dr \right] \div \int_t^{t+\varepsilon} V(r) dr.$$

Из данного включения и введённых определений следует, что $\forall z(t) \in W_\theta(t, T)$, выполняется включение

$$z(t) \in \bigcap_{v \in Q} \left[\bigcup_{u \in P} \left[W_\theta(t + \varepsilon, T) + \left(\int_t^{t+\varepsilon} \varphi_\theta(r) \cdot a(r) dr \right) \cdot u \right] - \left(\int_t^{t+\varepsilon} b(r) dr \right) \cdot v \right],$$

то есть $\exists u_* \in P$, что $\forall v \in Q$ выполняется включение

$$z(t) - \left(\int_t^{t+\varepsilon} \varphi_\theta(r) \cdot a(r) dr \right) \cdot u_* + \left(\int_t^{t+\varepsilon} b(r) dr \right) \cdot v = z(t + \varepsilon) \in W_\theta(t + \varepsilon, T).$$

Введем в рассмотрение понятие u -стабильного моста [6, с. 52]. Пусть начальное состояние системы $z(0) \in W_\theta(0, T)$, тогда в силу леммы 2 существует допустимое управление первого игрока $u(t, z(t))$, что при любом допустимом управлении второго игрока $v(t, z(t))$ и любом моменте поломки $\theta \in [0, T]$ будет выполняться включение

$$z(t) \in W_\theta(t, T), \quad t \in [0, T], \quad (3)$$

а конечное состояние $z(T) \in W_\theta(T, T) = M$. Тогда множество $\{(t, x) : t \in [0, T], x \in W_\theta(t, T)\}$ называется u -стабильным мостом для дифференциальной игры преследования-уклонения, заданное дифференциальным уравнением (1) к множеству M . Однако из включения (3) не следует включение $z(t) \in M, t \in [0, T]$, которое требуется от первого игрока в рассматриваемой игре. Чтобы учесть требуемое включение, построим следующие множества:

$$D_\theta(t, T) = \bigcap_{s \in [t, T]} W_\theta(t, s); \quad \underline{D}(t, T) = \bigcap_{\theta \in [t, T]} D_\theta(t, T);$$

$$B_\theta = \{(t, x) : t \in [0, T], x \in D_\theta(t, T)\}; \quad \underline{B} = \{(t, x) : t \in [0, T], x \in \underline{D}(t, T)\}.$$

Лемма 3. При $\forall t \in [0, T]$, если $\underline{D}(t, T) \neq \emptyset$, то выполняется включение $\underline{D}(t, T) \subset M$ и $D_\theta(t, T) \subset M$ при $\theta \in [t, T]$.

Доказательство. Пусть $t \in [0, T]$, $\underline{D}(t, T) \neq \emptyset$. Множество $\underline{D}(t, T)$ согласно определению равно

$$\underline{D}(t, T) = \bigcap_{\theta \in [t, T]} D_\theta(t, T), \quad (4)$$

а каждое $D_\theta(t, T)$ согласно определению равно

$$D_\theta(t, T) = \bigcap_{s \in [t, T]} W_\theta(t, s). \quad (5)$$

При $\forall \theta \in [t, T]$ в пересечении из (5) присутствует элемент $W_\theta(t, t) = M$, а значит, данное пересечение лежит в M или равно ему, получили, что $D_\theta(t, T) \subseteq M$. Так как при $\forall \theta \in [t, T]$ выполнено включение $D_\theta(t, T) \subseteq M$, то пересечение из (4) лежит в M или равно ему, получили, что $\underline{D}(t, T) \subseteq M$. \square

Теорема 1. Пусть начальное состояние игры $z_0 \in \underline{D}(0, T)$ и $\underline{D}(t, T) \neq \emptyset$ при $t \in [0, T]$. Пусть $\forall t \in [0, T] \exists \theta' \in [t, T]$ такое, что имеет место равенство

$$\bigcap_{\theta \in [t, T]} D_\theta(t, T) = D_{\theta'}(t, T), \quad (6)$$

и $\forall t \in [0, T] \exists s' \in [t, T]$ такое, что имеет место равенство

$$\bigcap_{s \in [t, T]} W_\theta(t, s) = W_\theta(t, s'). \quad (7)$$

Тогда в рассматриваемой игре удержания первый игрок сможет победить при любом допустимом управлении второго игрока и любом моменте поломки $\theta \in [0, T]$.

Доказательство. Дано $z_0 \in \underline{D}(0, T)$ и $\underline{D}(t, T) \neq \emptyset$ при $t \in [0, T]$. Распишем множество $\underline{D}(t, T)$ по определению, получим

$$\underline{D}(t, T) = \bigcap_{\theta \in [t, T]} D_\theta(t, T). \quad (8)$$

Рассмотрим отдельно множество $D_\theta(t, T)$, распишем его по определению

$$D_\theta(t, T) = \bigcap_{s \in [t, T]} W_\theta(t, s). \quad (9)$$

Ослабим пересечение в правой части (9) следующим образом: возьмем некоторое $\varepsilon \in (0, T-t]$ и перейдем от $[t, T]$ к $[t+\varepsilon, T]$, затем используем лемму 2, получим, что правая часть (9) лежит в

$$\bigcap_{s \in [t+\varepsilon, T]} \left[\left[W_\theta(t+\varepsilon, s) + \int_t^{t+\varepsilon} U_\theta(r) dr \right] \div \int_t^{t+\varepsilon} V(r) dr \right]. \quad (10)$$

Так как по условию теоремы выполняется равенство (7), то применим лемму 1 к (10), а полученное пересечение $\bigcap_{s \in [t+\varepsilon, T]} W_\theta(t+\varepsilon, s)$ заменим, согласно определению, на $D_\theta(t+\varepsilon, T)$, получим

$$(10) = \left[D_\theta(t+\varepsilon, T) + \int_t^{t+\varepsilon} U_\theta(r) dr \right] \div \int_t^{t+\varepsilon} V(r) dr.$$

Получили, что $\forall t \in [0, T]$ и $\forall \varepsilon \in [0, T-t]$ выполняется включение

$$D_\theta(t, T) \subset \left[D_\theta(t+\varepsilon, T) + \int_t^{t+\varepsilon} U_\theta(r) dr \right] \div \int_t^{t+\varepsilon} V(r) dr. \quad (11)$$

Аналогично выводам из леммы 2 из включения (11) следует, что множество $B_\theta = \{(t, x) : t \in [0, T], x \in D_\theta(t, T)\}$ является u -стабильным мостом к рассматриваемой игре при фиксированном моменте поломки $\theta \in [0, T]$.

Применим включение (11) к (8), получим

$$(8) \subset \bigcap_{\theta \in [t, T]} \left[D_\theta(t+\varepsilon, T) + \int_t^{t+\varepsilon} U_\theta(r) dr \right] \div \int_t^{t+\varepsilon} V(r) dr. \quad (12)$$

Ослабим пересечение в (12) следующим образом: возьмем некоторое $\varepsilon \in (0, T-t]$ и перейдем от $[t, T]$ к $[t+\varepsilon, T]$, так как по условию теоремы выполняется равенство (6), то применим лемму 1, а полученное пересечение $\bigcap_{\theta \in [t, T]} D_\theta(t+\varepsilon, T)$ заменим, согласно определению, на $\underline{D}(t+\varepsilon, T)$,

получим, что правая часть (12) лежит в

$$\left[\underline{D}(t+\varepsilon, T) + \int_t^{t+\varepsilon} U_\theta(r) dr \right] \div \int_t^{t+\varepsilon} V(r) dr.$$

В итоге получили, что $\forall t \in [0, T]$ и $\forall \varepsilon \in [0, T-t]$ выполняется включение

$$\underline{D}(t, T) \subset \left[\underline{D}(t+\varepsilon, T) + \int_t^{t+\varepsilon} U_\theta(r) dr \right] \div \int_t^{t+\varepsilon} V(r) dr. \quad (13)$$

Аналогично из включения (13) следует, что множество $\underline{B} = \{(t, x) : t \in [0, T], x \in \underline{D}(t, T)\}$ является u -стабильным мостом к рассматриваемой игре.

Теперь опишем алгоритм движения первого игрока для достижения победы. Поскольку $z_0 \in \underline{D}(0, T)$, то $(0, z_0) \in \underline{B}$. Так как \underline{B} – u -стабильный мост, то существует такое допустимое управление u_1 , что при любом допустимом управлении второго игрока движение системы $z(t)$ удовлетворяет включению

$$z(t) \in \underline{D}(t, T), \quad t \in [0, T]. \quad (14)$$

Например, можно положить $u_1 = u_1^e$ – экстремальная стратегия [6, с. 57] к \underline{B} , тогда в силу леммы 15.1 из [6, с. 62] включение (14) будет выполняться. Если поломка не происходит, тогда в силу леммы 3 и включения (14) выполняется включение $z(t) \in M$ при $t \in [0, T]$, то есть игра закончится в момент времени T и первый игрок победит.

Иначе, если поломка произошла в момент $\theta' \in [0, T]$, тогда первый игрок в момент времени θ' останавливается и устраняет поломку в течение времени $h' = \min(T - \theta', h)$, после чего продолжает движение. Из включения (14) следует, что в момент поломки выполняется включение

$z(\theta') \in \underline{D}(\theta', T)$, а согласно определению множества $\underline{D}(\theta', T)$ следует включение $z(\theta') \in D_{\theta'}(\theta', T)$, из которого в свою очередь следует включение $(\theta', z(\theta')) \in B_{\theta'}$. Так как $B_{\theta'}$ – u -стабильный мост, то при любом допустимом управлении первого игрока (любом, так как функция поломки $\varphi_{\theta'}(t) = 0$ при $t \in [\theta', \theta' + h']$) и любом допустимом управлении второго игрока движение системы $z(t)$ удовлетворяет включению

$$z(t) \in D_{\theta'}(t, T), t \in [\theta', \theta' + h']. \tag{15}$$

Тогда в силу леммы 3 и включения (15) выполняется включение $z(t) \in M$ при $t \in [\theta', \theta' + h']$, то есть пока первый игрок устраняет поломку, второму игроку никак не удастся нарушить включение $z(t) \in M$. Через время h' первый игрок продолжает движение, а фазовый вектор системы $z(\theta' + h') \in D_{\theta'}(\theta' + h', T)$, то $(\theta' + h', z(\theta' + h')) \in B_{\theta'}$. Так как $B_{\theta'}$ – u -стабильный мост, то существует такое допустимое управление u_2 , что при любом допустимом управлении второго игрока, движение системы $z(t)$ удовлетворяет включению

$$z(t) \in D_{\theta'}(t, T), t \in [\theta' + h', T]. \tag{16}$$

Например, можно положить, $u_2 = u_2^e$ – экстремальная стратегия [6, с. 57] к $B_{\theta'}$, тогда в силу леммы 15.1 из [6, с. 62] включение (16) будет выполняться. Тогда в силу леммы 3 и включения (16) выполняется включение $z(t) \in M$ при $t \in [\theta' + h', T]$, то есть игра закончится в момент времени T и первый игрок победит, несмотря на поломку в момент времени θ' . \square

Пример. Пусть задано число $m > 0$ и множество $M = m \cdot S$, положим, $a(t) \equiv a_{\max}$, $b(t) \equiv b_{\max}$ при $t \in [0, T]$, причем $a_{\max} > b_{\max}$. Альтернированный интеграл $W_{\theta}(t, T)$ при $t \in [0, T]$, согласно теореме из [10], равен

$$W_{\theta}(t, T) = S \cdot \left(m + \int_t^T \varphi_{\theta}(r) a_{\max} - b_{\max} dr \right) = S \cdot \begin{cases} m + a_{\max}(T - t - h) - b_{\max}(T - t) & t \leq \theta \leq \theta + h \leq T \\ m + a_{\max}(\theta - t) - b_{\max}(T - t) & t \leq \theta \leq T \leq \theta + h \\ m + a_{\max}(T - \theta - h) - b_{\max}(T - t) & \theta \leq t \leq \theta + h \leq T, \\ m - b_{\max}(T - t) & \theta \leq t \leq T \leq \theta + h \\ m + a_{\max}(T - t) - b_{\max}(T - t) & \theta + h \leq t \leq T \end{cases}$$

причем $W_{\theta}(t, T) \neq \emptyset$, если выполняется следующее неравенство

$$m \geq \max_{t \leq \tau \leq T} \int_{\tau}^T (b_{\max} - \varphi_{\theta}(r) \cdot a_{\max}) dr.$$

Чтобы данное неравенство выполнялось для всех моментов поломки, возьмем максимум по времени поломки, получим

$$m \geq \max_{t \leq \theta \leq T} \max_{t \leq \tau \leq T} \int_{\tau}^T (b_{\max} - \varphi_{\theta}(r) \cdot a_{\max}) dr = b_{\max} h. \tag{17}$$

Отсюда множества $\underline{D}(t, T)$ и $D_{\theta}(t, T)$ при $t \in [0, T]$ и $\theta \in [0, T]$ равны

$$D_{\theta}(t, T) = S \cdot \begin{cases} m & t \leq \theta - \frac{b_{\max} h}{a_{\max} - b_{\max}} \leq \theta \leq \theta + h \leq T \\ m + a_{\max}(\theta - t) - b_{\max}(\theta + h - t) & \theta - \frac{b_{\max} h}{a_{\max} - b_{\max}} \leq t \leq \theta \leq \theta + h \leq T \\ m & t \leq \theta \leq T \leq \theta + h \\ m - b_{\max}(\theta + h - t) & \theta \leq t \leq \theta + h \leq T \\ m - b_{\max}(T - t) & \theta \leq t \leq T \leq \theta + h \\ m & \theta + h \leq t \leq T \end{cases},$$

$$\underline{D}(t, T) = S \cdot (m - b_{\max} \min[T - t, h]).$$

Из неравенства (17) следует, что если $m \geq hb_{\max}$, тогда $D_\theta(t, T)$ и $\underline{D}(t, T)$ при $t \in [0, T]$ и $\theta \in [0, T]$ являются непустыми множествами, тогда первый игрок может построить экстремальные стратегии u_1^e, u_2^e , которые согласно [6, с. 62] равны

$$u_1^e(t, z(t)) = \begin{cases} \forall u(t) \in S & \|z(t)\| \leq m - hb_{\max} \\ \frac{z(t)}{\|z(t)\|} & \|z(t)\| > m - hb_{\max} \end{cases}, \quad t \in [0, \theta'],$$

$$u_2^e(t, z(t)) = \begin{cases} \forall u(t) \in S & \|z(t)\| \leq m \\ \frac{z(t)}{\|z(t)\|} & \|z(t)\| > m \end{cases}, \quad t \in [\theta' + h', T],$$

где θ' – момент поломки (если поломки не было, то $\theta' = T$), а время починки равно $h' = \min(T - \theta', h)$. При использовании пары управления $u = (u_1^e, u_2^e)$ первый игрок сможет достигнуть цели при любом допустимом управлении второго игрока и любом моменте поломки согласно теореме 1. Условия теоремы (6) и (7) очевидным образом выполняются для рассматриваемого примера, поскольку пересечение кругов с центром в начале координат равняется кругу с минимальным радиусом.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю Ухоботову Виктору Ивановичу, доктору физ.-мат. наук, зав. кафедрой теории управления и оптимизации ЧелГУ, за значимые замечания и важнейшие советы при проведении исследования и оформлении данной статьи.

Литература

1. Никольский, М.С. О задаче управления линейной системой с нарушениями / М.С. Никольский // Докл. АН СССР – 1986. – Т. 287, № 6. – С. 1317–1320.
2. Никольский, М.С. Об одной задаче управления с нарушениями в динамике / М.С. Никольский // Оптимальное управление и дифференциальные игры: сб. науч. работ. – Тр. МИАН СССР. – 1988. – Т. 185. – С. 181–186.
3. Никольский, М.С. Дифференциальная игра преследования с нарушением в динамике / М.С. Никольский, Чж. Пэн // Дифференциальные уравнения: сб. науч. работ. – 1994. – Т. 30, № 11. – С. 1923–1927.
4. Никольский, М.С. Управление линейными объектами с возможным нарушением в динамике / М.С. Никольский // Тр. ИММ УрО РАН: сб. науч. работ. – 1995. – Т. 3. – С. 132–146.
5. Понтрягин, Л.С. О линейных дифференциальных играх. 2 / Л.С. Понтрягин // Докл. АН СССР – 1967. – Т. 175, № 4. – С. 764–766.
6. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. – М.: Наука, 1974 – 456 с.
7. Ухоботов, В.И. Метод одномерного проектирования в линейных дифференциальных играх с интегральными ограничениями: учеб. пособие / В.И. Ухоботов. – Изд-во Челябинского гос. ун-та, 2005. – 123 с.
8. Колмогоров, А.Н. Элементы теории функций и функционального анализа / А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин. – Изд-во Наука, 1976 – 543 с.
9. Aubin, J.-P. Set-valued analysis / J.-P. Aubin, Н. Frankowska. – Birkhäuser, 1990 – 461 с.
10. Ухоботов, В. И. Однотипные дифференциальные игры с выпуклой целью / В.И. Ухоботов // Тр. ИММ УрО РАН. – 2010. – Т. 16, Вып. 5. – С. 196–204.

Поступила в редакцию 27 декабря 2021 г.

Сведения об авторе

Анисов Вадим Олегович – аспирант, математический факультет, кафедра теории управления и оптимизации, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: dik_gamer@mail.ru

LINEAR DIFFERENTIAL HOLDING GAME WITH A BREAK**V.O. Anisov***Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation**E-mail: dik_gamer@mail.ru*

Abstract. A linear simple motion constraint differential game is considered. This game is considered from the part of the first player, who needs to keep the state of the system in a given convex terminal set throughout the game, despite the possible glitch and control of the second player. A glitch is understood as an instantaneous stop of the first player at a previously unknown point in time; after a certain time he will eliminate the glitch and will continue his motion. The player control vectograms are n -dimensional convex compacts that depend on time. To construct a u -stable bridge, the second method of L.S. Pontryagin is used. This is how a multi-valued mapping is constructed on the basis of the alternating integral of L.S. Pontryagin. After that, it is proved that the constructed mapping is a u -stable bridge for the game under consideration if a number of conditions are satisfied. At the end of the article, a simple example on the plane is considered, where the vectors of the players are circles centered at the origin and with a constant radius, while the radius of the circle of the first player is strictly greater than the second. In this example, a u -stable bridge is built according to the method proposed in the article, and an extremal strategy is found for the first player on the constructed u -stable bridge.

Keywords: differential game, constraint, alternating integral, stable bridge.

References

1. Nikol'skij M.S. On the Problem of Control of a Linear System with Failures. *Sov. Math., Dokl.* 1986, Vol. 33, pp. 547–550.
2. Nikol'skii M.S. Ob odnoy zadache upravleniya s narusheniyami v dinamike (A Control Problem with Breakdowns in the Dynamics). *Optimal control and differential games, Trudy Mat. Inst. Steklov*, 1988, Vol. 185, pp. 181–186.
3. Nikol'skii M.S., Peng Zh. A Differential Pursuit Game with a Breakdown in the Dynamics. *Differential Equations*, 1994, Vol. 30, no. 11, pp. 1775–1778.
4. Nikol'skii M.S. On Control Problems for Linear Objects with Disturbances in the Dynamics. *Trudy Inst. Mat. i Mekh. UrO RAN*, 1995, Vol. 3, pp. 132–146. (in Russ.).
5. Pontryagin L.S. Linear Differential Games. I, II. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 1967, Vol. 175, no. 4, pp. 764–766. (in Russ.).
6. Krasovskiy N.N., Subbotin A.I. *Pozitsionnye differentsial'nye igry* (Positional Differential Games). Moscow, Nauka Publ., 1974, 456 p. (in Russ.).
7. Ukhobotov V.I. *Metod odnomernogo proektirovaniya v lineynykh differentsial'nykh igrakh s integral'nymi ogranicheniyami: uchebnoe posobie* (The Method of One-Dimensional Design in Linear Differential Games with Integral Constraints: Textbook). Izd-vo Chelyabinskogo gos. universiteta Publ., 2005, 123 p. (in Russ.).
8. Kolmogorov A.N., Fomin S.V. *Elementy teorii funktsiy i funktsional'nogo analiza* (Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis). Moscow, Nauka Publ., 1976, 543 p. (in Russ.).
9. Aubin J.P., Frankowska H. *Set-valued analysis*. Birkhauser, Boston, 1990, 461 p.
10. Ukhobotov V.I. One Type Differential Games with Convex Goal. *Trudy Inst. Mat. i Mekh. UrO RAN*, 2010, Vol. 16, no. 5, pp. 196–204. (in Russ.).

Received December 27, 2021

Information about the author

Anisov Vadim Olegovich is Postgraduate Student, Faculty of Mathematics, Department of Control Theory and Optimization, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: dik_gamer@mail.ru

ОБ ОДНОЙ МОДИФИКАЦИИ РАВНОВЕСИЯ ПО НЭШУ

В.И. Жуковский¹, Л.В. Жуковская², К.Н. Кудрявцев³, В.Э. Романова¹

¹ МГУ им. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация

² Центральный экономико-математический институт РАН, г. Москва, Российская Федерация

³ Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

Email: kudriavtcevkn@susu.ru

Аннотация. К концу прошлого века в математической теории дифференциальных позиционных игр (ДПИ) утвердились четыре направления: бескоалиционный вариант ДПИ, кооперативный, иерархический и, наконец, наименее изученный коалиционный вариант ДПИ. В свою очередь, внутри коалиционного обычно выделяются игры с трансферабельными выигрышами (с побочными платежами, когда игроки в течение игры могут делиться своими выигрышами) и нетрансферабельными выигрышами (игры с побочными платежами, когда такие перераспределения отсутствуют по тем или иным причинам). Исследования коалиционных игр с побочными платежами сосредоточены и активно ведутся на факультетах прикладной математики и процессов управления Санкт-Петербургского государственного университета и института математики и информационных технологий Петрозаводского государственного университета (профессора Л.А. Петросян, В.В. Мазалов, Е.М. Парилина, А.Н. Реттиева и их многочисленные ученики). Однако побочные платежи не всегда присутствуют даже в экономических взаимодействиях, более того, побочные платежи могут быть вообще запрещены законодательно. Предпринятые нами в последние годы исследования равновесия угроз и контругроз (санкций и контрсанкций) в бескоалиционных дифференциальных играх позволяют, на наш взгляд, охватить и некоторые аспекты нетрансферабельного варианта коалиционных игр. Как раз вопросам внутренней и внешней устойчивости коалиций в классе ДПИ и посвящена настоящая статья. В ней выявлены коэффициентные ограничения в математической модели дифференциальной позиционной линейно-квадратичной игре шести лиц с двухкоалиционной структурой, при которой эта коалиционная структура внутренне и внешне устойчива.

Ключевые слова: равновесие по Нэшу; равновесие угроз и контругроз; оптимальность по Парето; коалиция.

Введение

Как уже было упомянуто в аннотации, к концу прошлого века в теории позиционных дифференциальных игр (ПДИ) сформировались четыре направления исследований: бескоалиционный, кооперативный, иерархический и коалиционный варианты игры. Последний в свою очередь подразделяется на игры с побочными и без побочных платежей (трансферабельными и нетрансферабельными выигрышами). Изучение первого из них в России возглавляется известной санкт-петербургской научной школой по математической теории игр [1–4]; теория коалиционных ПДИ без побочных платежей только начинает своё становление на базе равновесия угроз и контругроз и группируется вокруг кафедры оптимального управления факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ [5–8]. В настоящей статье эти исследования продолжаются для ДПИ шести лиц с двухкоалиционной структурой $\{K_1 = \{1, 2, 3\}, K_2 = \{4, 5, 6\}\}$.

Одновременно мы также предлагаем аналогичный подход к построению оптимальных (в формализованном далее смысле!) решений в коалиционных ДПИ, базирующийся на идеях принципа равновесности по Нэшу и метода динамического программирования Беллмана.

Напомним, что в 1949 году двадцатиоднолетний аспирант Принстонского университета Джон Форбс Нэш (мл) предложил в докторской диссертации понятие решения бескоалиционной игры, в последующем названного *равновесием по Нэшу (РН)*. Оно, во-первых, сыграло неоценимую роль в становлении математической экономики, социологии, системного анализа, военных наук; во-вторых, ровно через 45 лет (1994 г.) Джону Нэшу (совместно с Харшаньи и Зельтоном) присуждена Нобелевская премия «за фундаментальный анализ равновесия в теории некооперативных игр»; в-третьих, открывая сейчас почти любой современный журнал по теории игр,

исследованию операций, системному анализу и по математической экономике, почти наверняка мы встретимся с работами, затрагивающими те или иные вопросы, связанные с равновесием по Нэшу (РН). Однако «there are spots on the sun». Сюда относятся внутренняя и внешняя неустойчивость множества РН, неустойчивость к отклонению от него двух и более игроков (РН устойчиво к отклонению только одного), РН может не существовать, «улучшаемость», отсутствие эквивалентности и взаимозаменяемости и т.д. В этих случаях авторы видят [9] два выхода. Во-первых, ограничиться лишь математическими моделями, свободными от некоторых из перечисленных (и не перечисленных!) негативных свойств. Во-вторых, вводить новые понятия равновесия, отличные от РН. Здесь, по нашему мнению, перспективными являются равновесие угроз и контругроз [5, 6] и равновесие по Бержу [7, 8]. Ещё раз подчеркнём, что в настоящей статье мы не стремимся подвергнуть РН критике, но используем идею Джона Нэша уже для формализации паретовского решения *коалиционных* ДПИ.

Рассмотрим бескоалиционную игру в нормальной форме, заданную упорядоченной тройкой:

$$\Gamma = \langle \mathbb{N}, \{X_i\}_{i \in \mathbb{N}}, \{f_i(x)\}_{i \in \mathbb{N}} \rangle.$$

Здесь $\mathbb{N} = \{1, \dots, N\}$ – множество порядковых номеров игроков, множество $X_i \in \mathbb{R}^{n_i}$ стратегий x_i игроков. Выбор $x_i \in X_i$ происходит одновременно всеми игроками, в результате образуется *ситуация* $x = (x_1, \dots, x_N) \in X = \prod_{i \in \mathbb{N}} X_i$. Сами интересы (цели) игроков определяются значениями (*выигрышами*) заданных функций выигрыша $f_i(x)$ ($i \in \mathbb{N}$). При этом каждый из игроков стремится возможно *увеличить* свой выигрыш.

Определение 1.1 Пара $(x^e, f^e = f(x^e)) \in X \times \mathbb{R}^N$ называется *равновесием по Нэшу* игры Γ , если имеет место N равенств

$$\max_{x_i \in X_i} f_i(x^e \parallel x_i) = f_i(x^e) \quad (i \in \mathbb{N}), \quad (1)$$

где использованы общепринятые в теории игр обозначения $(x^e \parallel x_i) = (x_1^e, \dots, x_{i-1}^e, x_i, x_{i+1}^e, \dots, x_N^e)$.

Из (1) сразу следуют три важнейших свойства РН: *во-первых*, РН устойчиво к отклонению отдельного игрока, *во-вторых*, РН присуще свойство *индивидуальной рациональности*, т.е.

$$f_i(x^e) \geq \max_{x_i \in X_i} \min_{x_{-i} \in X_{-i}} f_i(x_i, x_{-i}) \quad (i \in N),$$

(здесь уже $-i \in \mathbb{N} \setminus \{i\} = \{1, \dots, i-1, i+1, \dots, N\}$), *в-третьих*, x^e совпадает с *седловой точкой* $(x_1^e, x_2^e) \in X_1 \times X_2$ в случае антагонистического варианта Γ , (где уже $\mathbb{N} = \{1, 2\}$ и $f_1(x) = -f_2(x) = f(x)$), именно $\max_{x_1 \in X_1} f(x_1, x_2^e) = f_1(x_1^e, x_2^e) = \min_{x_2 \in X_2} f(x_1^e, x_2)$. Кроме того, определение 1.1 сразу отвечает на два вопроса: как каждому игроку $i \in \mathbb{N}$ поступать в игре Γ (ответ: следовать $x_i^e \in X_i$) и какого выигрыша он добивается (ответ: $f_i(x^e)$).

Теперь игре Γ поставим в соответствие *N-критериальную задачу*

$$\Gamma_v = \langle X, \{f_i(x)\}_{i \in \mathbb{N}} \rangle.$$

Здесь уже множество X *альтернатив* x совпадает с множеством ситуаций *игры* Γ , а *критерий* $f_i(x)$ – со скалярной функцией выигрыша $f_i(x)$ игрока $i \in \mathbb{N}$.

В 1909 г. итальянский социолог, экономист (а также богатый наследник) Вильфредо Парето предложил в качестве оптимального решения задачи Γ_v использовать максимальную (впоследствии названную «по Парето») альтернативу $x^P \in X$.

Определение 1.2 [9–11]. Альтернатива $x^P \in X$ называется *максимальной по Парето* в задаче Γ_v , если при любой альтернативе $x \in X$ несовместна система N неравенств $f_i(x) \geq f_i(x^P) \square \square (i \in \mathbb{N})$, из которых хотя бы одно строгое; при этом пару

$(x^P, f^P = f(x^P) \ i \in \mathbb{N}) \in X \times \mathbb{R}^N$ называют максимумом по Парето в задаче Γ_ν ; напомним, что $f = (f_1, \dots, f_N) \in \mathbb{R}^N$.

Из определения 1.2 сразу следует, что при отходе от альтернативы x^P нельзя одновременно увеличить компоненты всех критериев $f_i(x^P)$ ($i \in \mathbb{N}$), а также увеличение хотя бы одной компоненты $f_i(x^P)$ вектора $f(x^P)$ неизбежно влечёт уменьшение хотя бы одной из оставшихся. Очевидна, наконец, лемма Карлина [12]:

Свойство 1.1. Если при каких-либо постоянных $\alpha_i > 0$ ($i \in \mathbb{N}$) справедливо равенство

$$\max_{x \in X} \sum_{i \in \mathbb{N}} \alpha_i f_i(x) = \sum_{i \in \mathbb{N}} \alpha_i f_i(x^P), \quad (2)$$

то альтернатива x^P – максимальна по Парето в задаче Γ_ν .

Далее операцию (построения максимума по Парето), диктуемую (2), будем обозначать

$$\begin{aligned} \text{MAX}^P f(x) &= f(x^P) = f^P, \text{ т. е.} \\ \text{MAX}^P f(x) &= \max_{x \in X} \alpha' f(x) = \alpha' f(x^P) \end{aligned} \quad (3)$$

для какого-либо постоянного N -вектора $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$, $\alpha_i > 0$ ($i \in \mathbb{N}$); напоминаем, что штрих сверху означает операцию транспонирования (α' – N -вектор-строка).

2. Основные понятия теории коалиционных игр

Перейдем к возможному коалиционному варианту игры Γ . Здесь прежде всего предполагаем, что на множестве \mathbb{N} задана коалиционная структура, т. е. разбиение \mathbb{N} на попарно непересекающиеся подмножества (коалиции). Для Γ мы ограничивались двумя коалициями $K_1 = \{1, 2, 3\}$ и $K_2 = \{4, 5, 6\}$; коалиционная структура удовлетворяет условиям:

$$\mathbb{N} = K_1 \cup K_2 \text{ и } K_1 \cap K_2 = \emptyset.$$

При этом отдельные коалиции K_l ($l=1, 2$) имеют возможность на «коалиционных совещаниях» сообща выбирать свою стратегию $x_{K_l} = \{x_i \mid i \in K_l\} \in X_{K_l} = \prod_{i \in K_l} X_i$ (всё множество таких стратегий x_{K_l} обозначим X_{K_l}). Тогда любая ситуация $x \in X$ в игре Γ представима $x = (x_{K_1}, x_{K_2})$, векторную функцию выигрыша коалиции K_l обозначаем $f_{K_l}(x_{K_1}, x_{K_2}) = (f_m(x_{K_1}, x_{K_2}) \mid m \in K_l)$ ($l=1, 2$), поэтому N вектор-функции выигрыша игроков (векторный критерий задачи Γ_ν) будет $f(x) = f(x_{K_1}, x_{K_2}) = (f_{K_1}(x_{K_1}, x_{K_2}), f_{K_2}(x_{K_1}, x_{K_2}))$.

В результате переходим от исходного бескоалиционного варианта игры Γ к игре коалиционной

$$G = \left\langle \mathbb{N} = \{K_1 \cup K_2\} \{K_l\}_{l=1,2}, \{X_{K_l}\}_{l=1,2}, \{f_{K_l}(x_{K_1}, x_{K_2})\}_{l=1,2} \right\rangle.$$

Как уже упоминалось, игроки отдельной коалиции на своём «коалиционном совещании» совместно выбирают стратегию коалиции, выполняя два требования: индивидуальной и коллективной рациональности.

Обратимся к требованию индивидуальной рациональности, т. е. чтобы достигаемый в игре G выигрыш i -го игрока в выбранной ситуации x^P был бы не меньше его максиминного, именно,

$$f_i(x^P) \geq \max_{x_i \in X_i} \min_{x_{-i} \in X_{-i}} f_i(x_i, x_{-i}) = \min_{x_{-i} \in X_{-i}} f_i(x_i^g, x_{-i}) = f_i^g \leq f_i(x_i^g, x_{-i}) \quad \forall x_{-i} \in X_{-i}, \quad i \in \mathbb{N},$$

где, напомним, $-i = \mathbb{N} \setminus i = \{1, \dots, i-1, i+1, \dots, N\}$, $x_{-i} = (x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_N) \in X_{-i} = \prod_{j \in \mathbb{N} \setminus \{i\}} X_j$.

Заметим, что для рассматриваемых в настоящей статье играх такие максимины не существуют [6] и поэтому условия индивидуальной рациональности мы не учитываем.

Перейдем к требованию *коллективной рациональности*. Для членов коалиций K_l оно сводится к максимальной по Парето (по отношению к остальным партнёрам по коалиции K_l), именно,

$$\text{MAX}_{x_{K_l} \in X_{K_l}}^P f_{K_l}(x_{K_1}, x_{K_2}^P) = f_{K_l}(x_{K_1}^P, x_{K_2}^P) \quad (l=1,2).$$

Таким образом, приходим к следующему понятию.

Определение 2.1. Набор стратегий $x^P = (x_{K_1}^P, x_{K_2}^P) \in X = X_{K_1} \times X_{K_2}$ назовём *коалиционно Парето-оптимальным* (КПО) для игры G , если

$$\begin{cases} \text{MAX}_{x_{K_1} \in X_{K_1}}^P f_{K_1}(x_{K_1}, x_{K_2}^P) = f_{K_1}(x_{K_1}^P, x_{K_2}^P), \\ \text{MAX}_{x_{K_2} \in X_{K_2}}^P f_{K_2}(x_{K_1}^P, x_{K_2}) = f_{K_2}(x_{K_1}^P, x_{K_2}^P). \end{cases} \quad (4)$$

Нетрудно видеть, что (4) является модификацией (1) для случая одноэлементных коалиций в Γ (операция $\max_{x_i \in X_i}$ из (1) заменена на максимизацию по Парето $\text{MAX}_{x_{K_i} \in X_{K_i}}^P$ из (3)), а сами равенства

(4) поэтому являются модификацией РН (чем и вызвано название настоящей статьи). Естественно тогда, что перечисленные выше «пятна на солнце», характерные для РН, присущи и КПО.

Вспоминая о бурном потоке публикаций (во второй половине прошлого века) по РН, вызванных докторской диссертацией Джона Нэша и последующим звездопадом Нобелевских премий по экономике (но базирующихся на проблемах математической теории игр), по нашему мнению, определение 2.1 не менее перспективно для изучения, чем определение 1.1. Однако далее мы сконцентрируемся на вопросах внутренней и внешней устойчивости коалиций в ПДИ.

3. Внутренняя и внешняя устойчивость коалиции

Здесь считается, что в коалиционной игре Γ найдена определённая в (4) коалиционно Парето-оптимальная (КПО) ситуация $(x_{K_1}^P, x_{K_2}^P) = x^P$ и именно эта ситуация выбрана игроками для практического использования. Обоснованием такого выбора, например, для коалиции K_1 является, во первых, *максимальность по Парето* $x_{K_1}^P$ в задаче $G_1 = \langle X_{K_1}, f_{K_1}(x_{K_1}, x_{K_2}^P) \rangle$ из (4) (ведь игроки из K_1 стремятся к возможно большим выигрышам для каждого, а в многокритериальной задаче G_1 именно $x_{K_1}^P$ доставляет максимум по Парето для $f_{K_1}(x_{K_1}, x_{K_2}^P)$).

Во-вторых, требование *внутренней устойчивости* K_1 : будем считать, что коалиция K_1 внутренне устойчива, если ни у одного из её игроков *не возникает желание покинуть* K_1 : либо *перейти в коалицию* K_2 , либо образовать новую третью коалицию, состоящую лишь из одного «перебежчика». «Обнуление» такого «предательства» достигается, если хотя бы для одного из оставшихся в K_1 игрока появляется возможность «наказать перебежчика». Формально определим процесс наказания следующим образом.

Будем считать, что игрок 1 обладает *угрозой на внутреннюю устойчивость* K_1 , если у него имеется стратегия $x_1^T \in X_1$ такая, что

$$f_1(x_1^T, x_2^P, x_3^P, x_4^P) > f_1(x_{K_1}^P, x_{K_2}^P). \quad (5)$$

В ответ на такую угрозу (см. (5)) у одного из оставшихся в K_1 , например, у игрока 2 имеется *контругроза*, если у него существует стратегия $x_2^C \in X_2$, для которой сразу выполнены два строгих неравенства:

$$f_1(x_1^T, x_2^C, x_3^P, x_4^P) < f_1(x_{K_1}^P, x_{K_2}^P), \quad (6)$$

$$f_2(x_1^T, x_2^C, x_3^P, x_4^P) > \max_{x_1 \in X_1} f_1(x_1, x_2^P). \quad (7)$$

Первое из них (именно (6)) «обнуляет» действие угрозы – сводит выигрыш «угрожающего» к меньшему, чем был первоначально $f_1(x^P) = f_1(x_{K_1}^P, x_{K_2}^P)$. Второе неравенство (см. (7)) даже «подталкивает» второго на использование x_2^C , ибо в результате игрок 2 достигает самого большого выигрыша, о котором он может только мечтать. Аналогично определяется контругроза игрока 3 в ответ на угрозу первого на внутреннюю устойчивую K_1 , а также реакция двух оставшихся игроков на желание одного из коалиции K_1 покинуть эту коалицию.

Определение 3.1. Коалицию K называем *внутренне устойчивой*, если в ответ на возможность любого члена коалиции K покинуть K , у хотя бы одного из оставшихся имеется контругроза (вида (6) и (7)).

Заметим, отсутствие угроз приводит, естественно, к ненужности и контругроз.

Перейдём к *внешней устойчивости коалиции* (например, K_1 в игре Γ). Будем считать, что нежелание какого-либо игрока из K_2 выйти из коалиции K_2 и присоединиться в K_1 характеризует внешнюю устойчивость K_1 . Очевидно также, что внутренняя устойчивость K_2 «обеспечивает» внешнюю устойчивость K_1 и обратно.

Таким образом, внутренняя устойчивость каждой коалиции в коалиционной структуре гарантирует внутреннюю и внешнюю устойчивость, что в свою очередь приводит к устойчивости самой коалиционной структуры, т.е. к нежеланию нарушать сложившееся разбиение игроков на попарно непересекающиеся подмножества.

Наконец, заметим, что неравенств вида (6) и (7) для рассматриваемой далее в разделе 4 ПДИ мы добиваемся специальными коэффициентными ограничениями на функции выигрыша игроков из K_1 .

Дальнейший материал статьи посвящён построению явного вида выделенных (определением 2.1) КПО для достаточно общего класса ПДИ.

4. Дифференциальная линейно-квадратичная игра шести лиц

Как принято в теории игр, такая математическая модель может задаваться упорядоченной пятёркой.

$$\Gamma_D = \langle \mathbb{N}, \{K_1 = \{1, 2, 3\}, K_2 = \{4, 5, 6\}\}, \sum_x, \{\mathfrak{A}_i\}_{i \in \mathbb{N}}, \{I_i(U, t_0, x_0)\}_{i \in \mathbb{N}} \rangle, \quad (8)$$

где $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ – множество порядковых номеров игроков, задана коалиционная структура (напоминаем, за счёт разбиения \mathbb{N} на попарно непересекающиеся подмножества: $\mathbb{N} = K_1 \cup K_2 \wedge K_1 \cap K_2 = \emptyset$); управляемая динамическая система \sum_x линейна (по x и $u_i (i \in \mathbb{N})$):

$$\dot{x} = A(t)x + \sum_{i \in \mathbb{N}} u_i, \quad x(t_0) = x_0$$

причём момент окончания игры $\mathcal{G} > 0$ «заморожен» априори; тогда *время продолжительности* игры $t \in [t_0, \mathcal{G}]$, здесь $0 \leq t_0 \leq t \leq \mathcal{G}$; $A(t)$ – непрерывная на $[0, \mathcal{G}]$ $n \times n$ -матрица (обозначим этот факт $A(\cdot) \in C_{n \times n}[0, \mathcal{G}]$); $x \in \mathbb{R}^n$ – фазовый n -вектор; пары $(t, x) \in [t_0, \mathcal{G}] \times \mathbb{R}^n$ – позиция игры, начальная позиция (t_0, x_0) ; управляющее воздействие i -го игрока $u_i \in \mathbb{R}^n (i \in \mathbb{N})$, так как $u = (u_1, \dots, u_N) \in \mathbb{R}^{Nn}$, то управляющие воздействия коалиций $u_{K_1} = (u_1, u_2, u_3)$ и $u_{K_2} = (u_4, u_5, u_6)$, поэтому $u = (u_{K_1}, u_{K_2})$; множество стратегий игрока $i \in \mathbb{N}$, кроме того, согласно [13],

$$\mathfrak{A}_i = \{U_i \div u_i(t, x) = Q_i(t)x \mid \forall Q_i(\cdot) \in C_{n \times n}[0, \mathcal{G}]\},$$

ситуация $U = (U_1, \dots, U_6) \in \mathfrak{A} = \prod_{i \in \mathbb{N}} \mathfrak{A}_i$, $\mathfrak{A}_{K_l} = \prod_{j \in K_l} \mathfrak{A}_j (l = 1, 2)$; динамика игры (8) проявляется в

том, что каждый игрок, исходя из собственных интересов (см. ниже (9)), выбирает свою стратегию $U_i \div u_i(t, x) = Q_i(t)x$ (т.е. использует «свою» матрицу $Q_i(\cdot) \in C_{n \times n}[t_0, \mathcal{G}]$); затем игроки совместно определяют решение $x(t)$, $t \in [t_0, \mathcal{G}]$, системы линейных однородных дифференциальных уравнений с непрерывными по t коэффициентами

$$\dot{x}(t) = [A(t) + \sum_{i \in \mathbb{N}} Q_i(t)]x \quad x(t_0) = x_0.$$

Потом формируют *реализации* выбранных ими стратегий $u_i[t] = u_i(t, x(t)) = Q_i(t)x(t)$ ($i \in \mathbb{N}$); заметим, что тогда n -вектора $u_i[t]$ непрерывны на $[t_0, \mathcal{G}]$. На непрерывных парах $(x(t), u[t]) = (u_1[t], \dots, u_6[t])$ априори задана *функция выигрыша* i -го игрока в виде квадратичного функционала

$$I_i(U, t_0, x_0) = x'(\mathcal{G})\overline{C}_i x(\mathcal{G}) + \int_{t_0}^{\mathcal{G}} \left(\sum_{j \in \mathbb{N}} u'_j[t] \overline{D}_{ij} u_j[t] \right) dt \quad (i \in \mathbb{N}), \quad (9)$$

причем штрих сверху означает операцию транспонирования; не ограничивая общности, считаем априори заданные постоянные $n \times n$ -матрицы $\overline{C}_i, \overline{D}_{ij}$ симметричными. Заметим, что первые слагаемые в (9) называют *терминальными*, вторые – *интегральными*, а значение (9) – *выигрышем* игрока i в игре Γ_D . На *содержательном уровне* игроки, каждый на своем «коалиционном совещании», выбирают коллегиально свои стратегии; чтобы компоненты их трехкоординатных выигрышей $I_{K_l} = (I_r | r \in K_l)$ ($l=1,2$) были возможно больше (и удовлетворяли условию индивидуальной рациональности). При выборе оптимального решения базируемся на определении 2.1, т. е. на коалиционной Парето-максимальной ситуации.

Предварительно упростим управляемую систему из Γ_D с помощью замены $y = X^{-1}(t)x$, где $X(t)$ – фундаментальная $n \times n$ -матрица решений системы $\frac{dx}{dt} = A(t)x$, $X(\mathcal{G}) = E_n$ (E_n – единичная $n \times n$ -матрица). В результате система Σ_x переходит в Σ_y :

$$\frac{dy}{dt} = \sum_{i \in \mathbb{N}} u_i, \quad y(t_0) = X^{-1}(t_0)x_0,$$

множество стратегий i -го игрока $\overline{\mathfrak{A}}_i$ в

$$\overline{\mathfrak{A}}_i = \{U_i \div u_i(t, y) = Q_i(t)y \mid \forall Q_i(\cdot) \in C_{n \times n}[0, \mathcal{G}]\},$$

функция выигрыша i -го игрока $I_i(U, t_0, y_0)$ в

$$\mathcal{I}_i(U_i, t_0, y_0) = y'(\mathcal{G})C_i y(\mathcal{G}) + \int_{t_0}^{\mathcal{G}} \left(\sum_{j \in \mathbb{N}} u'_j[t] D_{ij} u_j[t] \right) dt, \quad (10)$$

где постоянные $n \times n$ -матрицы C_i, D_{ij} симметричны.

В результате исходная игра (8) приводится к виду

$$\Gamma_d = \langle \mathbb{N}, \{K_1, K_2\}, \Sigma_y, \{\overline{\mathfrak{A}}_i\}_{i \in \mathbb{N}}, \{\mathcal{I}_i(U, t_0, y_0)\}_{i \in \mathbb{N}} \rangle. \quad (11)$$

Возможная *экономическая интерпретация* (11). Предположим, что существует промышленный кластер, состоящий из шести предприятий, входящих, помимо того, в два объединения (или группы). Как правило, цель предприятия (или организации) – одновременное уменьшение расходов (затрат на выпуск продукции) (при $C_i < 0$), а также увеличение внутренних инвестиций (при $D_{ii} > 0$) в собственное производство. Дополнительным условием являются противоположные интересы остальных участников кластера (если $D_{ij} < 0$ ($i \neq j$)).

В связи с этим далее предполагается, что

$$C_i < 0, \quad D_{ii} > 0, \quad D_{ij} < 0 \quad (i, j \in \mathbb{N}; j \neq i). \quad (12)$$

Перейдем к использованию определения 2.1, но уже для дифференциальной игры (11). Именно, введём для каждой коалиции K_1 и K_2 множество её стратегий $U_{K_l} \in \overline{\mathfrak{A}}_{K_l} = \prod_{r \in K_l} \overline{\mathfrak{A}}_r$

($l=1,2$), кроме того, используем трёхмерный функционал её выигрышей, который с учётом $U = (U_{K_1}, U_{K_2})$ представим в виде $\mathcal{I}_{K_l}(\mathcal{I}_j | j \in K_l)$ ($l=1,2$). Тогда

$$\mathcal{I}_{K_1}(U, t_0, y_0) = (\mathcal{I}_1(U_{K_1}, U_{K_2}, t_0, y_0), \mathcal{I}_2(U_{K_1}, U_{K_2}, t_0, y_0), \mathcal{I}_3(U_{K_1}, U_{K_2}, t_0, y_0))$$

и

$$\mathcal{I}_{K_2}(U, t_0, y_0) = (\mathcal{I}_4(U_{K_1}, U_{K_2}, t_0, y_0), \mathcal{I}_5(U_{K_1}, U_{K_2}, t_0, y_0), \mathcal{I}_6(U_{K_1}, U_{K_2}, t_0, y_0)).$$

Определение 4.1. Пару $(U^P, \mathcal{I}^P) = (U_{K_1}^P, U_{K_2}^P; \mathcal{I}_{K_1}(U^P, t_0, y_0), \mathcal{I}_{K_2}(U^P, t_0, y_0)) \in \mathfrak{A} \times \mathbb{R}^6$ назовём коалиционно Парето-оптимальным решением (КПО) игры Γ_d , если при любых начальных позициях $(t_0, y_0) \in [0, \vartheta) \times \mathbb{R}^n$, $y_0 \neq 0_n$,

$$\begin{cases} \text{MAX}_{U_{K_1} \in \mathfrak{A}_{K_1}}^P \mathcal{I}_{K_1}(U_{K_1}, U_{K_2}^P, t_0, y_0) = \mathcal{I}_{K_1}(U^P, t_0, y_0), \\ \text{MAX}_{U_{K_2} \in \mathfrak{A}_{K_2}}^P \mathcal{I}_{K_2}(U_{K_1}^P, U_{K_2}, t_0, y_0) = \mathcal{I}_{K_2}(U^P, t_0, y_0), \end{cases}$$

где, например, $\text{MAX}_{U_{K_1} \in \mathfrak{A}_{K_1}}^P \mathcal{I}_{K_1}(U_{K_1}, U_{K_2}^P, t_0, y_0)$ означает максимальность по Парето на множестве \mathfrak{A}_{K_1} трёхмерного функционала $\mathcal{I}_{K_1}(U_{K_1}, U_{K_2}^P, t_0, y_0)$. В этой статье максимум (по Парето) будем реализовывать, следуя свойству 1.1 (с нахождением скалярного максимума линейной свёртки трёх компонент $\mathcal{I}_{K_1}(U_{K_1}, U_{K_2}^P, t_0, y_0)$ с положительными коэффициентами).

5. Вспомогательные сведения из теории матриц и квадратичных форм

Далее для постоянной симметричной $n \times n$ -матрицы $D > 0$ (< 0) означает определённую положительность (отрицательность) квадратичной формы $x'Dx$, где $x \in \mathbb{R}^n$.

Утверждение 5.1. [14, с. 108]. Имеют место две цепочки импликаций:

$$\text{a) } D > 0 \Rightarrow 0 \leq \lambda x'x \leq x'Dx \leq \Lambda x'x \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, \quad \text{b) } D < 0 \Rightarrow -\Lambda x'x \leq x'Dx \leq -\lambda x'x \quad \forall x \in \mathbb{R}^n,$$

здесь уже λ ($-\Lambda$) – наименьший и Λ ($-\lambda$) – наибольший корни уравнения $\det[D - \lambda E_n] = 0$; причём $0 < \lambda \leq \Lambda$, E_n – единичная $n \times n$ -матрица.

Замечание 5.1. Неоднократно используем управляющее воздействие вида $u_i = \alpha e_n' x$, e_n – n -вектор-столбец со всеми компонентами, равными плюс единице, тогда $e_n' e_n = n$, число $\alpha = \text{const} > 0$.

Утверждение 5.2. Если $D > 0$, то для Λ – наибольшего из корней $\det[D - \lambda E_n] = 0$ будет:

$$\text{a) [14]: } \Lambda < nM - \text{где } M \text{ максимум модулей элементов } d_{ij} \text{ матрицы } D = (d_{ij});$$

$$\text{b) [15]: } \Lambda < \min_{i=1, \dots, n} \sum_{j=1}^n |d_{ij}|.$$

Утверждение 5.3. Справедлива эквиваленция $D < 0 \Leftrightarrow (-1)D = -D > 0$ (т. е. умножаем все элементы постоянной симметричной $n \times n$ -матрицы D на минус единицу) и тогда $-\Lambda > 0$, наибольший из корней уравнения $\det[-D - \lambda E_n] = 0$, совпадает с наименьшим из корней уравнения $\det[D - \lambda E_n] = 0$.

Замечание 5.2. Согласно утверждению 5.3 для оценки наименьшего из корней $\det[D - \lambda E_n] = 0$ достаточно оценить наибольший из корней характеристического уравнения $\det[-D - \lambda E_n] = 0$.

Утверждение 5.4. (аналог лемм 4.1 и 4.2 из [7]) Справедливы импликации: где $i, j \in \mathbb{N}$, $j \neq i$

и

а) $D_{ii} > 0 \Rightarrow$ для каждого $U_{-i}^* \in \mathfrak{A}_{-i}$ и $U_i^* \in \mathfrak{A}_i$ существует «своя» постоянная $\alpha_i^*(U_i^*, U_{-i}^*, t_0, y_0) > 0$, при которой для всех постоянных $\alpha > \alpha_i^*(U_{-i}^*, U_i^*)$ при стратегии $\bar{U}_i \div \alpha e_n' u$ выполняется строгое неравенство

$$\mathcal{I}_i(\bar{U}_i, U_{-i}^*, t_0, y_0) > \mathcal{I}_i(U_i^*, U_{-i}^*, t_0, y_0).$$

Напомним, что функция выигрыша \mathcal{I}_i определена в (10), а $-i = \mathbb{N} \setminus \{i\} = \{1, 2, \dots, i-1, i+1, \dots, N\}$;

b) $D_{ij} < 0$ ($j \neq i$) \Rightarrow при любых $U_j^* \in \mathcal{A}_j$ и $U_{-j}^* \in \mathcal{A}_{-j}$ существует «своя» постоянная $\alpha_j^*(U_j^*, U_{-j}^*, t_0, y_0) > 0$ такая, что $\forall \alpha > \alpha_j^*(U_j^*, U_{-j}^*)$ при стратегии $\overline{U}_j \div \alpha e'_n$ у будет

$$\mathcal{I}_j(\overline{U}_j, U_{-j}^*, t_0, y_0) < \mathcal{I}_j(U_j^*, U_{-j}^*, t_0, y_0).$$

Наконец, в [5, 6] установлена справедливость следующих утверждений.

Теорема 5.1. В игре Γ_d при выполнении (12):

a) не существует равновесия по Нэшу;

b) не существует $\min_{U_i \in \mathcal{A}_i} \mathcal{I}_i(U_i, U_{-i}, t_0, y_0)$, и как раз поэтому условие индивидуальной рациональности в игре Γ_d можно не учитывать (в определении оптимального решения);

с) если кроме (12) выполняются ограничения на корни соответствующих характеристических уравнений $\Lambda_{11}\Lambda_{22} < \Lambda_{12}\Lambda_{21}$, то в игре (11) существует [5] паретовское равновесие угроз и контругроз.

В заключение перейдём к центральному результату настоящей статьи: построению явного вида КПО-решения для коалиционной игры (11). При этом будем основываться на свойстве 1.1 и методе динамического программирования Беллмана. Понадобится также дополнительно решить одну статическую N -критериальную задачу, с которой начинается следующий параграф.

В заключение перейдём к центральному результату настоящей статьи: построению явного вида КПО-решения для коалиционной игры (11). При этом будем основываться на свойстве 1.1 и методе динамического программирования Беллмана. Понадобится также дополнительно решить одну статическую N -критериальную задачу, с которой начинается следующий параграф.

6. Максимальные по Парето ситуации и паретовские выигрыши

Прежде всего приведем вспомогательные утверждения (см. далее лемму 6.1).

Рассмотрим 6-критериальную статическую задачу

$$\Gamma_6 = \left\langle \mathbb{R}^{6n}, \{f_i(u) = u'_1 D_{i1} u_1 + \dots + u'_6 D_{i6} u_6\}_{i=1, \dots, 6} \right\rangle,$$

в которой ЛПР выбирает альтернативу $u = (u_1, \dots, u_6) \in \mathbb{R}^{6n}$ с целью достичь одновременно возможно больших значений всех 6 компонент векторного критерия $f(u) = (f_1(u), \dots, f_6(u))$. Аналогом определения 1.2 здесь будет: альтернатива u^P максимальна по Парето в Γ_6 , если при $\forall u \in \mathbb{R}^{6n}$ несовместна система неравенств $f_i(u) \geq f_i(u^P)$ ($i=1, \dots, 6$), из которых хотя бы одно строгое.

Ниже используем аналог свойства 1.1.

Лемма 6.1. Если в задаче Γ_6 симметричны постоянные $n \times n$ -матрицы D_{ij} , а положительные числа $\Lambda_{ii}, \Lambda_{ij}$ ($i, j=1, \dots, 6, i \neq j$) таковы, что

$$D_{ii} > 0, D_{ij} < 0 \text{ (при } i \neq j), \Lambda_{11}\Lambda_{22} < \Lambda_{12}\Lambda_{21}, \Lambda_{44}\Lambda_{55} < \Lambda_{45}\Lambda_{54},$$

то при постоянных α_i^* ($i \in \mathbb{N}$) таких, что

$$\begin{aligned} \alpha_1^* = 1, \alpha_2^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{11}}{\Lambda_{21}} + \frac{\Lambda_{12}}{\Lambda_{22}} \right), \alpha_3^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{13} + \alpha_2^* \Lambda_{23}}{\Lambda_{33}} \right), \\ \alpha_4^* = 1, \alpha_5^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{44}}{\Lambda_{54}} + \frac{\Lambda_{45}}{\Lambda_{55}} \right), \alpha_6^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{46} + \alpha_5^* \Lambda_{45}}{\Lambda_{66}} \right), \end{aligned} \quad (13)$$

квадратичные формы

$f(u) = \alpha_1^* f_1(u) + \alpha_2^* f_2(u) + \alpha_3^* f_3(u) + \alpha_4^* f_4(u) + \alpha_5^* f_5(u) + \alpha_6^* f_6(u) = u'_1 D_1(\alpha^*) u_1 + \dots + u'_6 D_6(\alpha^*) u_6$ становятся определённно отрицательными; здесь

$$D_i(\alpha^*) = \alpha_1^* D_{1i} + \alpha_2^* D_{2i} + \alpha_3^* D_{3i} + \alpha_4^* D_{4i} + \alpha_5^* D_{5i} + \alpha_6^* D_{6i},$$

кроме того, $\Lambda_{ii} > 0$ – наибольший корень характеристического уравнения $\Delta_{ii}(\Lambda) = \det[D_{ii} - \Lambda E_n] = 0$, соответственно, $-\Lambda_{ij} < 0$ – наибольший (по абсолютной величине) корень уравнения $\delta_{ij}(\Lambda) = \det[D_{ij} - \Lambda E_n] = 0$ ($i, j \in \{1, \dots, 6\}$, $j \neq i$), также напомним, что E_n – единичная 6×6 -матрица.

Доказательство. В силу симметричности $n \times n$ -матриц $D_{ii} > 0$, $D_{ij} < 0$ ($i, j \in \mathbb{N}$; $j \neq i$), используемых в задаче Γ_6 , корни характеристических уравнений $\Delta_{ii}(\Lambda) = 0$ и $\delta_{ij}(\Lambda) = 0$ вещественны, кроме того, $\Lambda_{ii} > 0$, $-\Lambda_{ij} < 0$ ($i, j \in \mathbb{N}$, $j \neq i$). Так как выполнены оценки $u_i' D_{ii} u_i \leq \Lambda_{ii} u_i' u_i$ и $u_j D_{ij} u_j' \leq -\Lambda_{ij} u_j' u_j$ (утверждение 5.1), то с учётом (см. ниже) табл. 6.1

$$\begin{aligned} f(u) &= \alpha_1^* f_1(u) + \alpha_2^* f_2(u) + \dots + \alpha_6^* f_6(u) = \\ &= u_1' [\alpha_1^* D_{11} + \alpha_2^* D_{21} + \dots + \alpha_6^* D_{61}] u_1 + \dots + u_6' [\alpha_1^* D_{16} + \alpha_2^* D_{26} + \dots + \alpha_6^* D_{66}] u_6 \leq \\ &\leq [\alpha_1^* \Lambda_{11} + \alpha_2^* (-\Lambda_{21}) + \dots + \alpha_6^* (-\Lambda_{61})] u_1' u_1 + \dots + [\alpha_1^* (-\Lambda_{16}) + \alpha_2^* (-\Lambda_{26}) + \dots + \alpha_6^* \Lambda_{66}] u_6' u_6. \end{aligned}$$

Заметим, что для проверки приведённых ниже формул удобнее воспользоваться следующими табл. 6.1 и 6.2.

Таблица 6.1

α_1^*	\mathcal{I}_1	D_{11}	D_{12}	D_{13}	D_{14}	D_{15}	D_{16}
α_2^*	\mathcal{I}_2	D_{21}	D_{22}	D_{23}	D_{24}	D_{25}	D_{26}
α_3^*	\mathcal{I}_3	D_{31}	D_{32}	D_{33}	D_{34}	D_{35}	D_{36}
α_4^*	\mathcal{I}_4	D_{41}	D_{42}	D_{43}	D_{44}	D_{45}	D_{46}
α_5^*	\mathcal{I}_5	D_{51}	D_{52}	D_{53}	D_{54}	D_{55}	D_{56}
α_6^*	\mathcal{I}_6	D_{61}	D_{62}	D_{63}	D_{64}	D_{65}	D_{66}

Здесь и далее компоненты вектор-столбца $\alpha^* = (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \alpha_3^*, \alpha_4^*, \alpha_5^*, \alpha_6^*)$, где α_i^* заданы в (13).

В связи с тем, что $u_i' D_{ii} u_i \leq \Lambda_{ii} u_i' u_i$ и $u_j' D_{ij} u_j \leq -\Lambda_{ij} \|u_j\|^2$, а также с учётом табл. 6.2 скалярная функция $f(u) < 0 \quad \forall u \in \mathbb{R}^{6n}$, $u \neq 0_{6n}$, если выполнены все неравенства из табл. 6.2.

Таблица 6.2

$\Lambda_{11}\alpha_1^* - \Lambda_{21}\alpha_2^* - \Lambda_{31}\alpha_3^* - \Lambda_{41}\alpha_4^* - \Lambda_{51}\alpha_5^* - \Lambda_{61}\alpha_6^* < 0$
$-\Lambda_{12}\alpha_1^* + \Lambda_{22}\alpha_2^* - \Lambda_{32}\alpha_3^* - \Lambda_{42}\alpha_4^* - \Lambda_{52}\alpha_5^* - \Lambda_{62}\alpha_6^* < 0$
$-\Lambda_{13}\alpha_1^* - \Lambda_{23}\alpha_2^* + \Lambda_{33}\alpha_3^* - \Lambda_{43}\alpha_4^* - \Lambda_{53}\alpha_5^* - \Lambda_{63}\alpha_6^* < 0$
$-\Lambda_{14}\alpha_1^* - \Lambda_{24}\alpha_2^* - \Lambda_{34}\alpha_3^* + \Lambda_{44}\alpha_4^* - \Lambda_{54}\alpha_5^* - \Lambda_{64}\alpha_6^* < 0$
$-\Lambda_{15}\alpha_1^* - \Lambda_{25}\alpha_2^* - \Lambda_{35}\alpha_3^* - \Lambda_{45}\alpha_4^* + \Lambda_{55}\alpha_5^* - \Lambda_{65}\alpha_6^* < 0$
$-\Lambda_{16}\alpha_1^* - \Lambda_{26}\alpha_2^* - \Lambda_{36}\alpha_3^* - \Lambda_{46}\alpha_4^* - \Lambda_{56}\alpha_5^* - \Lambda_{66}\alpha_6^* < 0$

Более того, из табл. 6.1 получаем, что при

$$\begin{cases} \Lambda_{11}\alpha_1^* - \Lambda_{21}\alpha_2^* - \Lambda_{31}\alpha_3^* < 0, \\ -\Lambda_{12}\alpha_1^* + \Lambda_{22}\alpha_2^* - \Lambda_{32}\alpha_3^* < 0, \\ -\Lambda_{13}\alpha_1^* - \Lambda_{23}\alpha_2^* + \Lambda_{33}\alpha_3^* < 0, \end{cases} \quad (14)$$

а также при

$$\begin{cases} \Lambda_{44}\alpha_4^* - \Lambda_{54}\alpha_5^* - \Lambda_{64}\alpha_6^* < 0, \\ -\Lambda_{45}\alpha_4^* + \Lambda_{55}\alpha_5^* - \Lambda_{65}\alpha_6^* < 0, \\ -\Lambda_{46}\alpha_4^* - \Lambda_{56}\alpha_5^* - \Lambda_{66}\alpha_6^* < 0, \end{cases} \quad (15)$$

Математика

все 6 строгих неравенств из табл. 6.2 имеют место, ибо (кроме (14) и (15)) все остальные слагаемые отрицательны (так как $-\Lambda_{ij} < 0$, $\alpha_i^* > 0$, $i \neq j$).

Установим, что при $\Lambda_{11}\Lambda_{22} < \Lambda_{12}\Lambda_{21}$ и $\Lambda_{44}\Lambda_{55} < \Lambda_{45}\Lambda_{54}$ первые два неравенства из табл. 6.2 выполняются. Действительно, если $\alpha_3^* > 0$, то первые два строгих неравенства (14) имеют место, если $0 < \frac{\Lambda_{11}}{\Lambda_{21}} < \alpha_2^* < \frac{\Lambda_{12}}{\Lambda_{22}}$, что сразу следует из $\Lambda_{11}\Lambda_{22} < \Lambda_{12}\Lambda_{21}$. Наконец, выполнено третье неравенство в (14) для $0 < \alpha_3^* \leq \frac{1}{2} \frac{\Lambda_{13} + \Lambda_{23}\alpha_2^*}{\Lambda_{33}}$, где $\alpha_2^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{11}}{\Lambda_{21}} + \frac{\Lambda_{12}}{\Lambda_{22}} \right)$. Аналогично, для справедливости (15) достаточно, чтобы $\alpha_4^* = 1$, $\alpha_5^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{44}}{\Lambda_{54}} + \frac{\Lambda_{45}}{\Lambda_{55}} \right)$, $\alpha_6^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{46} + \alpha_5^*\Lambda_{45}}{\Lambda_{66}} \right)$. \square

Утверждение 6.1. Если в дифференциальной игре Γ_6

$$D_{ii} > 0, D_{ij} < 0, C_i < 0 \quad (i, j = 1, \dots, 6; i \neq j), \Lambda_{11}\Lambda_{22} < \Lambda_{12}\Lambda_{21}, \Lambda_{44}\Lambda_{55} < \Lambda_{45}\Lambda_{54}, \quad (16)$$

то максимальная по Парето ситуация U^P в 6-критериальной задаче Γ_v будет

$$\begin{aligned} U^P &= (U_1^P, U_2^P, \dots, U_6^P) \div (u_1^P(t, y), u_2^P(t, y), \dots, u_6^P(t, y)) = u^P(t, y) = \\ &= (Q_1^P(t)y, Q_2^P(t)y, \dots, Q_6^P(t)y) = \\ &= (-D_1^{-1}(\alpha^*)\Theta^P(t)y, -D_2^{-1}(\alpha^*)\Theta^P(t)y, \dots, -D_6^{-1}(\alpha^*)\Theta^P(t)y), \end{aligned} \quad (17)$$

где $\Theta^P(\cdot)$ – симметричная, непрерывная на $[0, \mathcal{G}]$ $n \times n$ -матрица

$$\Theta^P(t) = \left\{ C^{-1}(\alpha^*) + \int_t^{\mathcal{G}} [D_1^{-1}(\alpha^*) + D_2^{-1}(\alpha^*) + \dots + D_6^{-1}(\alpha^*)] d\tau \right\}^{-1} \quad (18)$$

и постоянные симметричные $n \times n$ -матрицы

$$D_i(\alpha^*) = D_{1i} + \alpha_2^* D_{2i} + \dots + \alpha_6^* D_{6i} \quad (i = 1, \dots, 6); \quad (19)$$

положительные числа $\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots, \alpha_6^*$ определены рекуррентным образом в лемме 6.1.

Доказательство. Найдем максимальную по Парето ситуацию U^P , применяя лемму 6.1 (конкретно, табл. 6.2 и метод динамического программирования (МДП) из [10, с. 112]). Само применение МДП здесь сведётся к осуществлению двух этапов. *На первом* для задачи Γ_6 нужно найти 6 положительных чисел $\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots, \alpha_6^*$, а также непрерывно дифференцируемую скалярную функцию $V(t, y) = y'\Theta(t)y$, $\Theta(t) = \Theta'(t) \quad \forall t \in [0, \mathcal{G}]$ и n -вектор-функции $u_i(t, y, V)$ ($i \in \mathbb{N}$) такие, что $\forall y \in \mathbb{R}^n$

$$V(\mathcal{G}, y) = y'C(\alpha^*)y, \quad C(\alpha^*) = C_1 + \alpha_2^*C_2 + \dots + \alpha_6^*C_6;$$

затем с помощью скалярной функции

$$W(t, y, u_1, \dots, u_6, V) = \frac{\partial V}{\partial t} + \left[\frac{\partial V}{\partial y} \right]' (u_1 + \dots + u_6) + \alpha_1^* u_1' D_1(\alpha^*) u_1 + \dots + \alpha_6^* u_6' D_6(\alpha^*) u_6$$

определить n -вектор-функции $u_i(t, y, V)$ ($i \in \mathbb{N}$), исходя из $\left(\frac{\partial V}{\partial y} = \text{grad}_y V \right)$,

$$\max_{u_1, \dots, u_6} W(t, y, u_1, \dots, u_6, V) = \text{Idem} \{ u_i \rightarrow u_i(t, y, V) \quad (i = 1, \dots, 6) \} \quad (20)$$

при любых $(t, y, V) \in [0, \mathcal{G}] \times \mathbb{R}^{n+1}$. Достаточные условия существования $u(t, y, V)$ в (20) сводятся к выполнению требований: при $\forall (t, y) \in [0, \mathcal{G}] \times \mathbb{R}^n$ чтобы выполнялись 12 тождеств

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial u_i} \Big|_{u(t,y,V)} &= \frac{\partial V}{\partial y} + 2D_i(\alpha^*)u_i(t,y,V) = 0_n \quad (i=1,\dots,6), \\ \frac{\partial^2 W}{\partial u_i^2} &= 2D_i(\alpha^*) < 0 \quad (i=1,\dots,6), \end{aligned} \quad (21)$$

где $D_i(\alpha^*) < 0$ в силу леммы 6.1.

Из (21) получаем

$$u_i(t,y,V) = -\frac{1}{2}D_i^{-1}(\alpha^*)\frac{\partial V}{\partial y} \quad (i=1,\dots,6). \quad (22)$$

Тогда

$$W(t,y,u(t,y,V),V) = W[t,y,V] = \frac{\partial V}{\partial t} - \frac{1}{4} \left[\frac{\partial V}{\partial y} \right]' \left(D_1^{-1}(\alpha^*) + \dots + D_6^{-1}(\alpha^*) \right) \frac{\partial V}{\partial y}.$$

Второй этап. Найдем решение первого уравнения из (21) вида $V = V^P(t,y) = y'\Theta^P(t)y$,

$\Theta^P(t) = [\Theta^P(t)]'$ дифференциального уравнения с частными производными

$$W(t,y,V) = 0$$

с граничным условием $(C(\alpha^*) = C_1 + \alpha_2^*C_2 + \dots + \alpha_6^*C_6)$. Так как

$$V(\mathcal{G},y) = y'C(\alpha^*)y \quad \forall y \in \mathbb{R}^n,$$

то при $\forall t \in [0,\mathcal{G}]$, $\forall y \in \mathbb{R}^n$ должно иметь место

$$W[t,y,V(t,y) = y'\Theta^P y] = 0, \quad V(\mathcal{G},y) = y'C(\alpha^*)y \quad \forall y \in \mathbb{R}^n.$$

Оба эти требования выполнены, если симметричная $n \times n$ -матрица $\Theta^P(t)$ удовлетворяет матричному дифференциальному уравнению типа Риккати ($0_{n \times n}$ – нулевая $n \times n$ -матрица):

$$\dot{\Theta}^P(t) - \Theta^P(t) \left(D_1^{-1}(\alpha^*) + \dots + D_6^{-1}(\alpha^*) \right) \Theta^P(t) = 0_{n \times n},$$

$$\Theta^P(\mathcal{G}) = C(\alpha^*) = \alpha_1^*C_1 + \alpha_2^*C_2 + \dots + \alpha_6^*C_6;$$

решение Θ^P полученного матричного уравнения имеет [10, с. 65] вид (18). Здесь учтена импликация

$$C_i < 0 \quad (i=1,\dots,6) \Rightarrow C(\alpha^*) = \alpha_1^*C_1 + \alpha_2^*C_2 + \dots + \alpha_6^*C_6 < 0.$$

Наконец, из (22) приходим к справедливости (17). Таким образом, максимальная по Парето ситуация U^P в задаче Γ_6 имеет вид (17)–(19). \square

Перейдем к построению максимальных по Парето выигрышей $J^P = (J_1^P, \dots, J_6^P) = (J_1(U^P, t_0, y_0), \dots, J_6(U^P, t_0, y_0))$ опять таки с помощью метода динамического программирования [10].

Утверждение 6.2. Пусть выполнены требования (16) (из утверждения 6.1) и для дифференциальной игры Γ_6 удалось найти 6 скалярных непрерывно дифференцируемых функций вида $V_i(t,y) = y'\Theta_i(t)y$ ($i=1,\dots,6$) таких, что

- 1) $V_i(\mathcal{G},y) = y'C_i y \quad \forall y \in \mathbb{R}^n$;
- 2) система из шести уравнений с частными производными

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_i}{\partial t} + \left[\frac{\partial V_i}{\partial y} \right]' N(t)y + y'\Theta^P(t)M_i(t)\Theta^P(t)y &= 0, \\ V_i(\mathcal{G},y) &= y'C_i y \quad \forall y \in \mathbb{R}^n \quad (i=1,\dots,6) \end{aligned} \quad (23)$$

имеет решение вида $V_i(t,y) = y'\Theta_i(t)y$, $[\Theta_i(t)]' = \Theta_i(t)$ ($i=1,\dots,6$).

Тогда при любой начальной позиции $(t_0, y_0) \in [0, \mathcal{G}] \times \mathbb{R}^n$, $y_0 \neq 0_n$ имеет место

$$J_i^P = J_i(U^P, t_0, y_0) = y_0' \Theta_i(t_0) y_0 \quad (i=1, \dots, 6).$$

В (23) непрерывные $n \times n$ -матрицы

$$N(t) = -\left(D_1^{-1}(\alpha^*) + \dots + D_6^{-1}(\alpha^*)\right) \Theta^P(t),$$

$$M_i(t) = \Theta^P(t) \left[D_1^{-1}(\alpha^*) D_{i1} D_1^{-1}(\alpha^*) + \dots + D_6^{-1}(\alpha^*) D_{i6} D_6^{-1}(\alpha^*) \right] \Theta^P(t) \quad (i=1, \dots, 6),$$

$n \times n$ -матрицы $\Theta^P(t)$ и $D_i(\alpha^*)$ приведены в (18) и (19), а симметричные $n \times n$ -матрицы

$$\Theta_i(t) = \left[Y^{-1}(t) \right]' \left\{ C_i - \int_t^{\mathcal{G}} Y'(\tau) \Theta^P(\tau) M_i(\tau) \Theta^P(\tau) Y(\tau) d\tau \right\} Y^{-1}(t) \quad (i=1, \dots, 6), \quad (24)$$

Наконец $Y(t)$ – фундаментальная матрица решения однородной системы $\dot{y} = N(t)y$, $Y(\mathcal{G}) = E_n$.

Доказательство. Составим скалярные функции

$$W_i[t, y, V_i] = \frac{\partial V_i}{\partial t} + \left[\frac{\partial V_i}{\partial y} \right]' N(t)y + \left[u_1^P(t, y) \right]' D_{i1} u_1^P(t, y) + \dots + \left[u_6^P(t, y) \right]' D_{i6} u_6^P(t, y) \quad (i=1, \dots, 6), \quad (25)$$

причем $u_i^P(t, y)$ – n -вектор-функции, определенные в (17).

Ищем решение $V_i(t, y)$ ($i=1, \dots, 6$) системы из 6 уравнений с частными производными

$$W_i[t, y, V_i] = 0, \quad V_i(\mathcal{G}, y) = y' C_i y \quad \forall y \in \mathbb{R}^n \quad (i=1, \dots, 6) \quad (26)$$

в виде квадратичной формы $V_i(t, y) = y' \Theta_i(t) y$, $[\Theta_i(t)]' = \Theta_i(t)$ ($i=1, \dots, 6$).

Установим два факта.

Во-первых, решению системы (25), (26) присуще свойство

$$V_i(t_0, y_0) = J_i(U^P, t_0, y_0) \quad (i=1, \dots, 6), \quad (27)$$

где ситуация $U^P = (U_1^P, \dots, U_6^P)$ имеет вид (17). Действительно, если U^P – ситуация из (16)–(19), то согласно (25) и (26) для решения $y^P(t)$ системы $\dot{y} = N(t)y$, $y(t_0) = y_0 \neq 0_n$ при $y = y^P(t)$ будет

$$0 = W_i[t, y^P(t), V_i(t, y^P(t))] = \frac{\partial V_i(t, y^P(t))}{\partial t} + \left[\frac{\partial V_i(t, y^P(t))}{\partial y} \right]' N(t)y^P(t) + \sum_{j=1}^6 \left[u_j^P(t, y^P(t)) \right]' D_{ij} u_j^P(t, y^P(t)) = W_i[t] \quad \forall t \in [t_0, \mathcal{G}] \quad (i=1, \dots, 6).$$

Интегрируя обе части этого тождества в пределах от t_0 до \mathcal{G} с учетом граничных условий из (26), приходим к

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{t_0}^{\mathcal{G}} W_i[t] dt = \int_{t_0}^{\mathcal{G}} \frac{dV_i(t, y^P(t))}{dt} dt + \int_{t_0}^{\mathcal{G}} \sum_{j=1}^6 \left[u_j^P(t, y^P(t)) \right]' D_{ij} u_j^P(t, y^P(t)) dt = \\ &= V_i(\mathcal{G}, y^P(\mathcal{G})) - V_i(t_0, y^P(t_0)) + \int_{t_0}^{\mathcal{G}} \sum_{j=1}^6 \left[u_j^P(t, y^P(t)) \right]' D_{ij} u_j^P(t, y^P(t)) dt = \\ &= y'(\mathcal{G}) C_i y(\mathcal{G}) + \int_{t_0}^{\mathcal{G}} \sum_{j=1}^6 \left[u_j^P(t, y^P(t)) \right]' D_{ij} u_j^P(t, y^P(t)) dt - V_i(t_0, y^P(t_0)) = \\ &= J_i(U^P, t_0, y_0) - V_i(t_0, y^P(t_0)) \quad (i=1, \dots, 6), \end{aligned}$$

отсюда сразу следует справедливость равенства (27).

Во-вторых, установим, что решение $V_i(t, y)$ ($i \in \mathbb{N}$) системы (26) имеет вид $V_i(t, y) = y' \Theta_i(t) y$, где симметричная $n \times n$ -матрица $\Theta_i(t)$ представима в виде (24). В самом деле, подставив $V_i(t, y) = y' \Theta_i(t) y$ в (26), получаем справедливость (24), если только $\Theta_i(t)$ ($i=1, \dots, 6$) является решением матричного линейного неоднородного дифференциального уравнения

$$\dot{\Theta}_i + \Theta_i N + N \Theta_i + \Theta^P(t) M_i \Theta^P(t) = 0_{n \times n}, \quad \Theta_i(\mathcal{G}) = C_i \quad (i=1, \dots, 6). \quad (28)$$

Подстановкой $\Theta_i(t)$ из (24) убедимся, что симметричная $n \times n$ -матрица $\Theta_i(t)$ из (24) в самом деле является решением (28), что и завершает доказательство утверждения 6.2. \square

Замечание 6.1. Объединение утверждений 6.1 и 6.2 приводит к следующему итоговому результату, касающемуся явного вида максимального по Парето решения $(U^P, J^P) \in \mathfrak{A} \times \mathbb{R}^6$ игры Γ_6 .

Пусть для дифференциальной игры Γ_6 :

1) постоянные симметричные $n \times n$ -матрицы

$$D_{ii} > 0, \quad D_{ij} < 0, \quad C_i < 0, \quad (i, j=1, \dots, 6; i \neq j);$$

2)

$$[\Lambda_{11} \Lambda_{22} < \Lambda_{12} \Lambda_{21}], \quad [\Lambda_{44} \Lambda_{55} < \Lambda_{45} \Lambda_{54}].$$

Тогда при $\forall (t_0, y_0) \in [0, \mathcal{G}] \times \mathbb{R}^n$, $y_0 \neq 0_n$ будет

$$U^P \div u^P(t, y) = (-D_1^{-1}(\alpha^*) \Theta^P(t) y, -D_2^{-1}(\alpha^*) \Theta^P(t) y, \dots, -D_6^{-1}(\alpha^*) \Theta^P(t) y), \\ J^P = (J_1^P, J_2^P, \dots, J_6^P), \quad J_i^P = y_0' \Theta_i(t_0) y_0 \quad (i=1, \dots, 6),$$

а симметричные $n \times n$ -матрицы $\Theta^P(t)$ и $\Theta_i(t)$ имеют вид:

$$\Theta^P(t) = \left\{ C^{-1}(\alpha^*) + \int_t^{\mathcal{G}} [D_1^{-1}(\alpha^*) + D_2^{-1}(\alpha^*) + \dots + D_6^{-1}(\alpha^*)] d\tau \right\}^{-1}, \\ \Theta_i(t) = [Y^{-1}(t)]' \left\{ C_i - \int_t^{\mathcal{G}} Y'(\tau) \Theta^P(\tau) M_i(\tau) \Theta^P(\tau) Y(\tau) d\tau \right\} Y^{-1}(t) \quad (i=1, \dots, 6),$$

$n \times n$ -матрица $Y(t)$ – фундаментальная матрица решения системы $\dot{y} = N(t)y$, $Y(\mathcal{G}) = E_n$, симметричные матрицы

$$C(\alpha^*) = C_1 + \alpha_2^* C_2 + \dots + \alpha_6^* C_6, \quad D_i(\alpha^*) = \alpha_1^* D_{1i} + \alpha_2^* D_{2i} + \dots + \alpha_6^* D_{6i}, \\ N(t) = -(D_1^{-1}(\alpha^*) + \dots + D_6^{-1}(\alpha^*)) \Theta^P(t), \\ M_i(t) = \Theta^P(t) [D_1^{-1}(\alpha^*) D_{i1} D_1^{-1}(\alpha^*) + \dots + D_6^{-1}(\alpha^*) D_{i6} D_6^{-1}(\alpha^*)] \Theta^P(t),$$

положительные числа $\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots, \alpha_6^*$ определены рекуррентным образом

$$\alpha_1^* = 1, \quad \alpha_2^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{11}}{\Lambda_{21}} + \frac{\Lambda_{12}}{\Lambda_{22}} \right), \quad \alpha_3^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{13} + \alpha_2^* \Lambda_{23}}{\Lambda_{33}} \right), \\ \alpha_4^* = 1, \quad \alpha_5^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{44}}{\Lambda_{54}} + \frac{\Lambda_{45}}{\Lambda_{55}} \right), \quad \alpha_6^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{46} + \alpha_5^* \Lambda_{45}}{\Lambda_{66}} \right),$$

величина $\Lambda_{ii} (-\Lambda_{ij})$ – наибольший (наименьший) корень характеристического уравнения $\det[D_{ii} - \Lambda E_n] = 0$ (соответственно, $\det[D_{ij} - \Lambda E_n] = 0$) ($i, j \in \{1, \dots, 6\}$, $j \neq i$).

7. Явный вид КПО

Перейдём к центральной части статьи – построению явного вида КПО (коалиционного Парето-оптимального решения) игры Γ , формализованного определением 2.1: при выполнении ограничения (16) для игры Γ_d , справедливы равенства

$$\begin{cases} \text{MAX}_{U_{K_1} \in \mathfrak{A}_{K_1}} \mathcal{I}_{K_1}(U_{K_1}, U_{K_2}^P, t_0, y_0) = \mathcal{I}_{K_1}(U^P, t_0, y_0), \\ \text{MAX}_{U_{K_2} \in \mathfrak{A}_{K_2}} \mathcal{I}_{K_2}(U_{K_1}^P, U_{K_2}, t_0, y_0) = \mathcal{I}_{K_2}(U^P, t_0, y_0), \end{cases}$$

что, в свою очередь, будет следовать из

$$\begin{cases} \max_{U_{K_1} \in \mathfrak{A}_{K_1}} \left[\alpha_1^* \mathcal{I}_1(U_{K_1}, U_{K_2}^P, t_0, y_0) + \alpha_2^* \mathcal{I}_2(U_{K_1}, U_{K_2}^P, t_0, y_0) + \alpha_3^* \mathcal{I}_3(U_{K_1}, U_{K_2}^P, t_0, y_0) \right] = \\ = \sum_{j=1}^3 \alpha_j^* \mathcal{I}_j(U^P, t_0, y_0), \end{cases} \quad (29)$$

$$\begin{cases} \max_{U_{K_2} \in \mathfrak{A}_{K_2}} \left[\alpha_4^* \mathcal{I}_4(U_{K_1}^P, U_{K_2}, t_0, y_0) + \alpha_5^* \mathcal{I}_5(U_{K_1}^P, U_{K_2}, t_0, y_0) + \alpha_6^* \mathcal{I}_6(U_{K_1}^P, U_{K_2}, t_0, y_0) \right] = \\ = \sum_{m=4}^6 \alpha_m^* \mathcal{I}_m(U^P, t_0, y_0), \end{cases} \quad (30)$$

при $\forall (t_0, y_0) \in [0, \vartheta) \times \mathbb{R}^n$, где постоянные

$$\alpha_1^* = 1, \alpha_2^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{11}}{\Lambda_{21}} + \frac{\Lambda_{12}}{\Lambda_{22}} \right), \alpha_3^* = \frac{1}{2\Lambda_{33}} (\Lambda_{13} + \alpha_2^* \Lambda_{23}),$$

$$\alpha_4^* = 1, \alpha_5^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{44}}{\Lambda_{54}} + \frac{\Lambda_{45}}{\Lambda_{55}} \right), \alpha_6^* = \frac{1}{2\Lambda_{66}} (\Lambda_{46} + \alpha_5^* \Lambda_{45}),$$

$\Lambda_{ii} > 0$ – наибольший корень $\Delta(\Lambda) = \det [D_{ii} - \Lambda E_n] = 0$, $-\Lambda_{ij} < 0$ – наименьший корень уравнения $\delta_{ij}(\Lambda) = \det [D_{ij} - \Lambda E_n] = 0$ ($i, j \in \{1, \dots, 6\}$, $j \neq i$), $\Lambda_{ij} > 0$; ситуация

$U^P = (U_1^P, \dots, U_6^P) \div (-D_1^{-1}(\alpha^*)) \Theta^P(t)y, \dots, -D_6^{-1}(\alpha^*) \Theta^P(t)y$. Итак, покажем, что найденная в

предыдущем разделе настоящей статьи ситуация $U^P \in \mathfrak{A}$ как раз и представляет собой объединение $(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P) = U^P$, где $U_{K_1}^P = (U_1^P, U_2^P, U_3^P)$ и $U_{K_2}^P = (U_4^P, U_5^P, U_6^P)$, которые найдены в (17)–

(19). Однако именно доказательство справедливости (29) и является содержанием статьи [5] для игры Γ_d , где «заморожены» стратегии $U_{K_2}^P = (U_4^P, U_5^P, U_6^P) \in \mathfrak{A}_{K_2}$ (см. утверждение 3.1 из [5] при

$\alpha_1^* = 1$, $\beta = \alpha_2^*$, $\gamma = \alpha_3^*$); более того, эти самые $(U_1^P, U_2^P, U_3^P) = U_{K_1}^P$ как раз и реализуют $\max_{U_{K_1}^P \in \mathfrak{A}_{K_1}}$ в

(29), что, в свою очередь, и по свойству 1.1 влечёт их максимальность по Парето в трехкритериальной задаче $\left\langle \dot{y} = u_1 + u_2 + u_3, y(t_0) = y_0, \mathfrak{A}_{K_1}, \left\{ \mathcal{I}_i(U_1, U_2, U_3, U_{K_2}^P, t_0, y_0) \right\}_{i=1,2,3} \right\rangle$. Отсюда, как след-

ствии, явный вид $U_{K_1}^P = (U_1^P, U_2^P, U_3^P) \div (-D_1^{-1}(\alpha^*)) \Theta^P(t)y, -D_2^{-1}(\alpha^*) \Theta^P(t)y, -D_3^{-1}(\alpha^*) \Theta^P(t)y$ и

соответствующие выигрыши в такой ситуации $U_{K_1}^P \in \mathfrak{A}_{K_1}$. Аналогично установим справедливость

$U_{K_2}^P = (U_4^P, U_5^P, U_6^P) \div (-D_4^{-1}(\alpha^*)) \Theta^P(t)y, -D_5^{-1}(\alpha^*) \Theta^P(t)y, -D_6^{-1}(\alpha^*) \Theta^P(t)y$ и явный вид

выигрышей в ситуации $U_{K_2}^P = (U_4^P, U_5^P, U_6^P)$. Итак, приходим к справедливости следующего утверждения.

Теорема 7.1. Пусть для коалиционной дифференциальной игры с нетрансферабельными выигрышами

$$\Gamma_d = \left\langle \{K_1 = \{1, 2, 3\}, K_2 = \{4, 5, 6\}\}, \Sigma_y, \left\{ \mathfrak{A}_{K_l} \right\}_{l=1,2}, \left\{ \mathcal{I}_{K_l}(U_{K_1}, U_{K_2}, t_0, x_0) \right\}_{l=1,2} \right\rangle,$$

выполнены ограничения

$$D_{ii} > 0, D_{ij} < 0, C_i < 0, (i, j = 1, \dots, 6; i \neq j); \Lambda_{11}\Lambda_{22} < \Lambda_{12}\Lambda_{21}, \Lambda_{44}\Lambda_{55} < \Lambda_{45}\Lambda_{54}.$$

Тогда коалиционно Парето-оптимальное решение игры Γ_d образует четвёрка

$$(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P; \mathcal{I}_{K_1}(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P, t_0, x_0), \mathcal{I}_{K_2}(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P, t_0, x_0)) \in \mathfrak{A}_{K_1} \times \mathfrak{A}_{K_2} \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3,$$

где $U_{K_1}^P = (U_1^P, U_2^P, U_3^P) \in \mathfrak{A}_{K_1}$, $U_{K_2}^P = (U_4^P, U_5^P, U_6^P) \in \mathfrak{A}_{K_2}$, $U_i^P \div -D_i(\alpha^*)\Theta^P(t)y$ ($i=1, \dots, 6$) симметричные постоянные $n \times n$ -матрицы,

$$D_i(\alpha^*) = \alpha_1^* D_{i1}(\alpha^*) + \alpha_2^* D_{i2}(\alpha^*) + \alpha_3^* D_{i3}(\alpha^*) + \alpha_4^* D_{i4}(\alpha^*) + \alpha_5^* D_{i5}(\alpha^*) + \alpha_6^* D_{i6}(\alpha^*) \quad (i=1, \dots, 6),$$

$$\alpha_1^* = 1, \quad \alpha_2^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{11}}{\Lambda_{21}} + \frac{\Lambda_{12}}{\Lambda_{22}} \right), \quad \alpha_3^* = \frac{1}{2\Lambda_{33}} (\Lambda_{13} + \alpha_2^* \Lambda_{23}),$$

$$\alpha_4^* = 1, \quad \alpha_5^* = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_{44}}{\Lambda_{54}} + \frac{\Lambda_{45}}{\Lambda_{55}} \right), \quad \alpha_6^* = \frac{1}{2\Lambda_{66}} (\Lambda_{46} + \alpha_5^* \Lambda_{45}),$$

непрерывная симметричная $n \times n$ -матрица

$$\Theta^P(t) = \left\{ C^{-1}(\alpha^*) + \int_t^g \left[\sum_{i=1}^6 D_i^{-1}(\alpha^*) \right] d\tau \right\}^{-1},$$

$$\mathcal{I}_{K_1}^P[t_0, y_0] = \mathcal{I}_{K_1}(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P, t_0, x_0) = (\mathcal{I}_1(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P, t_0, x_0), \mathcal{I}_2(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P, t_0, x_0), \mathcal{I}_3(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P, t_0, x_0)),$$

$$\mathcal{I}_{K_2}^P[t_0, y_0] = \mathcal{I}_{K_2}(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P, t_0, x_0) = (\mathcal{I}_4(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P, t_0, x_0), \mathcal{I}_5(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P, t_0, x_0), \mathcal{I}_6(U_{K_1}^P, U_{K_2}^P, t_0, x_0)),$$

$$\mathcal{I}_{K_1}^P = (y_0' \Theta_1(t_0) y_0, y_0' \Theta_2(t_0) y_0, y_0' \Theta_3(t_0) y_0),$$

$$\mathcal{I}_{K_2}^P = (y_0' \Theta_4(t_0) y_0, y_0' \Theta_5(t_0) y_0, y_0' \Theta_6(t_0) y_0),$$

$$C(\alpha^*) = \sum_{i=1}^6 \alpha_i^* C_i,$$

$$\Theta_i(t) = \left[Y^{-1}(t) \right]' \left[C_i - \int_t^g Y'(t) \Theta^P(\tau) M_i(\tau) \Theta^P(\tau) d\tau \right] \cdot Y^{-1}(t),$$

$Y(t)$ – фундаментальная матрица решений системы $\dot{y} = N(t)y$, $Y(g) = E_n$,

$$N(t) = - \sum_{i=1}^6 D_i^{-1}(\alpha^*) \Theta^P(t), \quad M_i(t) = \Theta^P(t) \left[\sum_{j=1}^6 D_j^{-1}(\alpha^*) D_{ij} D_j^{-1}(\alpha^*) \right],$$

где $\Lambda_{ii} > 0$ – наибольший корень $\Delta(\Lambda) = \det[D_{ii} - \Lambda E_n] = 0$, $-\Lambda_{ij} < 0$ – наименьший корень уравнения $\delta_{ij}(\Lambda) = \det[D_{ij} - \Lambda E_n] = 0$ ($i, j \in \{1, \dots, 6\}$, $j \neq i$).

При этом обе коалиции внутренне и внешне устойчивы.

Доказательство. В [5] установлено, что согласно $D_{11} > 0$ в игре Γ_d не существует равновесия по Нэшу, но по утверждению 5.1 из [5] может существовать угроза на внутреннюю устойчивость коалиции K_1 (т. е. $\exists U_1^T \div \alpha e_n y$ и $\alpha^* = \text{const} > 0$ такие, что при $\forall \alpha > \alpha^*$ (e_n – n -вектор с единичными компонентами) будет $\mathcal{I}_1(U_1^T, U_2^P, U_3^P, U_{K_2}^P, t_0, y_0) > \mathcal{I}_1(U^P, t_0, y_0)$).

В ответ на такую угрозу и согласно $D_{12} < 0$ у игрока 2 из коалиции K_1 (по утверждению 5.4 из [5]) существует $\bar{\alpha}_1 > 0$ и такое, что при $\forall \alpha > \bar{\alpha}_1$ будет для $U_2^C \div \alpha e_n y$

$$\mathcal{I}_1(U_1^T, U_2^C, U_3^P, U_{K_2}^P, t_0, y_0) < \mathcal{I}_1(U^P, t_0, y_0),$$

аналогично, согласно $D_{22} > 0$ \exists число $\bar{\alpha}_2 > 0$, для которого при $\forall \alpha > \bar{\alpha}_2$ будет

$$\mathcal{I}_2(U_1^T, U_2^C, U_3^P, U_{K_2}^P, t_0, y_0) > \max_{U_{K_1} \in \mathfrak{A}_{K_1}} \mathcal{I}(U_{K_1}, U_{K_2}^P, t_0, y_0).$$

Но тогда для стратегии U_2^C при $\alpha > \max\{\bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2\}$ два последних строгих неравенства «объединяются» в контругрозу на внутреннюю устойчивость коалиции K_1 со стороны игрока 1.

Таким образом, устанавливается внутренняя устойчивость K_1 и аналогичными рассуждениями внутренняя устойчивость K_2 .

Заключение

Итак, при выполнении ограничений (16) в игре Γ существует КПО решение (его явный вид можно найти в теореме 7.1). В конце статьи хотелось бы упомянуть о возможности предложенным здесь приёмом решать вопросы об устойчивости более сложных коалиционных структур.

Литература

1. Парилина, Е.М. Новый подход к определению характеристической функции в стохастических играх / Е.М. Парилина, Л.А. Петросян // Устойчивость, управление, дифференциальные игры (SCDG2019): Материалы Международной конференции, посвященной 95-летию со дня рождения академика НН Красовского, (Екатеринбург, 16–20 сентября 2019 г.). Екатеринбург: ИММ УрО РАН, 2019. – 2019. – С. 243–247.
2. Parilina, E. On a Simplified Method of Defining Characteristic Function in Stochastic Games / E. Parilina, L. Petrosyan // Mathematics. – 2020. – Vol. 8, Iss. 7. – P. 1135.
3. Mazalov, V.V. Fish wars and cooperation maintenance / V.V. Mazalov, A.N. Rettieva // Ecological Modelling. – 2010. – Vol. 221, Iss. 12. – P. 1545–1553.
4. Mazalov, V. The Euler-Equation Approach in Average-Oriented Opinion Dynamics / V. Mazalov, E. Parilina // Mathematics. – 2020. – Vol. 8, Iss. 3. – P. 355.
5. Жуковский, В.И. Паретовское равновесие угроз и контругроз в одной дифференциальной игре трех лиц / В.И. Жуковский, Ю.Н. Житенева, Ю.А. Бельских // Математическая теория игр и её приложения. – 2019. – Т. 11, № 1. – С. 39–72.
6. Жуковский, В.И. К индивидуальной устойчивости паретовского равновесия угроз и контругроз в одной коалиционной дифференциальной игре с нетрансферабельными выигрышами / В.И. Жуковский, К.Н. Кудрявцев, Л.В. Жуковская, И.С. Стабулит // Математическая теория игр и ее приложения. – 2021. – Т. 13, № 1. – С. 89–101.
7. Salukvadze, M.E. The Berge Equilibrium: A Game-Theoretic Framework for the Golden Rule of Ethics / M.E. Salukvadze, V.I. Zhukovskii. – Birkhäuser Basel, 2020. – 272 p.
8. Zhukovskiy, V.I. The Golden Rule of Ethics: A Dynamic Game-Theoretic Framework Based on Berge Equilibrium / V.I. Zhukovskiy, M.E. Salukvadze, A.Yu. Mazurov. – London, New York: Taylor and Francis, 2021. – 324 p.
9. Жуковский, В.И. Равновесные управления многокритериальных динамических систем / В.И. Жуковский, Н.Т. Тынянский. – М.: МГУ, 1984. – 224 с.
10. Жуковский, В.И. Дифференциальные уравнения. Линейно-квадратичные дифференциальные игры: учебное пособие для вузов / В.И. Жуковский, А.А. Чикрий. – 2-е изд., испр. и доп. – М.: Из-во Юрайт, 2020. – 322 с.
11. Подиновский, В.В. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач / В.В. Подиновский, В.Д. Ногин. – М.: Физматлит, 2007. – 255 с.
12. Карлин, С. Математические методы в теории игр, программировании и экономике / С. Карлин. – М.: Мир, 1964. – 838 с.
13. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. – М.: Наука, 1974. – 456 с.
14. Воеводин, В.В. Матрицы и вычисления / В.В. Воеводин, Ю.А. Кузнецов. – М.: Наука, 1984. – 318 с.
15. Parker, W.V. The characteristic roots of a matrix / W.V. Parker // Duke Math. J. – 1937. – Vol. 3, no. 3. – P. 484–487. DOI: 10.1215/S0012-7094-37-00338-7

Поступила в редакцию 22 февраля 2022 г.

Сведения об авторах

Жуковский Владислав Иосифович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра оптимального управления факультета ВМиК, МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация, e-mail: zhkvlad@yandex.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9594-0115>

Жуковская Лидия Владиславовна – доктор экономических наук, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Центральный экономико-математический институт РАН, г. Москва, Российская Федерация, e-mail: zhukovskaylv@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-4152-3161>

Кудрявцев Константин Николаевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра математического анализа и методики преподавания математики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: kudriavtcevkn@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9279-4490>

Романова Виолетта Эдуардовна – МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация, e-mail: vilca2001@mail.ru

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2022, vol. 14, no. 2, pp. 13–30

DOI: 10.14529/mmph220202

ON ONE MODIFICATION OF NASH EQUILIBRIUM

V.I. Zhukovskiy¹, L.V. Zhukovskaya², K.N. Kudryavtsev³, V.E. Romanova¹

¹ Moscow State University, Moscow, Russian Federation

² Central Economic and Mathematical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation

³ South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

Email: kudriavtcevkn@susu.ru

Abstract. By the end of the last century there were four areas in the mathematical theory of positional differential games: non-coitional positional differential games, cooperative, hierarchical and, finally, the least-understood coalitional positional differential games. In their turn, coalitional games are divided into games with transferable payoffs (games with side payments when players can split profits in the course of the game) and with non-transferable payoffs (games with side payments when there are no such distributions for this or that reason). The coalitional games with side payments are being extensively explored at the Faculties of Applied Mathematics and Management Processes of St. Petersburg University and the Institute of Mathematics and Information Technologies of Petrozavodsk State University (by Professors L.A. Petrosyan, V.V. Mozalov, E.M. Parilina, A.N. Rettieva and their numerous students). However, side payments are not always present even in economic cooperation; moreover, side payments can be legislated against.

We believe that the research of the equilibrium of threats and counter-threats (sanctions and counter-sanctions) in non-coitional differential games that we have carried out over the last years allows to also cover some aspects of non-transferable payoff coalitional games. The article considers the issues of namely the internal and external stability of coalitions in the class of positional differential games. The coefficient constraints were identified for the mathematical model of a linear-quadratic differential positional game with twin-coitional structure for six persons where this coalitional structure is internally and externally stable.

Keywords: Nash equilibrium, equilibrium of threats and counter-threats, Pareto optimality, coalition.

References

1. Parilina E.M., Petrosyan L.A. New Approach to Define Characteristic Function in Stochastic Games (New Approach to Defining Characteristic Function in Stochastic Games). *Stability, Control,*

Differential Games (SCDG2019): Proceedings of the International Conference devoted to the 95th anniversary of Academician N.N. Krasovskii, Yekaterinburg, Russia, 16–20 September 2019, Yekaterinburg, IMM UB RAS, 2019, pp. 243–247. (in Russ.).

2. Parilina E., Petrosyan L. On a Simplified Method of Defining Characteristic Function in Stochastic Games. *Mathematics*, 2020, Vol. 8, no. 7, p. 1135. DOI: 10.3390/math8071135

3. Mazalov V.V., Rettieva A.N. Fish Wars and Cooperation Maintenance. *Ecological Modelling*, 2010, Vol. 221, no. 12, pp. 1545–1553. DOI: 10.1016/j.ecolmodel.2010.03.011

4. Mazalov V., Parilina E. The Euler-Equation Approach in Average-Oriented Opinion Dynamics. *Mathematics*, 2020, Vol. 8, no. 3, p. 355. DOI: 10.3390/math8030355

5. Zhukovskii V.I., Zhiteneva J.N., Belskikh J.A. Pareto Equilibrium of Objections and Counterobjections in a Differential Game of Three Persons. *Mat. Teor. Igr Pril.*, 2019, Vol. 11, Iss. 1, pp. 39–72. (in Russ.).

6. Zhukovskiy V.I., Kudryavtsev K.N., Zhukovskaya L.V., Stabulit I.S. K individual'noj ustoychivosti paretovskogo ravnovesiya ugroz i kontrugroz v odnoi koalicionnoi differencial'noi igre s netransferabel'nymi vyigryshami (To the Individual Stability of Pareto Equilibrium of Objections and Counterobjections in a Coalition Differential Positional 3-Person Game without Side Payments). *Mat. Teor. Igr Pril.*, 2021, Vol. 13, Iss. 1, pp. 89–101. (in Russ.).

7. Salukvadze M.E., Zhukovskii V.I. *The Berge Equilibrium: A Game-Theoretic Framework for the Golden Rule of Ethics*. Basel, Birkhäuser, 2020, 272 p. DOI: 10.1007/978-3-030-25546-6

8. Zhukovskiy V.I., Salukvadze M.E., Mazurov A.Yu. *The Golden Rule of Ethics: A Dynamic Game-Theoretic Framework Based on Berge Equilibrium*. London, Taylor and Francis, 2021, 324 p. DOI: 10.1201/9781003134541

9. Zhukovskii V.I., Tynianskii N.T. *Ravnovesnye upravleniya mnogokriterial'nyh dinamicheskikh system*. (Equilibrium Controls of Multicriteria Dynamical Systems). Moscow, MSU Publ., 1984, 224 p. (in Russ.).

10. Zhukovskii V.I., Chikrii A.A. *Differencial'nye uravneniya. Lineino-kvadratichnye differencial'nye igry*. (Differential Equations. Linear-Quadratic Differential Games). Moscow, Urait Publ., 2019, 322 p. (in Russ.).

11. Podinovskii V.V., Nogin V.D. *Pareto-optimal'nye resheniya mnogokriterial'nyh zadach*. (Pareto-Optimal Solutions of Multicriteria Problems). Moscow, Fizmatlit, 2007, 255 p. (in Russ.).

12. Karlin S. *Matematicheskie metody v teorii igr, programmirovanii i ekonomike*. (Mathematical Methods in Game Theory, Programming, and Economics). Moscow, Mir Publ., 1964, 838 p. (in Russ.).

13. Krasovskii N.N., Subbotin A.I. *Pozicionnye differencial'nye igry*. (Positional Differential Games). Moscow, Nauka, 1974, 456 p. (in Russ.).

14. Voevodin V.V., Kuznecov Yu.A. *Matricy i vychisleniya* (Matrices and Calculations). Moscow, Nauka, 1984, 318 p. (in Russ.).

15. Parker W.V. The characteristic roots of a matrix. *Duke Math. J.*, 1937, Vol. 3, no. 3, pp. 484–487. DOI: 10.1215/S0012-7094-37-00338-7

Received February 22, 2022

Information about the authors

Zhukovsky Vladislav Iosifovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Department of Optimal Control, Faculty of VMiK, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation, e-mail: zhkvlad@yandex.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9594-0115>

Zhukovskaya Lidiya Vladislavovna is Dr. Sc. (Economics), Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Central Economic and Mathematical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation, e-mail: zhukovskaylv@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-4152-3161>

Kudryavtsev Konstantin Nikolaevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Mathematical Analysis and Methods of Teaching Mathematics, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: kudriavtcevkn@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9279-4490>

Romanova Violetta Eduardovna, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation, e-mail: vilca2001@mail.ru

ON UNIQUENESS IN THE PROBLEMS OF DETERMINING POINT SOURCES IN MATHEMATICAL MODELS OF HEAT AND MASS TRANSFER

L.V. Neustroeva

Yugra State University, Khanty-Mansiysk, Russian Federation

E-mail: StarkovaLV@mail.ru

Abstract. We consider the problem of determining point sources for mathematical models of heat and mass transfer. The values of a solution (concentrations) at some points lying inside the domain are taken as overdetermination conditions. A second-order parabolic equation is considered, on the right side of which there is a linear combination of the Dirac delta functions $\delta(x-x_i)$ with coefficients that depend on time and characterize the intensities of sources. Several different problems are considered, including the problem of determining the intensities of sources if their locations are given. In this case, we present the theorem of uniqueness of solutions, the proof of which is based on the Phragmén–Lindelöf theorem. Next, in the model case, we consider the problem of simultaneous determining the intensities of sources and their locations. The conditions on the number of measurements (the overdetermination conditions) are described which ensure that a solution is uniquely determined. Examples are given to show the accuracy of the results. This problem arises when solving environmental problems, first of all, the problems of determining the sources of pollution in a water basin or atmosphere. The results are important when developing numerical algorithms for solving the problem. In the literature, such problems are solved numerically by reducing the problem to an optimal control problem and minimizing the corresponding objective functional. The examples show that this method is not always correct since the objective functional can have a significant number of minima.

Keywords: heat and mass transfer; parabolic equation; uniqueness; inverse problem; point source.

Introduction

Under consideration is the inverse problem of recovering the point sources in the model

$$u_t + Lu = \sum_{i=1}^m N_i(t) \delta(x - x_i) + f_0(t, x), Lu = -\Delta u + \sum_{i=1}^n a_i(x) u_{x_i} + a_0(x) u, \quad (1)$$

where $(x, t) \in Q = (0, T) \times G$, G is a domain in \mathbb{R}^n ($n=2, 3$) with boundary $\Gamma \in C^2$. The unknowns are the functions $N_i(t)$. The equation (1) is furnished with the initial and boundary conditions

$$Bu_S = g, u_{t=0} = u_0(x), S = (0, T) \times \Gamma, \quad (2)$$

where either $Bu = \frac{\partial u}{\partial \nu} + \sigma u$, or $Bu = u$ (ν is the outward unit normal to Γ), and the overdetermination conditions

$$u(y_j, t) = \psi_j(t), j = 1, 2, \dots, s. \quad (3)$$

These problems arise in mathematical modelling of heat and mass transfer processes, diffusion, filtration, and in many other fields (see [1–3]). In the theory of heat and mass transfer, the function u is the concentration of a transferred substance and the right part characterizes sources (sinks) [1]. In the most general formulation of the problem (1)–(3), the intensities $N_i(t)$ of point sources, their locations x_i and the number m are quantities to be determined. Some descriptions of models of this type can be found, for example, in [1]. A lot of articles are devoted to solving these inverse problems. The main results are connected with numerical methods of solving the problem and many of them are far from justified (see [4–16]). The problem is ill-posed and examples when the problem is not solvable or has many

solutions are easily constructed. Very often the methods rely on reducing the problem to an optimal control problem and minimization of the corresponding objective functional [2, 4, 5, 9, 16]. However, it is possible that the corresponding functionals can have many local minima. Some theoretical results devoted to the problem (1)–(3) are available in [17–21]. The stationary case is treated in [20], where the Dirichlet data are complemented with the Neumann data and these data allow to solve the problem on recovering the number of sources, their locations, and intensities using test functions and a Prony-type algorithm. The model problem (1)–(3) ($G = \mathbb{R}^n$) is considered in [21], where the explicit representation of solutions to the direct problem (the Poisson formula) and auxiliary variational problem are employed to determine numerically the quantities $\sum_i N_i r_{ij}^l$ (here $N_i(t) = \text{const}$ for all i and $r_{ij} = |x_i - y_j|$). The quantities found allow to determine the points $\{x_i\}$ and intensities N_i (see Theorem 2 and the corresponding algorithm in [21]). So the results of [21], for instance, say that the problem (1)–(3) and more general problem of simultaneous recovering points $\{x_i\}$ and intensities $\{N_i\}$ in some model situations is uniquely solvable. In the one-dimensional case uniqueness theorem for solutions to the problem (1)–(3) with $n=1, m=1$ is stated in [17]. Similar results are presented also in [22].

In this article the main attention is paid to uniqueness questions of solutions to the problem in some model cases and the general case as well. Examples showing the accuracy of the results obtained are displayed. The constructions can be used when developing numerical algorithms. The results are based on asymptotic representations of the Green functions of the corresponding elliptic problems (see [23]).

Preliminaries

First, we describe our conditions on the data and some corollaries of the results in [23]. Let G be a domain in \mathbb{R}^n . The symbols $L_p(G)$ and $W_p^s(G)$ ($1 \leq p \leq \infty$) stand for the Lebesgue and Sobolev spaces [24]. We also use the spaces $C^k(\overline{G})$ of k times differentiable functions (see the definitions in [24]). If Γ, S are some sets then the symbol $\rho(\Gamma, S)$ stands for the distance between these sets. The symbol $D(L)$ stands for the domain of an operator L . Denote by $B_r(x_0)$ the ball of radius r centered at x_0 . Let $\vec{a} = (a_1, a_2)$ for $n=2$ and $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$ for $n=3$. The brackets (\cdot, \cdot) denote the inner product in \mathbb{R}^n . Let

$$\psi(x) = \frac{1}{2} \int_0^1 (\vec{a}(x_0 + \tau(x - x_0)), (x - x_0)) d\tau.$$

The coefficients in (1) are assumed to be real-valued and

$$a_i \in W_\infty^2(G) (i=1, \dots, n), \nabla \psi, \Delta \psi, a_0 \in L_\infty(G), \sigma \in C^1(\Gamma), \quad (4)$$

Consider the problem

$$-\Delta u + \sum_{i=1}^n a_i u_{x_i} + a_0 u + \lambda u = \delta(x - x_0), x \in G \subset \mathbb{R}^n, \quad (5)$$

$$Bu|_\Gamma = 0. \quad (6)$$

For the reader's convenience, here we present some results the article [23] (see Theorem 3.5, 3.9, 3.11, 3.12). We consider compact $K \subset G$, containing x_0 , with properties: if $Bu = u$ and G is a domain with compact boundary then the convex hull of K is contained in G ; if G is a domain with compact boundary and $Bu \neq u$ then $K \subset B_{\rho(x_0, \Gamma)}(x_0)$; if $G = \mathbb{R}^n$ or $G = \mathbb{R}_+^n$, then K is an arbitrary compact.

Theorem 1. [23]. Assume that the conditions (4) hold, K is a compact with the above properties, and if $G = \mathbb{R}_+^n$, then, in case $Bu \neq u$, $\sigma = 0$ (i.e., $Bu = u_{x_n}$) and $a_i \equiv 0$ for $i=1, 2, \dots, n$. Then there exists $\lambda_1 \geq 0$ such that for all $\lambda \geq \lambda_1$ a solution $u_n(x)$ ($n=2, 3$) to the problem (5), (6) in every domain $\{y \in K : 0 < \varepsilon \leq |y - x_i|, i=1, 2, \dots, m\}$ admits the representation

$$u_2(x) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}|x-x_0|\lambda^{1/4}} e^{y(x)-\sqrt{\lambda}|x-x_0|} (1 + O(\frac{1}{\sqrt{|\lambda|}})); \tag{7}$$

$$u_3(x) = \frac{1}{4\pi|x-x_0|} e^{y(x)-\sqrt{\lambda}|x-x_0|} (1 + O(\frac{1}{\sqrt{|\lambda|}})). \tag{8}$$

Next theorem deals with solvability of the direct problem (1), (2). Let

$$u_0(x) \in W_2^1(G), u_0(x)|_{\Gamma} = g(x, 0) \text{ if } Bu = u. \tag{9}$$

We also suppose that

$$f_0 \in L_2(Q), g(x, t) \in W_2^{3/4, 3/2}(S) \text{ if } Bu = u, g(x, t) \in W_2^{1/4, 1/2}(S) \text{ if } Bu \neq u. \tag{10}$$

Consider auxiliary problems

$$u_t + Lu = f_0(t, x), Bu_S = g, u_{t=0} = u_0(x), \tag{11}$$

$$w_t + Lw = \sum_{i=1}^m N_i(t) \delta(x - x_i), Bw_S = 0, w_{t=0} = 0. \tag{12}$$

Let $W_{p,B}^1(G)$ be a space of functions $u \in W_p^1(G)$ satisfying the homogeneous Dirichlet condition whenever $Bu = u$ and $W_{p,B}^1(G) = W_p^1(G)$ if $Bu \neq u$. Denote by $W_{p,B}^{-1}(G)$ the dual space to $W_{q,B}^1(G)$ (the duality is defined by the inner product in $L_2(G)$, see [25]).

The following theorem follows from [26], theorem 2 and [27], theorem 8.2.

Theorem 2. Let $T < \infty$ and let $p \in (1, n/(n-1))$. Assume that the conditions (9), (10) hold, $a_i \in L_\infty(G)$ ($i = 0, 1, \dots, n$), and $N_i \in L_2(0, T)$ ($i = 1, 2, \dots, m$). Then there exists a unique solution to the problem (1), (2) such that $u = w_0 + w$, where $w_0 \in W_2^{1,2}(Q)$ is a solution to the problem (11), w is a solution to the problem (12), $w \in L_2(0, \infty; W_{p,B}^1(G))$, $w_t \in L_2(0, \infty; W_{p,B}^{-1}(G))$ and $w \in W_2^{1,2}(Q_\varepsilon)$ with $Q_\varepsilon = \{(x, t) \in Q : |x - x_i| > \varepsilon \forall i \leq m\}$ for all $\varepsilon > 0$.

Main results

Here we present our uniqueness theorem for solutions to the problem (1)–(3). We introduce the functions

$$\varphi_j(x) = -\frac{1}{2} \int_0^1 (\bar{a}(y_j + \tau(x - y_j)), (x - y_j)) d\tau.$$

Let $\delta_j = \min_i r_{ij}, j = 1, 2, \dots, s$, where $r_{ij} = |x_i - y_j|$. Let A_0 be the matrix with entries $a_{ji} = e^{\varphi_j(x_i)}$ if $|x_i - y_j| = \delta_j$ and $a_{ji} = 0$ otherwise. We assume, that:

$$\det A_0 \neq 0 \tag{13}$$

Condition (4) is rewritten as follows: the coefficients of L are real-valued and

$$a_i \in W_\infty^2(G) (i = 1, \dots, n), \nabla \varphi_j, \Delta \varphi_j, a_0 \in L_\infty(G) (j \leq s), \sigma \in C^1(\Gamma). \tag{14}$$

Firstly, we justify uniqueness in the inverse problem (1)–(3) of recovering a solutions u and intensities N_i ($i = 1, \dots, m$). Points $\{x_i\}$ and their number are assumed to be known.

Theorem 3. Assume that $T < \infty, m = s$, and the conditions (13), (14) hold. Then a solution (u, \vec{N}) to the problem (1)–(3) such that u belongs to the class described in Theorem 2 and $N_i \in L_2(0, T)$ is unique.

Proof. It suffices to demonstrate that a solution to the problem (1)–(3) with homogeneous data is zero. In this case the auxiliary function $w_0 = 0$. Let a function u such that $u \in W_2^{1,2}(Q_\varepsilon)$ for any $\varepsilon > 0$, $u \in L_2(0, T; W_{p,B}^1(G))$, $u_t \in L_2(0, T; W_{p,B}^{-1}(G))$ be a solution to the problem

$$u_t + Lu = \sum_{i=1}^m N_i(t) \delta(x - x_i), \tag{15}$$

$$Bu_S = 0, u_{t=0} = 0, \tag{16}$$

$$u(y_j, t) = 0, j = 1, 2, \dots, s. \tag{17}$$

We integrate the equation (15) with respect to t and make the change of variables $w = \int_0^t u(\tau) d\tau$. This function is a solution to the problem

$$w_t + Lw = \sum_{i=1}^m s_i(t) \delta(x - x_i), s_i = \int_0^t N_i(\tau) d\tau \in W_2^1(0, T), s_i(0) = 0, \tag{18}$$

$$Bw_S = 0, w_{t=0} = 0, \tag{19}$$

$$w(y_j, t) = 0, j = 1, 2, \dots, s. \tag{20}$$

Put $w = e^{\lambda t} v$, where $\lambda \in \mathbb{R}$. This function satisfies the equation

$$v_t + Lv + \lambda v = \sum_{i=1}^m s_i(t) e^{-\lambda t} \delta(x - x_i). \tag{21}$$

Let $v_j(x, \lambda)$ be a solution to the problem

$$L^* v_j^* + \lambda v_j^* = \delta(x - y_j), B^* v_j^*|_{\Gamma} = 0, \tag{22}$$

where L^* – formally adjoint operator to operator L , $B^* v = v$, if $Bu = u$ and $B^* v = \frac{\partial v}{\partial \nu} + (\sigma + (\bar{a}, v))v$ otherwise. The problem (22) is the adjoint problem to the problem

$$Lv + \lambda v = \delta(x - y_j), Bv|_{\Gamma} = 0. \tag{23}$$

Multiplying the equation (21) by v_j , integrating the result over Q , and using (20), we obtain the equalities

$$\left(v(T, x), v_j^*(T, x) \right) = \int_G v(T, x) v_j^*(T, x) dx = \sum_{i=1}^m \int_0^T s_i(t) e^{-\lambda t} dt v_j^*(x_i). \tag{24}$$

The equality (24) can be rewritten as

$$A(\lambda) \bar{S} = \bar{F}, \tag{25}$$

where the vectors \bar{S} , \bar{F} have the coordinates $S_i = \int_0^T s_i(t) e^{-\lambda t} dt$ and $F_i = 4\pi \delta_j(v(T, x), v_j^*(x)) e^{\sqrt{\lambda} \delta_j}$

for $n=3$ and $F_i = 2\sqrt{2\delta_j \pi} \lambda^{1/4} (v(T, x), v_j^*(T, x)) e^{\sqrt{\lambda} \delta_j}$ for $n=2$. Transform the representation

$$f_j = (v(T, x), v_j^*(T, x)) = e^{-\lambda T} (w(T, x), (\lambda + L^*)^{-1} \delta(x - y_j)) = e^{-\lambda T} ((\lambda + L)^{-1} w(T, x), \delta(x - y_j)) = e^{-\lambda T} (\lambda + L)^{-1} w(T, x)|_{x=y_j},$$

Note that the last expression makes sense and these formal transformations are justified. Indicate that $w, w_t \in L_2(0, T; W_{p,B}^1(G))$. In particular, we infer $w \in C([0, T]; W_p^1(G))$ after a possible change on a set of zero measure. By embedding theorems, $w \in C([0, T]; L_q(G))$ с $q \leq 3p/(3-p)$ for $n=2,3$. In this case the expression $(\lambda + L)^{-1} w(T, x) \in W_q^2(G)$ is well-defined if the parameter λ is sufficiently large, say $\lambda \geq \lambda_0 > 0$ for some λ_0 . However, $W_q^2(G) \subset C(\bar{G})$ when $n=2,3$ and $q > 3/2$. Thus, we can consider the value $(\lambda + L)^{-1} w(T, x)|_{x=y_j}$. There is the estimate

$$|(\lambda + L)^{-1}w(T, y_j)| \leq \|(\lambda + L)^{-1}w(T, x)\|_{C(\bar{G})} \leq c_0 \|(\lambda + L)^{-1}w(T, x)\|_{W_q^2(G)} \leq c_1 \|w(T, x)\|_{L_q(G)}, \quad (26)$$

where the constants do not depend on the parameter $\lambda \geq \lambda_0$ and we use resolvent estimates for the elliptic operators (see. [27, Ch.2]). As a consequence, we obtain the estimate

$$|F_j| \leq c_2 \lambda^\gamma e^{-T\lambda} e^{\sqrt{\lambda}\delta_j} \quad \forall \lambda \geq \lambda_0,$$

where is the constant c_2 does not depend on λ and $\gamma = 0$ when $n = 3$ and $\gamma = 1/4$ when $n = 2$. Fix an arbitrary $\varepsilon \in (0, T)$. The above estimate implies that there exists a constant $C_0(\varepsilon) > 0$ such that

$$|F_j| \leq \frac{C_0(\varepsilon)e^{-(T-\varepsilon)\lambda}}{|\lambda|} \quad \forall \lambda \geq \lambda_0. \quad (27)$$

By Theorem 1, the entries $b_{ij}(\lambda)$ of $A(\lambda)$ are representable as

$$b_{ji}(\lambda) = 4\pi\delta_j v_j^*(x_i) e^{\sqrt{\lambda}\delta_j} = a_{ji} \left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\right) \right)$$

for $n = 3$ and

$$b_{ji}(\lambda) = 2\sqrt{2\delta_j}\pi v_j^*(x_i) \lambda^{1/4} e^{\sqrt{\lambda}\delta_j} = a_{ji} \left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\right) \right)$$

for $n = 2$. Under the condition (13), we can assume that the matrix $A(\lambda)$ is invertible for $\lambda \geq \lambda_0$ and the elements of the inverse matrix $A^{-1} = \{s_{ij}\}$ are bounded by a constant independent of λ ; otherwise, we increase the parameter λ_0 . Therefore, we have

$$S_i(\lambda) = \sum_{j=1}^m s_{ij}(\lambda) F_j(\lambda)$$

and estimate (27) ensures that

$$|S_i(\lambda)| \leq \frac{C_1(\varepsilon)(\varepsilon)e^{-(T-\varepsilon)\lambda}}{|\lambda|} \quad \forall \lambda \geq \lambda_0. \quad (28)$$

Consider the functions $S_i(\lambda_0 + z)$, where z is a complex parameter, $\operatorname{Re} z \geq 0$. The function $S_i(\lambda_0 + z) = \int_0^T s_i(t) e^{-\lambda_0 t} e^{-zt} dt$ is the Laplace transform of the function $\tilde{s}_i(t) = s_i(t) e^{-\lambda_0 t}$ for $t \leq T$ and $\tilde{s}_i(t) = 0$ for $t > T$. Introduce an additional function $W(z) = z e^{z(T-\varepsilon)} S_i(\lambda_0 + z)$. It is analytic in the right half-plane and is bounded by a constant C_1 on the real semi-axis \mathbb{R}^+ . Estimate this function on the on the imaginary axis. Integrating by parts, we have

$$S_i(\lambda_0 + z) = -\frac{1}{\lambda_0 + z} \left(s_i(T) e^{-\lambda_0 T} e^{-zT} + \int_0^T s_i(t) e^{-\lambda_0 t} e^{-zt} dt \right).$$

For $z = iy$ we have the estimate

$$|W(z)| \leq \left(|s_i(T)| + \|s_i\|_{L_1(0,T)} \right) = C_3 \quad \forall z = iy, y \in \mathbb{R}. \quad (29)$$

In each of the sectors $0 \leq \arg z \leq \pi/2$, $-\pi/2 \leq \arg z \leq 0$ the function $W(z)$ admits the estimate

$$|W(z)| \leq e^{|z|(T-\varepsilon)} \left(|s_i(T)| + \|s_i\|_{L_1(0,T)} \right) \quad \forall \operatorname{Re} z \geq 0. \quad (30)$$

Applying the Fragment–Lindelef Theorem (see theorem 5.6.1 in [28]) we obtain that in each of the sectors $0 \leq \arg z \leq \pi/2$, $-\pi/2 \leq \arg z \leq 0$ the function $W(z)$ admits the estimate

$$|W(z)| \leq \max(C_1, C_3) = C_4 \quad \forall \operatorname{Re} z \geq 0. \quad (31)$$

Therefore,

$$|S_i(\lambda_0 + z)| = |L(s_i(t))(z)| \leq C_4(\varepsilon) e^{-(T-\varepsilon)\operatorname{Re}z} / |z| \quad \forall \operatorname{Re} z \geq 0. \tag{32}$$

We have equality ($\sigma \geq \lambda_0, p = \sigma + i\xi$)

$$s_i(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} e^{pt} L(s_i)(p) dp = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\sigma t} e^{i\xi t} L(s_i)(\sigma + i\xi) d\xi.$$

and, thereby,

$$s_i(t) e^{-\sigma(t-(T-\varepsilon))} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi t} e^{\sigma(T-\varepsilon)} L(s_i)(\sigma + i\xi) d\xi.$$

The Parseval identity yields

$$\|s_i(t) e^{-\sigma(t-(T-\varepsilon))}\|_{L_2(-\infty, \infty)}^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{2\sigma(T-\varepsilon)} |L(s_i)(\sigma + i\xi)|^2 d\xi \leq \frac{C_5(\varepsilon)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sigma^2 + \xi^2} d\xi \leq \frac{C_5(\varepsilon)}{2\sigma}.$$

Since this inequality is true for all $\sigma > 0$, $\tilde{s}_i(t) = 0$ for $t \leq T - \varepsilon$. Since the parameter ε is arbitrary, $s_i(t) = 0$ for $t \leq T$. We infer $N_i(t) = 0$ for $t \leq T$ and every i and, therefore, the right-hand side of (15) vanishes which implies that $u = 0$. \square

We note that the following condition is actually a necessary condition for the uniqueness of solutions to the problem (1)–(3). If it fails then any number of the points $\{y_i\}$ does not ensure uniqueness of solutions (see examples below).

Condition (A). For $n = 2$, any three points $\{y_i\}$ do not lie on the same straight line and, for $n = 3$ any four points $\{y_i\}$ do not lie on the same plane.

Next, we describe some model situation in which $Lu = -\Delta u + \lambda_0 u$, $\lambda_0 \geq 0$, $G = \mathbb{R}^n$ and functions N_i on the right-hand side of (1) are real constants.

Theorem 4. Let u_1, u_2 be two solutions to the problem (1)–(3) from class described in the theorem

1 with the right-hand sides in (1) of the form $\sum_{i=1}^{r_j} N_i^j \delta(x - x_i)$ ($N_j = \text{const}, j = 1, 2$), the condition (A) holds, and $s \geq 2r + 1$ in the case $n = 2$ and $s \geq 3r + 1$ in the case $n = 3$, where $r \geq \max(r_1, r_2)$ (i. e., there is the upper bound for the number $\max(r_1, r_2)$). Then $u_1 = u_2$, $r_1 = r_2$, and $N_i^1 = N_i^2$ for all i , i. e., a solution to the problem of recovering the number m , points x_i , and constants N_i is unique.

Proof. Let the functions u_1, u_2 do not coincide and let $w = u_1 - u_2$. The function w satisfies the homogeneous initial data and over determination conditions (3) and we have (after renumbering the constants N_i^j and points x_i)

$$w_t + Lw = \sum_{i=1}^{r_3} N_i \delta(x - x_i) - \sum_{i=1}^{r_4} C_i \delta(x - x_i^*), \quad 2r \geq r_3 + r_4, N_i, C_i = \text{const}, \tag{33}$$

where $N_i, C_j > 0$ for all i, j . Without loss of generality, we can assume that all the numbers N_i, C_i are not equal to zero and all points x_i, x_i^* are distinct. Let, for example, $n = 3$. For simplicity, take $\lambda_0 = 0$. The proof is the same for other values of this parameter. Applying the Laplace transform, we infer

$$\hat{w}(x) = \sum_{i=1}^{r_3} \frac{N_i}{4\pi |x - x_i| \lambda} e^{-\sqrt{\lambda}|x - x_i|} - \sum_{i=1}^{r_4} \frac{C_i}{4\pi |x - x_i^*| \lambda} e^{-\sqrt{\lambda}|x - x_i^*|}. \tag{34}$$

Using (3), we obtain

$$\sum_{i=1}^{r_3} \frac{N_i}{4\pi |y_j - x_i| \lambda} e^{-\sqrt{\lambda}|y_j - x_i|} = \sum_{i=1}^{r_4} \frac{C_i}{4\pi |y_j - x_i^*| \lambda} e^{-\sqrt{\lambda}|y_j - x_i^*|}, \quad j = 1, 2, \dots, s. \tag{35}$$

For definiteness, we assume that $r_3 \geq r_4$. Let us show that the sets of numbers $\{r_{ij} = |x_i - y_j| : i = 1, 2, \dots, r_3\}$, $\{\tilde{r}_{ij} = |x_i^* - y_j|, i = 1, 2, \dots, r_4\}$ coincide for all j . Fix the parameter j . Let $\delta_{1j} = \min_i r_{ij}$, $\tilde{\delta}_{1j} = \min_i \tilde{r}_{ij}$. Demonstrate that $\delta_{1j} = \tilde{\delta}_{1j}$. Assume the contrary. Let, for example, $\delta_{1j} < \tilde{\delta}_{1j}$. Multiply the system (35) by $4\pi\delta_{1j}\lambda e^{\sqrt{\lambda}\delta_{1j}}$ and passing to the limit as $\lambda \rightarrow +\infty$ we obtain the equality

$$\sum_{i:|x_i-y_j|=\delta_{1j}} N_i = 0. \tag{36}$$

It is a contradiction, since $N_i > 0$. So, $\delta_{1j} = \tilde{\delta}_{1j}$ and multiplying the system (35) by $4\pi\delta_{1j}\lambda e^{\sqrt{\lambda}\delta_{1j}}$ and passing to the limit as $\lambda \rightarrow +\infty$ we also derive that

$$\sum_{i:|x_i-y_j|=\delta_{1j}} N_i = \sum_{i:|x_i^*-y_j|=\tilde{\delta}_{1j}} C_i.$$

So, we can reduce the following sums on the left and on the right in the equalities (35):

$$\sum_{i:|x_i-y_j|=\delta_{1j}} \frac{N_i}{4\pi|y_j-x_i|\lambda} e^{-\sqrt{\lambda}|y_j-x_i|}, \quad \sum_{i:|x_i^*-y_j|=\tilde{\delta}_{1j}} \frac{C_i}{4\pi|y_j-x_i^*|\lambda} e^{-\sqrt{\lambda}|y_j-x_i^*|}.$$

Denote $\delta_{2j} = \min_{i:r_{ij}>\delta_{1j}} r_{ij}$ and $\tilde{\delta}_{2j} = \min_{i:\tilde{r}_{ij}>\tilde{\delta}_{1j}} \tilde{r}_{ij}$. Repeating the arguments, we obtain that $\delta_{2j} = \tilde{\delta}_{2j}$ and, thereby,

$$\sum_{i:|x_i-y_j|=\delta_{2j}} N_i = \sum_{i:|x_i^*-y_j|=\tilde{\delta}_{2j}} C_i.$$

Again, abbreviated equal summands (35), we arrive at the system (35), where the sums on the left and on the right are taken over $i : r_{ij} > \delta_{2j}$ и $i : \tilde{r}_{ij} > \tilde{\delta}_{2j}$, respectively. It is now obvious by induction that there are pairs of equal numbers $\delta_{kj}, \tilde{\delta}_{kj}$ $k = 1, 2, \dots, r_{0j} \leq \min(r_3, r_4)$ and

$$\sum_{i:|x_i-y_j|=\delta_{kj}} N_i = \sum_{i:|x_i^*-y_j|=\tilde{\delta}_{kj}} C_i, k = 1, 2, \dots, r_{0j}, \tag{37}$$

moreover, the left-hand and right-hand sides of these equalities are positive. So, the sets of numbers $\{r_{ij} = |x_i - y_j| : i = 1, 2, \dots, r_3\}$, $\{\tilde{r}_{ij} = |x_i^* - y_j|, i = 1, 2, \dots, r_4\}$ coincide for all j . In particular, it follows that for any point, for example, x_1 and any j , there exists a point x_{ij} such that

$$|x_1 - y_j| = |x_{ij}^* - y_j|, j = 1, 2, \dots, s.$$

But we have $s \geq 3r + 1$ and $r_4 \leq r$ is the number of points $\{x_i^*\}_{i=1}^s$. Hence, among the points $\{x_{ij}^*\}_{j=1}^s$ there are four coinciding points. After renumbering if necessary we can assume that these points are $x_{i_1}^*, x_{i_2}^*, x_{i_3}^*, x_{i_4}^*$. Then the equalities

$$|x_1 - y_j| = |x_{i_j}^* - y_j|, j = 1, 2, \dots, s.$$

imply that the points y_j with $j = 1, 2, 3, 4$ lie in the same plane which is perpendicular to the segment $[x_1, x_{i_1}]$, but this fact contradicts to the conditions (A). So, $w \equiv 0$.

The proof in the case of $n = 2$ is almost the same but we use an asymptotic representation for a fundamental solution $\frac{i}{4}H_0^{(1)}(i\sqrt{\lambda}|x-x_0|)$ defined by the equality (7), where $\psi \equiv 0$. As in the case of $n = 3$, we arrive at contradiction with the condition (A). □

We display the corresponding examples showing the accuracy the results obtained. The following example shows that if the condition (A) fails then the problem of recovering the intensities of sources

(sinks) located at x_1, x_2 has a nonunique solution. At the same time, it is an example of the nonuniqueness in the problem of recovering the intensity of one source and its location. Note that the problem of determining the location of one source x_0 and its intensity $N(t)$ is simple enough and to uniquely recover these parameters we need two measurements in the case of $n=1$ [22], three measurements in the case of $n=2$ [28] and four measurements (that is $s=4$ in (3)) in the case of $n=4$ [25]. The smaller number of points does not allow to define the parameters $N(t), x_0$ uniquely. We should also require that the point x_0 lie between two measurement points in the case of $n=1$ and the condition (A) holds in the case of $n=2, 3$. The numerical solution of the problem of recovering one source is treated in the articles [6, 9–15, 19, 28].

Example 1. First we take $n=3, G = \mathbb{R}^n, Lu = -\Delta u$. Let u be a solution to the equation (1) satisfying the homogeneous initial conditions with the right-hand side in (1) of the form

$$N(t)(\delta(x-x_1) - \delta(x-x_2)).$$

The Laplace transform of this solution to the problem (1)–(2) is written as

$$\hat{u} = \hat{N}(\lambda) \left(\frac{1}{4\pi|x-x_1|} e^{-\sqrt{\lambda}|x-x_1|} - \frac{1}{4\pi|x-x_2|} e^{-\sqrt{\lambda}|x-x_2|} \right).$$

Let P be the plane perpendicular to the segment $[x_1, x_2]$ and passing through its center. We have

$$\hat{u}(y, \lambda) \equiv 0 \quad \forall y \in P.$$

So, $u(y, t) = 0$ for all $y \in P$. Precisely the same example can be constructed in the case $n=2$. We take the perpendicular to the segment $[x_1, x_2]$ passing through its center rather than the plane P . Thus, if condition (A) fails then any number of measurement points does not allow to determine the intensity and the location of the sources.

Example 2. Consider the case of $G = \mathbb{R}^n, Lu = -\Delta u$. Let us show that the conditions (3) with $s=4$ in the case of $n=2$ and $s=6$ in the case of $n=3$ does not allow to determine location of two sources and their intensities even if the condition (A) holds. Let u_1, u_2 be solutions to the equation (10) satisfying the homogeneous initial conditions in which the right-hand sides are of the form

$$N(t)\delta(x-x_1) + N(t)\delta(x-x_2), N(t)\delta(x-x_1^*) + N(t)\delta(x-x_2^*).$$

Let, for example, $n=3$. Then the Laplace transforms of u_1, u_2 are as follows:

$$\hat{u}_1(x, \lambda) = \sum_{i=1}^2 \frac{\hat{N}}{4\pi|x-x_i|} e^{-\sqrt{\lambda}|x-x_i|}, \hat{u}_2(x, \lambda) = \sum_{i=1}^2 \frac{\hat{N}}{4\pi|x-x_i^*|} e^{-\sqrt{\lambda}|x-x_i^*|}. \tag{38}$$

Here we use explicit representations of the fundamental solution for the Helmgoltz equation (see, for example, in [30, §3.1] or [31, ch. 4, 8]). We take $x_1 = (a, a, 0), x_1^* = (a, -a, 0), x_2 = (-a, -a, 0), x_2^* = (-a, a, 0)$ ($a > 0$). As is easily seen, the functions \hat{u}_1, \hat{u}_2 coincide at the points $y_1 = (M, 0, 0), y_2 = (-M, 0, 0), y_3 = (0, M, 0), y_4 = (0, -M, 0), y_5 = (0, 0, M), y_6 = (0, 0, -M)$, where $M > 0$ and, thus, the problem of recovering the locations of 2 sources and their intensities admits several solutions in the case of $s=6$. It follows from the theorem 2 that in the case of $s=7$ points x_1, x_2 and the intensities are determined uniquely (if the condition (A) holds and the intensities are constants).

Consider the case of $n=2$. As before, we construct functions u_1, u_2 whose Laplace transform is of the form

$$\hat{u}_1 = \sum_{j=1}^2 \frac{iN}{4\lambda} H_0^{(1)}(i\sqrt{\lambda}|x-x_j|), \hat{u}_2 = \sum_{j=1}^2 \frac{i\hat{N}}{4\lambda} H_0^{(1)}(i\sqrt{\lambda}|x-x_j^*|),$$

where H_0^1 is the Hankel functions [32]. Let us take $x_1 = (a, a), x_1^* = (a, -a), x_2 = (-a, -a), x_2^* = (-a, a)$ ($a > 0$). It is easy to check that

$$\hat{u}_1(y_j, \lambda) = \hat{u}_2(y_j, \lambda) \quad \forall j = 1, \dots, 4, \lambda \in \mathbb{R}^+ \quad (39)$$

where $y_1 = (M, 0)$, $y_2 = (-M, 0)$, $y_3 = (0, M)$, $y_4 = (0, -M)$. It follows from the theorem 2 that the points x_1, x_2 and intensities are determined uniquely in case $s = 5$ (if condition (A) holds and the intensities are constants).

Remark 1. The examples show that the number of minima of the corresponding objective functionals introduced if we solve the problem (1)–(3) numerically reducing the problem to an optimal control problem can be large and even can be a manifold.

Remark 2. Relying on asymptotic representations and Theorem 1 in the case of constant values N_i , we can construct a numerical algorithm for finding sources $\{x_i\}$ employing the ideas from the article [19]. Some review of the results connected with numerical determining point sources can be found in the article [33] and some results in [34–37].

References

1. Marchuk G.I. *Mathematical Models in Environmental Problems. Studies in Mathematics and its Applications*. Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1986, Vol. 16, 216 p.
2. Ozisik M.N., Orlande H.R.B. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*. Taylor & Francis, New York, 2000, 330 p.
3. Alifanov O.M., Artyukhin E.A., Nenarokomov A.V. *Obratnye zadachi v issledovanii slozhnogo teploobmena* (Inverse problems of complex heat transfer). Moscow, Yanus-K Publ., 2009, 299 p. (in Russ.).
4. Panasenko E.A., Starchenko A.V. Numerical Solution of Some Inverse Problems with Various Types of Sources of Atmospheric Pollution. *Vestn. Tomsk. Gos. Univ. Mat. Mekh.*, 2008, no. 2(3), pp. 47–55. (in Russ.).
5. Penenko V.V. Variational methods of data assimilation and inverse problems for studying the atmosphere, ocean, and environment. *Numerical Analysis and Applications*, 2009, Vol. 2, Iss. 4, pp. 341–351.
6. Yang, C.Y. Solving the two-dimensional inverse heat source problem through the linear least-squares error method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1998, Vol. 41, no. 2, pp. 393–398. DOI: 10.1016/S0017-9310(97)00125-7
7. Starchenko A.V., Panasenko E.A. Parallel Algorithms for the Decision of Return Problems of Carrying over of the Impurity. *Vestnik USATU*, 2010, Vol. 14, no. 5(40), pp. 133–139. (in Russ.).
8. Mamonov A. V., Tsai Y-H. R. Point source identification in nonlinear advection-diffusion-reaction systems. *Inverse Problems*, 2013, Vol. 29, no. 3, p. 26. DOI: 10.1088/0266-5611/29/3/035009
9. Deng X., Zhao Y., Zou J. On linear finite elements for simultaneously recovering source location and intensity. *Int. J. Numer. Anal. Model.*, 2013, Vol. 10, no. 3, pp. 588–602.
10. Verdiere N., Joly-Blanchard G., Denis-Vidal L. Identifiability and Identification of a Pollution Source in a River by Using a Semi-Discretized Model. *Applied Mathematics and Computation*, 2013, vol. 221, pp. 1–9. DOI: 10.1016/j.amc.2013.06.022
11. Mazaheri M., Samani J.M.V., Samani H.M.V. Mathematical Model for Pollution Source Identification in Rivers. *Environmental Forensics*, 2015, Vol. 16, Iss. 4, pp. 310–321. DOI: 10.1080/15275922.2015.1059391
12. Su J. Heat Source Estimation with the Conjugate Gradient Method in Inverse Linear Diffusive Problems. *J. Braz. Soc. Mech. Sci.*, 2001, Vol. 23, no. 3, pp. 321–334. DOI: 10.1590/s0100-73862001000300005
13. Neto A.J.S., Oziik M.N. Twodimensional inverse heat conduction problem of estimating the timevarying strength of a line heat source. *Journal of Applied Physics*, 1992, Vol. 71, Iss. 11, pp. 53–57. DOI: 10.1063/1.350554
14. Milnes E., Perrochet P. Simultaneous Identification of a Single Pollution Point-Source Location and Contamination Time under Known Flow Field Conditions. *Advances in Water Resources*, 2007, Vol. 30, iss. 12, pp. 2439–2446. DOI: 10.1016/j.advwatres.2007.05.013
15. Liu F.B. A modified genetic algorithm for solving the inverse heat transfer problem of estimating plan heat source. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2008, Vol. 51, Iss. 15-16, pp. 3745–3752. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2008.01.002

16. Penenko A.V., Rachmetullina S. Algorithms for Atmospheric Emission Source Localization Based on the Automated Ecological Monitoring System Data. *Siberian Electronic Mathematical Reports. Proceedings of conferences*, 2013, Vol. 10, pp. S35–S54. (in Russ.).
17. Badia A. El, Ha-Duong T., Hamdi A. Identification of a Point Source in a Linear Advection-Dispersion-Reaction Equation: Application to a Pollution Source Problem. *Inverse Problems*, 2005, Vol. 21, no. 3, pp. 1121–1136. DOI: 10.1088/0266-5611/21/3/020
18. Badia A. El, Hamdi A. Inverse Source Problem in an Advection-Dispersion-Reaction System: Application to Water Pollution. *Inverse Problems*, 2007, Vol. 23, no. 5, pp. 2103–2120. DOI: 10.1088/0266-5611/23/5/017
19. Badia A. El, Ha-Duong T. Inverse Source Problem for the Heat Equation: Application to a Pollution Detection Problem. *J. Inverse Ill-Posed Probl.*, 2002, Vol. 10, Iss. 6, pp. 585–599. DOI: 10.1515/jiip.2002.10.6.585
20. Badia A. El, Ha-Duong T. An inverse Source Problem in Potential Analysis. *Inverse Problems*, 2000, Vol. 16, Iss. 3, pp. 651–663. DOI: 10.1088/0266-5611/16/3/308
21. Ling L., Takeuchi T. Point Sources Identification Problems for Heat Equations. *Commun. Comput. Phys.*, 2009, Vol. 5, no. 5, pp. 897–913.
22. Pyatkov S.G., Safonov E.I. Point Sources Recovering Problems for the One-Dimensional Heat Equation. *Journal of Advanced Research in Dynamical and Control Systems*, 2019, Vol. 11, Iss. 01, pp. 496–510. <http://www.jardcs.org/abstract.php?id=100#>
23. Pyatkov S.G., Neustroeva L.V. On Some Asymptotic Representations of Solutions to Elliptic Equations and Their Applications. *Complex Variables and Elliptic Equations*, 2021, Vol. 66, no. 6-7, pp. 964–987. DOI: 10.1080/17476933.2020.1801656
24. Triebel H. *Interpolation Theory. Function Spaces. Differential Operators*. Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1978, 528 p.
25. Amann H. Nonhomogeneous linear and quasilinear elliptic and parabolic boundary value problems. *Function Spaces, Differential Operators and Nonlinear Analysis*. Teubner-Texte Math. Bd. 133. Stuttgart: Teubner, 1993, pp. 9–126. DOI: 10.1007/978-3-663-11336-2_1
26. Neustroeva L.V., Pyatkov S.G. On recovering a point source in some heat and mass transfer problems. *AIP Conference Proceedings*, 2021, Vol. 2328, p. 020006. DOI: 10.1063/5.0042357
27. Denk R., Hieber R.M., Prüss J. R-boundedness, Fourier multipliers and problems of elliptic and parabolic type. *Mem. Amer. Math. Soc.*, 2003, Vol. 166, no. 788. DOI: 10.1090/memo/0788
28. Hsu Y.-K., Holsen T.M., Hopke P.K. Comparison of hybrid receptor models to locate PCB sources in Chicago. *Atmospheric Environment*, 2003, Vol. 37, pp. 545–562.
29. Safonov E., Pyatkov S. On Some Classes of Inverse Problems on Determining the Source Function. *Proc. of the 8th Scientific Conference on Information Technologies for Intelligent Decision Making Support (ITIDS 2020)*. pp. 242–248. DOI: 10.2991/aisr.k.201029.047
30. Vladimirov V.S., Zharinov V.V. *Uravneniya matematicheskoy fiziki: ucheb. dlya studentov vuzov* (Equations of Mathematical Physics: Textbook for University Students). Moscow Fizmatlit Publ., 2004, 398 p. (in Russ.).
31. Sveshnikov A.G., Bogolyubov A.N., Kravtsov V.V. *Lektsii po matematicheskoy fizike* (Lectures on Mathematical Physics). Moscow, MGU Publ., 1993, 351 p. (in Russ.).
32. Watson G.N. *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*. Cambridge: Cambridge University Press, 1944, 804 p.
33. Kozhevnikova M.F., Levenets V.V., Rolik I.L. The Pollution Source Identification: Computational Approach. *Problems of Atomic Science and Technology*, 2011, no. 6, pp. 149–156.
34. Zhou L., Hopke P.K., Liu W. Comparison of Two Trajectory Based Models for Locating Particle Sources for Two Rural New York Sites. *Atmospheric Environment*, 2004, Vol. 38, Iss. 13, pp. 1955–1963. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2003.12.034
35. Han Y.-J., Holsen T.M., Hopke P.K., Cheong J.-P., Kim H., Yi S.-M. Identification of Source Location for Atmospheric Dry Deposition of Heavy Metals During Yellow-Sand Events in Seoul, Korea in 1998 Using Hybrid Receptor Models. *Atmospheric Environment*, 2004, Vol. 38, pp. 5353–5361. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2004.02.069

36. Pekney N.J., Davidson C.I., Zhou L., Hopke P.K. Application of PSCF and CPF to PMF-Modeled Sources of PM_{2.5} in Pittsburgh. *Aerosol Science and Technology*, 2006, Vol. 40, Iss. 10, pp. 952–961. DOI: 10.1080/02786820500543324

37. Titchmarsh E.C. *Theory of functions*. Oxford, Oxford University press, 1939, 454 p.

Received March 9, 2022

Information about the author

Neustroeva Lyubov' Vladimirovna is Post-graduate Student, Digital Technologies Department, Yugra State University, Khanty-Mansiysk, Russian Federation, e-mail: StarkovaLV@mail.ru

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2022, vol. 14, no. 2, pp. 31–43

УДК 517.95

DOI: 10.14529/mmph220203

О ЕДИНСТВЕННОСТИ В ЗАДАЧАХ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ В МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА

Л.В. Неустроева

Югорский государственный университет, г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация

E-mail: Starkovalv@mail.ru

Аннотация. В работе рассмотрены задачи об определении точечных источников для математических моделей теплопереноса. В качестве условий переопределения берутся значения решения (концентраций) в некоторых точках лежащих внутри области. Рассматривается параболическое уравнение второго порядка, в правой части которого присутствует линейная комбинация дельта-функций Дирака $\delta(x-x_i)$ с коэффициентами, зависящими от времени и характеризующими мощность источников. Рассматриваются несколько различных задач, в том числе задача определения интенсивностей источников в случае, если их местоположение задано.

В этом случае мы приводим теорему единственности решений, доказательство которой основано на теореме Фрагмена–Линделефа. Далее в модельном случае мы рассматриваем задачу об одновременном определении мощностей источников и их местоположения. Описаны условия на числе замеров (условий переопределения), когда решение определяется единственным образом. Приведены примеры, показывающие точность полученных результатов. Проблема возникает при решении экологических задач, прежде всего задач определения источников загрязнения в водоеме или атмосфере. Результаты важны при построении численных алгоритмов решения задачи. В литературе такие задачи решаются численно с помощью сведения задачи к задаче оптимального управления и минимизации соответствующего целевого функционала. Примеры показывают, что такой способ решения не всегда корректен, поскольку целевой функционал может иметь значительное количество минимумов.

Ключевые слова: теплоперенос; параболическое уравнение; единственность; обратная задача; точечный источник.

Литература

1. Marchuk, G.I. *Mathematical Models in Environmental Problems* / G.I. Marchuk. – Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1986. – 216 p.

2. Ozisik M.N., Orlande H.R.B. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications* / M.N. Ozisik, H.R.B. Orlande. – Taylor & Francis, New York, 2000. – 330 p.

3. Алифанов, О.М. Обратные задачи в исследовании сложного теплообмена / О.М. Алифанов, Е.А. Артюхин, А.В. Ненарокомов. – Москва: Янус-К, 2009. – 299 с.

4. Панасенко, Е.А. Численное решение некоторых обратных задач с различными типами источников атмосферного загрязнения / Е.А. Панасенко, А.В. Старченко // Вестн. Томск. гос. ун-та. Матем. и мех. – 2008. – № 2(3). – С. 47–55.

5. Пененко, В.В. Вариационные методы усвоения данных и обратные задачи для изучения атмосферы, океана и окружающей среды / В.В. Пененко // Сиб. журн. вычисл. Матем. – 2009. – Т. 12, № 4. – С. 421–434.
6. Yang, C.Y. Solving the two-dimensional inverse heat source problem through the linear least-squares error method / C.Y. Yang // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 1998. – Vol. 41, no. 2. – P. 393–398.
7. Старченко, А.В. Параллельные алгоритмы для решения обратных задач переноса примеси / А.В. Старченко, Е.А. Панасенко // *Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета*. – 2010. – Т. 14, № 5(40). – С. 133–139.
8. Mamonov, A.V. Point Source Identification in Nonlinear Advection-Diffusion-Reaction Systems / A.V. Mamonov, Y.-H.R. Tsai // *Inverse Problems*. – 2013. – Vol. 29, no. 3. – p. 26.
9. Deng, X. On Linear Finite Elements for Simultaneously Recovering Source Location and Intensity / X. Deng, Y. Zhao, J. Zou // *Int. J. Numer. Anal. Model.* – 2013. – Vol. 10, no. 3. – P. 588–602.
10. Verdiere, N. Identifiability and Identification of a Pollution Source in a River by Using a Semi-Discretized Model / N. Verdiere, G. Joly-Blanchard, L. Denis-Vidal // *Applied Mathematics and Computation*. – 2013. – Vol. 221. – P. 1–9.
11. Mazaheri, M. Mathematical Model for Pollution Source Identification in Rivers / M. Mazaheri, J.M.V. Samani, H.M.V. Samani // *Environmental Forensics*. – 2015. – Vol. 16, Iss. 4. – P. 310–321.
12. Su, J. Heat Source Estimation with the Conjugate Gradient Method in Inverse Linear Diffusive Problems / J. Su // *J. Braz. Soc. Mech. Sci.* – 2001. – Vol. 23, no. 3. – P. 321–334.
13. Neto, A.J.S. Twodimensional Inverse Heat Conduction Problem of Estimating the Timevarying Strength of a Line Heat Source / A.J.S. Neto, M.N. Oziik // *Journal of Applied Physics*. – 1992. – Vol. 71, Iss. 11. – P. 53–57.
14. Milnes, E. Simultaneous Identification of a Single Pollution Point-Source Location and Contamination Time under Known Flow Field Conditions / E. Milnes, P. Perrochet // *Advances in Water Resources*. – 2007. – Vol. 30, Iss. 12. – P. 2439–2446.
15. Liu, F.B. A Modified Genetic Algorithm for Solving the Inverse Heat Transfer Problem of Estimating Plan Heat Source / F.B. Liu // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2008. – Vol. 51, Iss. 15-16. – P. 3745–3752.
16. Пененко А.В., Рахметуллина С.Ж. Алгоритмы локализации источников загрязнения атмосферного воздуха на основе данных автоматизированной системы экологического мониторинга. Сиб. электрон. матем. Изв. – 2013. – Vol. 10. – С.35–С.54
17. Badia, A.El Identification of a Point Source in a Linear Advection-Dispersion-Reaction Equation: Application to a Pollution Source Problem / A. El Badia, T. Ha-Duong, A. Hamdi // *Inverse Problems*. – 2005. – Vol. 21, no. 3. – P. 1121–1136.
18. Badia A.El Inverse Source Problem in an Advection-Dispersion-Reaction System: Application to Water Pollution / A. El Badia, A. Hamdi // *Inverse Problems*. – 2007. – Vol. 23, no. 5. – P. 2103–2120.
19. Badia A.El Inverse Source Problem for the Heat Equation: Application to a Pollution Detection problem / A. El Badia, T. Ha-Duong // *J. Inverse Ill-Posed Probl.* – 2002. – Vol. 10, Iss. 6. – P. 585–599.
20. Badia, A.El An Inverse Source Problem in Potential Analysis / A. El Badia, T. Ha-Duong // *Inverse Problems*. – 2000. – Vol. 16, Iss. 3. – P. 651–663.
21. Ling, L. Point Sources Identification Problems for Heat Equations / L. Ling, T. Takeuchi // *Commun. Comput. Phys.* – 2009. – Vol. 5, no. 5. – P. 897–913.
22. Pyatkov, S.G. Point Sources Recovering Problems for the One-Dimensional Heat Equation / S.G. Pyatkov, E.I. Safonov // *Journal of Advanced Research in Dynamical and Control Systems*. – 2019. – Vol. 11, Iss. 01. – P. 496–510. <http://www.jardcs.org/abstract.php?id=100#>
23. Pyatkov, S.G. On Some Asymptotic Representations of Solutions to Elliptic Equations and Their Applications / S.G. Pyatkov, L.V. Neustroeva // *Complex Variables and Elliptic Equations*. – 2021. – Vol. 66, no. 6-7. – P. 964–987.
24. Triebel, H. Interpolation Theory. Function Spaces. Differential Operators / H. Triebel // Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1978. – 528 p.

25. Amann, H. Nonhomogeneous Linear and Quasilinear Elliptic and Parabolic Boundary Value Problems / H. Amann // *Function Spaces, Differential Operators and Nonlinear Analysis*. Teubner-Texte Math. Bd. 133. – Stuttgart: Teubner, 1993. – P. 9–126.
26. Neustroeva L.V., Pyatkov S.G. On Recovering a Point Source in Some Heat and Mass Transfer Problems / L.V. Neustroeva, S.G. Pyatkov // *AIP Conference Proceedings*. – 2021. – Vol. 2328. – P. 020006.
27. R-boundedness, Fourier Multipliers and Problems of Elliptic and Parabolic Type / R. Denk, R.M. Hieber, J. Prüss // *Mem. Amer. Math. Soc.* – 2003. – Vol. 166, no. 788.
28. Comparison of Hybrid Receptor Models to Locate PCB Sources in Chicago / Y.-K. Hsu, T.M. Holsen, P.K. Hopke // *Atmospheric Environment*. – 2003. – Vol. 37. – P. 545–562.
29. Safonov, E. On Some Classes of Inverse Problems on Determining the Source Function / E. Safonov, S. Pyatkov // *Proc. of the 8th Scientific Conference on Information Technologies for Intelligent Decision Making Support (ITIDS 2020)*. – Atlantis Press, 2020. – P. 242–248.
30. Владимиров, В.С. Уравнения математической физики: учеб. для студентов вузов / В.С. Владимиров, В.В. Жаринов. – М.: Физматлит, 2004. – 398 с.
31. Свешников, А.Г. Лекции по математической физике / А.Г. Свешников, А.Н. Боголюбов, В.В. Кравцов. – М.: Изд-во МГУ, 1993. – 351 с.
32. Watson, G.N. A treatise on the theory of Bessel functions / G.N. Watson. – Cambridge: Cambridge University Press, 1944. – 804 p.
33. Kozhevnikova M.F., Levenets V.V., Rolik I.L. The Pollution Source Identification: Computational Approach / M.F. Kozhevnikova, V.V. Levenets, I.L. Rolik // *Problems of Atomic Science and Technology*. – 2011. – no. 6. – P. 149–156.
34. Zhou, L. Comparison of Two Trajectory Based Models for Locating Particle Sources for Two Rural New York sites / L. Zhou, P.K. Hopke, W. Liu // *Atmospheric Environment*. – 2004. – Vol. 38, Iss. 13. – P. 1955–1963.
35. Identification of Source Location for Atmospheric Dry Deposition of Heavy Metals During Yellow-Sand Events in Seoul, Korea in 1998 Using Hybrid Receptor Models / Y.-J. Han, T.M. Holsen, P.K. Hopke *et al.* // *Atmospheric Environment*. – 2004. – Vol. 38. – P. 5353–5361.
36. Application of PSCF and CPF to PMF-Modeled Sources of PM_{2.5} in Pittsburgh / N.J. Pekney, C.I. Davidson, L. Zhou, P.K. Hopke // *Aerosol Science and Technology*. – 2006. – Vol. 40, Iss. 10. – P. 952–961.
37. Titchmarsh, E.C. *Theory of Functions* / E.C. Titchmarsh. – Oxford, Oxford University press, 1939. – 454 p.

Поступила в редакцию 9 марта 2022 г.

Сведения об авторе

Неустроева Любовь Владимировна – аспирант, кафедра цифровых технологий, Югорский государственный университет, г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация, e-mail: Starkovalv@mail.ru

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ В ОДНОРОДНОЙ ПОЛОСЕ С ЛИНЕЙНЫМ ИЗМЕНЕНИЕМ ТОЛЩИНЫ ПРИ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ ПЕРВОГО РОДА

А.В. Рязских

Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Российская Федерация
E-mail: ryazhskihav@bk.ru

Аннотация. Получено точное аналитическое решение в квадратурах начально-краевой задачи для нестационарного одномерного уравнения теплопроводности с граничными условиями первого рода для бесконечной полосы, причем одна из ее границ движется с постоянной заданной скоростью, уменьшая толщину полосы. Предварительно исходная система уравнений путем использования автомодельной замены пространственной переменной сведена к системе с неподвижной границей, к которой применен метод разделения зависимых переменных. Требование равенства нулю коэффициентов перед производной первого порядка по автомодельной производной и отдельно входящей функцией в модифицированном уравнении в частных производных параболического типа позволило определить общую структуру решения, содержащего неизвестную функцию. Эта функция представлена суперпозицией двух потенциалов, которые связаны пропорционально с помощью автомодельной переменной, что дало возможность упростить модифицированное уравнение и применить для его решения классическое интегральное синус-преобразование Фурье. Результаты расчетов продемонстрировали динамику локального профиля температуры по изменяющейся толщине полосы с постоянной скоростью, причем кинетика среднеинтегральной температуры показывает, в отличие от случая отсутствия движения границы, наличие максимума, смещающегося с ростом отношения скорости перемещения границы к скорости переноса теплоты теплопроводностью к неподвижной границе. В предположении, что толщина полосы является параметром, задача в исходной формулировке решена методом одностороннего интегрального преобразования Лапласа по времени.

Ключевые слова: аналитическое решение; полоса; параболическое уравнение; подвижная граница; граничные условия первого рода.

Введение. Процессы в геометрических областях с изменяющимися во времени границами реализуются в различных приложениях. В ракетно-космической и авиационной технике – это управление фронтом горения в твердотопливных двигателях и повышение эффективности абляционной защиты обтекателей летательных аппаратов в плотных слоях атмосферы [1]. В [2] отмечается необходимость учета теплопереноса при росте кристаллов в формовке заготовок их жидкого металла. В химической и пищевой промышленности с помощью таких задач оценивается усушка материалов [3]. Современное применение подобных постановок отмечается в криомедицине [4]. Кроме того, учитывая математическую аналогию между законами Фурье и Фика, большой массив задач с подвижными границами встречается при переносе массы диффузией [5].

Систематизация и формализация математических задач с движущимися границами для различных типов уравнений математической физики были выполнены в [6], где одновременно были обозначены основные подходы к решению таких задач. В [7] были представлены оригинальные методы аналитического решения широкого класса параболических уравнений с различными начальными и граничными условиями с движущимися границами. Дальнейшее развитие такого подхода представлено в [8, 9] в контексте полуограниченных областей.

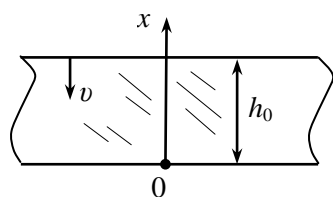


Рис. 1. Расчетная схема

В данной работе, используя идею перехода к новым координатам с Якобианом отличным от нуля, в которых исходная задача формулируется в области с фиксированными границами, рассмотрено решение нестационарного уравнения теплопроводности с граничными условиями первого рода на неподвижной и движущейся к ней по нормали границе бесконечной полосы.

Постановка задачи. Рассматривается бесконечная горизонтальная полоса высотой h_0 из однородного материала с изотропной теплопроводностью a . Начало координат расположено на нижней покоящейся границе (рис. 1), поддерживаемой при температуре t_0 . В начальный момент времени (температура по высоте полосы постоянна и также равна t_0) начинает двигаться верхняя граница, имеющая постоянную температуру t_1 , по нормали в направлении неподвижной границы со скоростью $v = \text{const}$. В выбранной системе координат математическая формулировка задачи такова:

$$\frac{\partial t(x, \tau)}{\partial \tau} = a \frac{\partial^2 t(x, \tau)}{\partial x^2}; \quad (1)$$

$$t(x, 0) = t_0; \quad (2)$$

$$t(0, \tau) = t_0; \quad (3)$$

$$t[h(\tau), \tau] = t_1; \quad (4)$$

(для определенности пусть $t_1 > t_0$)

$$h(\tau) = h_0 - v\tau, \quad (5)$$

где τ – время; x – координата; $t(x, \tau)$ – локальная температура в полосе. После введения безразмерных зависимых и независимых переменных

$$\theta = \tau a / h_0^2, \quad X = x / h_0, \quad T(X, \theta) = [t(x, \tau) - t_0] / (t_1 - t_0), \quad H(\theta) = h(\tau) / h_0 = 1 - A\theta, \quad A = v h_0 / a$$

система (1)–(5) примет вид

$$\frac{\partial T(X, \theta)}{\partial \theta} = \frac{\partial^2 T(X, \theta)}{\partial X^2}; \quad (6)$$

$$T(X, \theta) = 0; \quad (7)$$

$$T(0, \theta) = 0; \quad (8)$$

$$T[H(\theta), \theta] = 1; \quad (9)$$

$$H(\theta) = 1 - A\theta. \quad (10)$$

Решение. Сделан переход от системы координат (X, θ) к новой автомодельной системе координат (ξ, η) по правилу

$$\xi = 1 - A\theta, \quad \eta = \theta. \quad (11)$$

Этот переход взаимнооднозначен ввиду неравенства нулю Якобиана, причем зависимая искомая функция будет

$$\Omega(\xi, \eta) = T[X(\xi, \eta), \theta(\xi, \eta)], \quad (12)$$

относительно которой система (6)–(10) запишется следующим образом:

$$(1 - A\eta)^2 \frac{\partial \Omega(\xi, \eta)}{\partial \eta} = -A\xi(1 - A\eta) \frac{\partial \Omega(\xi, \eta)}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 \Omega(\xi, \eta)}{\partial \xi^2}; \quad (13)$$

$$\Omega(\xi, 0) = 0; \quad (14)$$

$$\Omega(0, \eta) = 0; \quad (15)$$

$$\Omega(1, \eta) = 1. \quad (16)$$

Представим функцию в виде произведения двух функций

$$\Omega(\xi, \eta) = q(\xi, \eta)W(\xi, \eta). \quad (17)$$

После подстановки (17) в (13) имеем

$$(1 - A\eta)^2 \frac{\partial W(\xi, \eta)}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 W(\xi, \eta)}{\partial \xi^2} + M(\xi, \eta) \frac{\partial W(\xi, \eta)}{\partial \xi} + N(\xi, \eta)W(\xi, \eta), \quad (18)$$

где

$$M(\xi, \eta) = -A\xi(1 - A\eta) + \frac{2}{q(\xi, \eta)} \frac{\partial q(\xi, \eta)}{\partial \xi}, \quad (19)$$

$$N(\xi, \eta) = \frac{1}{q(\xi, \eta)} \left[-A\xi(1 - A\eta) \frac{\partial q(\xi, \eta)}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 q(\xi, \eta)}{\partial \xi^2} - (1 - A\eta)^2 \frac{\partial q(\xi, \eta)}{\partial \eta} \right]. \quad (20)$$

Выберем $q(\xi, \eta)$ так, чтобы $M(\xi, \eta) = 0$. Этому условию удовлетворяет функция

$$q(\xi, \eta) = C(\eta) \exp \left[\frac{1}{4} A\xi^2 (1 - A\eta) \right], \quad (21)$$

где $C(\eta)$ – неизвестная функция, которая определена из (20) таким образом, чтобы $N(\xi, \eta) = 0$, тогда

$$C(\eta) = 1/\sqrt{1 - A\eta}. \quad (22)$$

Таким образом, из (17) и (21), (22) следует

$$\Omega(\xi, \eta) = \frac{W(\xi, \eta)}{\sqrt{1 - A\eta}} \exp \left[\frac{1}{4} A\xi^2 (1 - A\eta) \right],$$

откуда после подстановки $\Omega(\xi, \eta)$ в (13)–(16) она трансформируется в систему для $W(\xi, \eta)$:

$$(1 - A\eta)^2 \frac{\partial W(\xi, \eta)}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 W(\xi, \eta)}{\partial \xi^2}; \quad (23)$$

$$W(\xi, 0) = 0; \quad (24)$$

$$W(0, \eta) = 0; \quad (25)$$

$$W(1, \eta) = \sqrt{1 - A\eta} \exp \left[-\frac{1}{4} A(1 - A\eta) \right]. \quad (26)$$

Далее введем вспомогательную функцию

$$V(\xi, \eta) = W(\xi, \eta) - U(\xi, \eta), \quad (27)$$

что позволяет представить (23) как

$$(1 - A\eta)^2 \left[\frac{\partial V(\xi, \eta)}{\partial \eta} + \frac{\partial U(\xi, \eta)}{\partial \eta} \right] = \frac{\partial^2 V(\xi, \eta)}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 U(\xi, \eta)}{\partial \xi^2}, \quad (28)$$

а структура условий (24)–(26) определяет связь

$$U(\xi, \eta) = \xi W(1, \eta), \quad (29)$$

поэтому из (24)–(26) и (28), (29) следует система для определения $V(\xi, \eta)$

$$(1 - A\eta)^2 \frac{\partial V(\xi, \eta)}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 V(\xi, \eta)}{\partial \xi^2} - \frac{1}{2} \xi A(1 - A\eta)^2 \left(-\frac{1}{\sqrt{1 - A\eta}} + \frac{A}{2} \sqrt{1 - A\eta} \right) \exp \left[-\frac{A}{4} (1 - A\eta) \right]; \quad (30)$$

$$V(\xi, 0) = -\xi \exp \left(-\frac{A}{4} \right); \quad (31)$$

$$V(0, \eta) = 0; \quad (32)$$

$$V(1, \eta) = 0. \quad (33)$$

К системе (30)–(33) применено интегральное синус-Фурье преобразование [10] по переменной ξ

$$\Phi(\lambda_n, \eta) = \int_0^1 V(\xi, \eta) \sin(\lambda_n \xi) d\xi,$$

где $\lambda_n = \pi n$, $n = \overline{1, \infty}$, которое систему (30)–(33) переводит в задачу Коши:

$$\frac{d\Phi(\lambda_n, \eta)}{d\eta} + \frac{\lambda_n^2}{(1 - A\eta)^2} \Phi(\lambda_n, \eta) = F(\eta); \quad (34)$$

$$\Phi(\lambda_n, 0) = \frac{\cos \lambda_n}{\lambda_n} \exp\left(-\frac{A}{4}\right), \quad (35)$$

где

$$F(\eta) = \frac{A \cos \lambda_n}{2 \lambda_n} \left(-\frac{1}{\sqrt{1 - A\eta}} + \frac{A}{2} \sqrt{1 - A\eta} \right) \exp\left[-\frac{A}{4}(1 - A\eta)\right].$$

Решение (34)–(35) есть

$$\Phi(\lambda_n, \eta) = \exp\left[-\frac{\lambda_n^2}{A(1 - A\eta)^2}\right] \cdot \left\{ \frac{\cos \lambda_n}{\lambda_n} \exp\left(-\frac{A}{4} + \frac{\lambda_n^2}{2}\right) + \int_0^\eta F(\eta) \exp\left[\frac{\lambda_n^2}{A(1 - A\eta)^2}\right] d\eta \right\}. \quad (36)$$

Оригинал (36)

$$V(\xi, \eta) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \Phi(\lambda_n, \eta) \sin(\lambda_n \xi). \quad (37)$$

Из (12), (17), (26), (27), (37) следует окончательное решение задачи (6)–(10)

$$T(X, \theta) = \left[\frac{X}{1 - A\theta} W(1, \theta) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \Phi(\lambda_n, \theta) \times \sin\left(\frac{\lambda_n X}{1 - A\theta}\right) \right] \frac{1}{\sqrt{1 - A\theta}} \exp\left[\frac{1}{4} A \frac{X^2}{(1 - A\theta)}\right], \quad (38)$$

которое корректно при $\theta < 1/A$.

Анализ. Расчеты показывают, что при $A = 0$ (граница не движется) изменение профиля температуры (рис. 2) соответствует известным результатам [11]. В случае $A > 0$ (рис. 3) полученные результаты отражают физическую картину различных процессов [6], причем при изменении среднеинтегральной температуры в полосе наблюдается максимум, который с ростом A смещается к неподвижной границе (рис. 4).

В предположении, что толщина полосы является параметром, решение задачи в исходной формулировке с помощью метода одностороннего преобразования Лапласа по θ [12] представлена в виде:

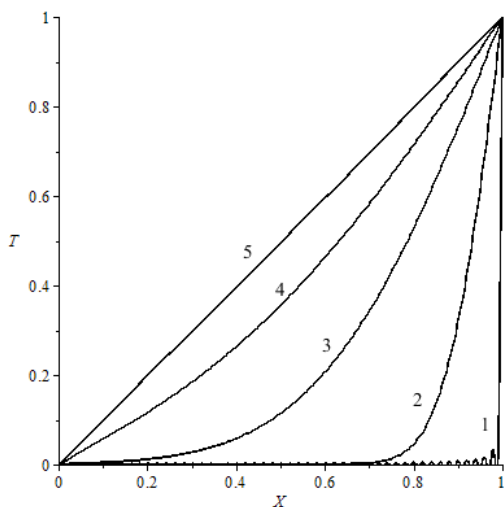


Рис. 2. Изменение локальной температуры по высоте полосы при $A = 0$ для различных θ :
1 – 10^{-5} ; 2 – 0,2; 3 – 0,4; 4 – 0,6; 5 – 0,8

$$T(X, \theta) = \frac{X}{H(\theta)} + \frac{2}{H(\theta)} \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(\mu_n X)}{\cos[\mu_n H(\theta)]} \exp(-\mu_n^2 \theta);$$

$$H(\theta) = 1 - A\theta; \mu_n = \pi n / H(\theta), n = \overline{1, \infty},$$

$$X \leq H(\theta).$$

Правомерность такого приема показана в [13].

Заключение. Сведение задачи переноса теплоты теплопроводностью в бесконечной полосе с перемещением по нормали одной из границ к другой с постоянной скоростью к задаче с неподвижными границами с помощью автомодельного преобразования координат позволяет получить ее точное аналитическое решение в квадратурах.

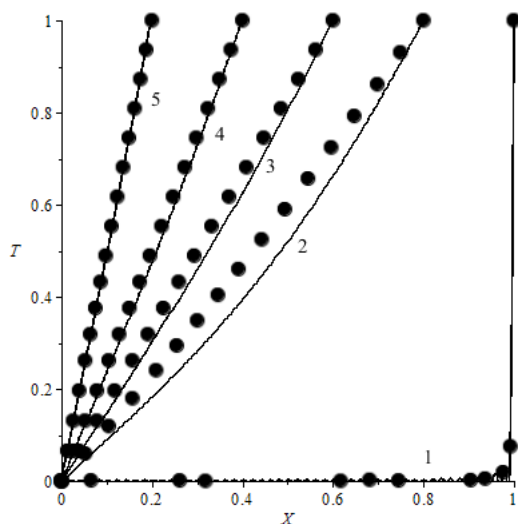


Рис. 3. Изменение профиля температуры по высоте полосы при $A=1$ при различных θ : 1 – 10^{-5} ; 2 – 0,2; 3 – 0,4; 4 – 0,6; 5 – 0,8
● – приближенное параметрическое решение

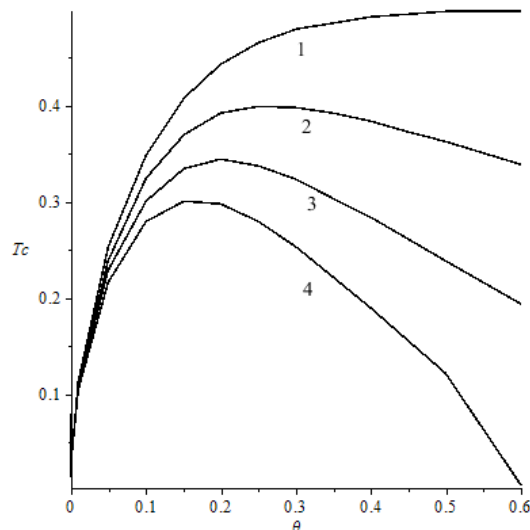


Рис. 4. Изменение среднеинтегральной температуры в полосе при различных A : 1 – 0; 2 – 0,5; 3 – 1,0; 4 – 1,5

Литература

1. Основы теплопередачи в авиационной и ракетно-космической технике / В.С. Авдеевский, Б.М. Галицейский, Г.А. Глебов и др. – М.: Машиностроение, 1992. – 518 с.
2. Антонов, П.В. Зависимость фронта кристаллизации и скорости роста слитка Бриджмена–Стокбаргера / П.В. Антонов, В.С. Бердников // ПМТФ. – 2012. – Т. 53, № 6. – С. 65–77.
3. A moving boundary model for fruit isothermal drying and shrinkage: An optimization method for water diffusivity and peel resistance estimation / D. Lentzon, A.G. Boudouvis, V.T. Karathanos, G. Xanthopoulos // J. of Food Eng. – 2019. – Vol. 263. – P. 299–310.
4. Баранов, А.Ю. Моделирование нестационарного теплообмена в криомедицине / А.Ю. Баранов, Т.А. Малышева // Вестник Международной Академии Холода. – 2000. – № 2. – С. 38–41.
5. Бекман, И.Н. Математика диффузии / И.Н. Бекман. – М.: ОнтоПринт, 2016. – 399 с.
6. Crank, J. Free and moving boundary problems / J. Crank. – Oxford: Clarendon Press, 1984. – 425 p.
7. Карташов, Э.М. Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел / Э.М. Карташов. – М.: Высш. шк., 2001. – 549 с.
8. Рубин, А.Г. Решение краевых задач нестационарной теплопроводности в области с движущейся границей при наличии источника теплоты / А.Г. Рубин // Челябинский физико-математический журнал. – 1994. – Т. 3, № 1(2). – С. 108–111.
9. Власов, П.А. Влияние равномерного движения границы на температурное поле полупространства, подверженного нагреву внешним тепловым потоком / П.А. Власов // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2014. – № 8. – С. 101–109.
10. Снеддон, И. Преобразование Фурье / И. Снеддон. – М.: Изд-во иностр. лит., 1955. – 668 с.
11. Ozisik, M.N. Heat Conduction / M.N. Ozisik. – NY: John Wiley & Soons, Inc., 1993. – 692 p.
12. Деч, Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования / Г. Деч. – М.: Наука, 1971. – 288 с.
13. Рязских, А.В. Седиментация малоконцентрированной взвеси стоксовских частиц в перемешиваемом слое с движущейся свободной границы / А.В. Рязских // ЖТФ. – 2019. – Т. 89, Вып. 8. – С. 1150–1157.

Поступила в редакцию 18 февраля 2022 г.

Сведения об авторе

Рязских Александр Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра прикладной математики и механики, Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-9823-3165>, e-mail: ryazhskihav@bk.ru

**THERMAL CONDUCTIVITY IN A HOMOGENEOUS STRIP WITH A LINEAR
CHANGE IN THICKNESS UNDER BOUNDARY CONDITIONS OF THE FIRST KIND****A.V. Ryazhskikh**

Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation

E-mail: ryazhskihav@bk.ru

Abstract. An accurate analytical solution has been obtained in quadratures of the initial boundary value problem for one-dimensional unsteady-state heat-transfer equation with boundary conditions of the first kind for an endless strip, while one of its boundaries is moving at a constant preset speed decreasing the strip thickness. Preliminarily, through the self-similar change of the spatial variable, the initial system of equations has been reduced to a fixed boundary system, to which the method of partitioning of dependent variables has been applied. The requirement that the coefficients before the first-order derivative must be equal to zero for the self-similar derivative and separately included function in a modified equation in partial derivative of parabolic type has allowed to determine the general structure of the solution containing an unknown function. This function is presented as a superposition of two potentials, which are proportionally connected using the self-similar derivative, what has made it possible to simplify the modified equation and to apply the classical Fourier sine integral transformation for its solution. The computation results has shown the dynamics of the local temperature profile along the changing strip thickness at a constant speed, while the kinetics of the average integral temperature shows (unlike with the case of absence of boundary movement) the presence of the maximum that shifts with the growth of the ratio of the boundary movement speed to the heat transfer speed by the conductivity to the fixed boundary. This is explained by the intensive heating up of the strip material in the conditions of the decreasing of its thickness; meanwhile, with the increase in the boundary movement speed (or with the use of material with reduced thermal conductivity), it approaches the fixed boundary. By assuming that the strip thickness is a parameter, the problem in the initial wording is solved using the method of the one-sided Laplace integral time transformation. This solution, when using the linear dependence of parameter on time, correlates with the obtained accurate solution, and therefore it can be used for the preliminary evaluation of the required characteristics of a process under consideration.

Keywords: analytical solution; strip; parabolic equation; movable boundary; boundary conditions of the first kind.

References

1. Avduevskiy V.S., Galitseyskiy B.M., Glebov G.A. *Osnovy teploperedachi v avitsionnoy i raketno-kosmicheskoy tekhnike* (Fundamentals of Heat Transfer in Aviation and Rocket and Space Technology). Moscow, Mashinostroenie Publ., 1992, 518 p. (in Russ.).
2. Antonov P.V., Berdnikov V.S. Dependences of the Shape of the Crystallization Front and Growth Rate of a Silicon Ingot on the Heat Transfer Mode in the Bridgman–Stockbarger Method. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2012, Vol. 53, pp. 860–870. DOI: 10.1134/S0021894412060089
3. Lentzon D., Boudouvis A.G., Karathanos V.T., Xanthopoulos G. A Moving Boundary Model for Fruit Isothermal Drying and Shrinkage: An Optimization Method for Water Diffusivity and Peel Resistance Estimation. *J. of Food Eng.*, 2019, Vol. 263, pp. 299–310. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2019.07.010
4. Baranov A.Yu., Malysheva T.A. Modelirovanie nestatsionarnogo teploobmena v kriomeditsine (Modeling of Unsteady Heat Transfer in Cryomedicine). *Vestnik Mezhdunarodnoi akademii kholoda*, 2000, no. 2, pp. 38–41. (in Russ.).
5. Bekman, I.N. *Matematika diffuzii* (The Mathematics of Diffusion). Moscow, OntoPrint Publ., 2016, 399 p. (in Russ.).

6. Crank J. *Free and Moving Boundary Problems*. Oxford, Clarendon Press, 1984, 425 p.
7. Kartashov E.M. *Analiticheskie metody v teorii teploprovodnosti tverdykh tel* (Analytical Methods in the Theory of Thermal Conductivity of Solids). Moscow, Vyssh. shk. Publ., 2001, 549 p. (in Russ.).
8. Rubin A.G. Reshenie kraevykh zadach nestatsionarnoy teploprovodnosti v oblasti s dvizhushcheysya granitsej pri nalichii istochnika teploty (Solving Boundary Value Problems of Unsteady Thermal Conductivity in a Region with a Moving Boundary in the Presence of a Heat Source), *Vestnik Chelyabinsk. Gos. Univ.*, 1994, no. 2, pp. 108–111. (in Russ.).
9. Vlasov, P.A. Vliyanie ravnomernogo dvizheniya granitsy na temperaturnoe pole poluprostranstva, podverzhennogo nagrevu vneshnim teplovym potokom (The Effect of Uniform Boundary Motion on the Temperature Field of a Half-Space Exposed to Heating by an External Heat Flow). *Nauka i obrazovanie. MGTU im. N.E. Baumana*, 2014, no. 8, pp. 101–109. (in Russ.).
10. Sneddon I. *Preobrazovanie Fur'e* (Fourier Transform). Moscow, Izd-vo inostr. Lit. Publ., 1955, 668 p. (in Russ.).
11. Ozisik, M.N. *Heat Conduction*. NY: John Willey & Sons, Inc., 1993, 692 p.
12. Dech, G. *Rukovodstvo k prakticheskomu primeneniyu preobrazovaniya Laplasy i Z-preobrazovaniya* (A Guide to the Practical Application of the Laplace Transform and the Z-Transform). Moscow, Nauka Publ., 1971, 288 p. (in Russ.).
13. Ryazhskikh, A.V. Sedimentation of a Low-Concentration Suspension of Stokes Particles in a Stirred Layer with a Movable Free Boundary. *Tech. Phys.*, 2019, Vol. 64, pp. 1082–1089. DOI: 10.1134/S106378421908019X

Received February 18, 2022

Information about the author

Ryazhskikh Aleksandr Viktorovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Applied Mathematics and Mechanics, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-9823-3165>, e-mail: ryazhskihav@bk.ru

ЗАДАЧА НЕЙМАНА ДЛЯ НЕЛОКАЛЬНОГО БИГАРМОНИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Б.Х. Турметов¹, В.В. Карачик²

¹ *Международный казахско-турецкий университет имени А. Ясави, г. Туркестан, Республика Казахстан*

E-mail: batirkhan.turmetov@ayu.edu.kz

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

E-mail: karachik@susu.ru

Аннотация. Исследуются условия разрешимости одного класса краевых задач для нелокального бигармонического уравнения в единичном шаре с условиями Неймана на границе. Нелокальность уравнения порождается некоторой ортогональной матрицей. Исследованы существование и единственность решения поставленной задачи Неймана и получено интегральное представление решения через функцию Грина задачи Дирихле для бигармонического уравнения в единичном шаре.

Сначала устанавливаются некоторые вспомогательные утверждения: приводится функция Грина задачи Дирихле для бигармонического уравнения в единичном шаре, выписывается представление решения задачи Дирихле через эту функцию Грина, находятся значения интегралов от функций, возмущенных ортогональной матрицей. Затем доказывается теорема о представлении решения вспомогательной задачи Дирихле для нелокального бигармонического уравнения в единичном шаре. Решение этой задачи выписывается с использованием функции Грина задачи Дирихле для обычного бигармонического уравнения. Приводится пример решения простой задачи для нелокального бигармонического уравнения. Далее сформулирована теорема о необходимых и достаточных условиях разрешимости задачи Неймана для нелокального бигармонического уравнения. Доказательство основной теоремы опирается на две леммы, с помощью которых удается преобразовать условия разрешимости задачи Неймана к более простому виду. Решение задачи Неймана представляется через решение вспомогательной задачи Дирихле.

Ключевые слова: нелокальный оператор; задача Неймана; бигармоническое уравнение; условия разрешимости; функция Грина.

Введение. Краевые и начально-краевые задачи для нелокальных аналогов классических уравнений исследовались в работах [1–6]. Многочисленные приложения нелокальных уравнений и нелокальных краевых задач для эллиптических уравнений к задачам физики, техники и других отраслей науки описаны в [7, 8]. Краевые задачи для эллиптических уравнений второго и четвертого порядка с инволюцией как частные случаи нелокальных задач рассматриваются в [9–13]. В работе [14] исследовалась задача Дирихле для полигармонического уравнения. Данная работа продолжает эти исследования.

Пусть $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n : |x| < 1\}$ – единичный шар в \mathbb{R}^n , $n \geq 2$, а $\partial\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n : |x| = 1\}$ – единичная сфера и S – действительная ортогональная матрица $SS^T = E$, для которой существует натуральное число $l \in \mathbb{N}$ такое, что $S^l = E$.

Пример 1. Пусть каждому $x \in \Omega$ соответствует точка $Sx = -x$. В этом случае $S = -E$. Ясно, что $S \cdot S^T = -E(-E) = E$ и $S^2 = E$. Значит, $l = 2$.

Рассмотрим нелокальный бигармонический дифференциальный оператор

$$Lu(x) \equiv \sum_{k=1}^l a_k \Delta^2 u(S^{k-1}x),$$

где a_1, a_1, \dots, a_l – некоторые действительные числа и $l \in \mathbb{N}$. Исследуем в Ω следующую задачу.

Задача Неймана. Найти функцию $u(x) \in C^4(\Omega) \cap C^2(\bar{\Omega})$, удовлетворяющую следующим условиям:

$$Lu(x) = f(x), x \in \Omega, \tag{1}$$

$$\frac{\partial u(x)}{\partial \nu} \Big|_{\partial\Omega} = g_0(x), \quad \frac{\partial^2 u(x)}{\partial \nu^2} \Big|_{\partial\Omega} = g_1(x), \tag{2}$$

где ν – внешняя единичная нормаль к $\partial\Omega$.

Вспомогательные утверждения. Для исследования поставленной выше задачи нам понадобятся некоторые вспомогательные утверждения.

Наряду с задачей (1), (2) рассмотрим также вспомогательную задачу (1), (3)

$$u(x) \Big|_{\partial\Omega} = g_0(x), \quad \frac{\partial u(x)}{\partial \nu} \Big|_{\partial\Omega} = g_1(x), \tag{3}$$

Пусть $\lambda_1 = e^{i\frac{2\pi}{l}}$ – примитивный корень l -й степени из единицы и $\lambda_k = e^{i\frac{2\pi k}{l}} = \lambda_1^k$. Обозначим

$$\mu_k = a_1 \lambda_0^k + \dots + a_l \lambda_{l-1}^k = \sum_{q=1}^l a_q \lambda_{q-1}^k = \sum_{q=1}^l a_q \lambda_k^{q-1}.$$

Пусть

$$c_j = \frac{1}{l} \sum_{k=1}^l \frac{1}{\lambda_k^{j-1} \mu_k} \tag{4}$$

при $j = 1, 2, \dots, l$. Введем операторы

$$I_L v(x) = \sum_{k=1}^l a_k I_{S^{k-1}} v(x) = \sum_{k=1}^l a_k v(S^{k-1}x), \quad J_L v(x) = \sum_{k=1}^l c_k v(S^{k-1}x). \tag{5}$$

В работе [15] было определено элементарное решение бигармонического уравнения

$$E_4(x, \xi) = \begin{cases} \frac{1}{2(n-2)(n-4)} |x-\xi|^{4-n}, & n > 4, n = 3 \\ -\frac{1}{4} \ln |x-\xi|, & n = 4 \\ \frac{|x-\xi|^2}{4} (\ln |x-\xi| - 1), & n = 2 \end{cases}, \tag{6}$$

и доказано, что при $n \geq 3$ функция вида

$$G_4(x, \xi) = E_4(x, \xi) - E_4\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right) - \frac{|x|^2 - 1}{2} \frac{|\xi|^2 - 1}{2} E\left(\frac{x}{|x|}, |x|\xi\right), \tag{7}$$

где $E(x, \xi) = |x-\xi|^{2-n} / (n-2)$, является функцией Грина задачи Дирихле для бигармонического уравнения в единичном шаре. Затем в работах [16, 17] установлено следующее утверждение.

Теорема 1. Пусть $\varphi_0 \in C^{2+\varepsilon}(\partial S)$, $\varphi_1 \in C^{1+\varepsilon}(\partial S)$ и $f \in C^1(\bar{S})$, тогда решение задачи Дирихле для бигармонического уравнения при $n > 4$ или $n = 3$ можно представить в виде

$$u(x) = \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial\Omega} g_0(\xi) \frac{\partial}{\partial \nu} \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi - \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial\Omega} g_1(\xi) \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi + \frac{1}{\omega_n} \int_\Omega G_4(x, \xi) f(\xi) d\xi,$$

где ω_n – площадь единичной сферы в \mathbb{R}^n .

Далее нам понадобится еще следующее утверждение.

Лемма 1 [5]. Пусть функция $g(x)$ непрерывна на $\partial\Omega$ или Ω . Тогда для любого $k \in \mathbb{N}$

$$\int_{\partial\Omega} g(S^k y) ds_y = \int_{\partial\Omega} g(y) ds_y, \quad \int_\Omega g(S^k y) dy = \int_\Omega g(y) dy.$$

Докажем вспомогательную теорему существования для решения задачи (1), (2).

Теорема 2. Пусть коэффициенты $\{a_k : k=1, \dots, l\}$ оператора L такие, что $\mu_k \neq 0$ при $k=1, \dots, l$ и $g_0 \in C^{2+\varepsilon}(\partial\Omega)$, $g_1 \in C^{1+\varepsilon}(\partial\Omega)$ и $f \in C^1(\bar{\Omega})$. Тогда решение задачи Дирихле (1), (3) существует и единственно и может быть представлено в виде

$$u(x) = \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial\Omega} g_0(\xi) \frac{\partial}{\partial \nu} \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi - \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial\Omega} g_1(\xi) \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi + \frac{1}{\omega_n} \int_{\Omega} G_4(x, \xi) J_L f(\xi) d\xi, \quad (8)$$

где оператор J_L определен в (5).

Доказательство. Обозначим $v(x) = I_L u(x)$. В [14] показано, что $u(x) = J_L v(x)$. В силу леммы 4 из [14] о коммутативности операторов I_S и Δ , I_S и Λ , учитывая равенство $\frac{\partial}{\partial \nu} u|_{\partial\Omega} = \Lambda u|_{\partial\Omega}$ задачу (1), (3) можно переписать в виде

$$\Delta^2 v(x) = f(x), x \in \Omega; \quad v|_{\partial\Omega} = I_L g_0(s), \Lambda u|_{\partial\Omega} = I_L g_1(s), s \in \partial\Omega. \quad (9)$$

Ясно, что $g_0 \in C^{2+\varepsilon}(\partial\Omega) \Rightarrow I_L g_0 \in C^{2+\varepsilon}(\partial\Omega)$, $g_1 \in C^{1+\varepsilon}(\partial\Omega) \Rightarrow I_L g_1 \in C^{1+\varepsilon}(\partial\Omega)$, и значит, решение задачи Дирихле (9) существует и единственно. В силу теоремы 1 это решение можно представить в виде

$$v(x) = \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial\Omega} I_L g_0(\xi) \Lambda \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi - \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial\Omega} I_L g_1(\xi) \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi + \frac{1}{\omega_n} \int_{\Omega} G_4(x, \xi) f(\xi) d\xi.$$

Применяя оператор J_L к обеим частям равенства и учитывая при этом $u(x) = J_L v(x)$, получим

$$u(x) = \frac{1}{\omega_n} J_L \int_{\partial\Omega} I_L g_0(\xi) \Lambda \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi - \frac{1}{\omega_n} J_L \int_{\partial\Omega} I_L g_1(\xi) \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi + \frac{1}{\omega_n} J_L \int_{\Omega} G_4(x, \xi) f(\xi) d\xi. \quad (10)$$

В полученном выражении преобразуем сначала последний интеграл. Нетрудно видеть, что $|S^k x - S^k \xi| = |S^k(x - \xi)| = |x - \xi|$, а значит, в соответствии с $E_4(S^k x, S^k \xi) = E_4(x, \xi)$ и, следовательно, учитывая (7), найдем $G_4(S^k x, S^k \xi) = G_4(x, \xi)$. Далее в силу леммы 1

$$I_{S^k} \int_{\Omega} G_4(x, \xi) f(\xi) d\xi = \int_{\Omega} G_4(S^k x, S^k \xi) f(S^k \xi) d\xi = \int_{\Omega} G_4(x, \xi) I_{S^k} f(\xi) d\xi.$$

Поэтому согласно формуле (5)

$$J_L \int_{\Omega} G_4(x, \xi) f(\xi) d\xi = \sum_{k=1}^l c_k I_{S^{k-1}} \int_{\Omega} G_4(x, \xi) f(\xi) d\xi = \int_{\Omega} G_4(x, \xi) J_L f(\xi) d\xi.$$

Аналогично по лемме 1 получим

$$J_L \int_{\partial\Omega} \hat{g}_0(\xi) \frac{\partial}{\partial \nu} \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi = \int_{\partial\Omega} J_L \hat{g}_0(\xi) \frac{\partial}{\partial \nu} \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi \\ J_L \int_{\partial\Omega} \hat{g}_1(\xi) \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi = \int_{\partial\Omega} J_L \hat{g}_1(\xi) \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi.$$

Таким образом, решение $u(x)$ из (10) можно переписать в виде

$$u(x) = \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial\Omega} J_L I_L g_0(\xi) \Lambda \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi - \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial\Omega} J_L I_L g_1(\xi) \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi + \frac{1}{\omega_n} \int_{\Omega} G_4(x, \xi) J_L f(\xi) d\xi. \quad (11)$$

В силу формул (5) и $u(x) = J_L v(x)$ верны равенства $\hat{g}_i(\xi) = I_L g_i(\xi)$, $g_i(\xi) = J_L \hat{g}_i(\xi)$, из которых следует, что $J_L I_L g_i(\xi) = g_i(\xi)$ при $i=1, 2$ для произвольной функции $g_i(\xi)$ на $\partial\Omega$. Поэтому (11) преобразовывается к (8). Теорема доказана.

Следствие. Пусть $v_0(x)$ и $v_1(x)$ – гармонические в Ω функции такие, что $v_0(x)|_{\partial\Omega} = g_0$ и $v_1(x)|_{\partial\Omega} = g_1$, тогда решение задачи Дирихле (1), (3) можно записать в виде

$$u(x) = v_0(x) + \frac{1-|x|^2}{2} \Lambda v_0(x) - \frac{1-|x|^2}{2} v_1(x) + \frac{1}{\omega_n} \int_{\Omega} G_4(x, \xi) J_L f(\xi) d\xi.$$

Полученная формула следует из теоремы 2 и из представления решения задачи Дирихле для однородного бигармонического уравнения

$$\Delta^2 u_0(x) = 0, x \in \Omega; \quad u_0|_{\partial\Omega} = g_0(s), \quad \frac{\partial u_0}{\partial \nu}|_{\partial\Omega} = g_1(s), \quad s \in \partial\Omega$$

в форме

$$u_0(x) = v_0(x) + \frac{1-|x|^2}{2} \Lambda v_0(x) - \frac{1-|x|^2}{2} v_1(x),$$

полученной в [18].

Пример 2. Пусть S – симметричная матрица такая, что $S^2 = E$ и, значит, $l = 2$. Задача (1), (2) примет вид

$$a_1 \Delta^2 u(x) + a_2 \Delta^2 u(Sx) = f(x), x \in \Omega; \quad u|_{\partial\Omega} = g_0(s), \quad \frac{\partial u}{\partial \nu}|_{\partial\Omega} = g_1(s), s \in \partial\Omega. \quad (12)$$

В этом случае $l = 2$, $\lambda_1 = e^{i\pi} = -1$, $\lambda_2 = e^{2i\pi} = 1$, $\mu_1 = a_1 - a_2$, $\mu_2 = a_1 + a_2$ и

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_2 & a_1 \end{pmatrix}, \quad \det A = \mu_1 \cdot \mu_2 = a_1^2 - a_2^2.$$

Пусть $a_1^2 - a_2^2 \neq 0 \Leftrightarrow a_1 \neq \pm a_2$. По формуле (4) найдем

$$c_1 = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^2 \frac{1}{\lambda_k^0 \mu_k} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{a_1 - a_2} + \frac{1}{a_2 + a_1} \right) = \frac{a_1}{a_1^2 - a_2^2},$$

$$c_2 = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^2 \frac{1}{\lambda_k^1 \mu_k} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{-\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} \right) = \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{a_1 - a_2} + \frac{1}{a_2 + a_1} \right) = \frac{-a_2}{a_1^2 - a_2^2}$$

и, значит,

$$J_L f = c_1 f(x) + c_2 f(Sx) = \frac{a_1 f(x) - a_2 f(Sx)}{a_1^2 - a_2^2}.$$

В соответствии со следствием решение задачи (12) может быть записано в виде

$$u(x) = v_0(x) + \frac{1-|x|^2}{2} \Lambda v_0(x) - \frac{1-|x|^2}{2} v_1(x) + \frac{1}{\omega_n} \int_{\Omega} G_4(x, \xi) \frac{a_1 f(\xi) - a_2 f(S\xi)}{a_1^2 - a_2^2} d\xi.$$

Существование решения задачи Неймана. В этом разделе исследуем существование решения задачи Неймана (1), (2). Пусть $G_4(x, y)$ – функция Грина (7) классической задачи Дирихле для бигармонического уравнения в единичном шаре. Заметим, что явный вид функции Грина задачи Неймана для уравнения Лапласа в единичном шаре в случае $n = 2$ и $n = 3$ приводится в учебниках по уравнениям в частных производных, а в случае размерности $n \geq 4$ она построена в работах [19, 20].

Теорема 3. Пусть коэффициенты $\{a_k : k = 1, \dots, l\}$ оператора L такие, что $\mu_k = a_1 \lambda_0^k + \dots + a_l \lambda_{l-1}^k \neq 0$, при $k = 1, \dots, l$ и $f \in C^2(\bar{\Omega})$, $g_0(x) \in C^{3+\varepsilon}(\partial\Omega)$, $g_1(x) \in C^{2+\varepsilon}(\partial\Omega)$, $\varepsilon > 0$. Для разрешимости задачи (1), (3) необходимо и достаточно следующее условие

$$\int_{\partial\Omega} (g_0(x) - g_1(x)) ds_x + \frac{1}{\mu_l} \int_{\Omega} \frac{|x|^2 - 1}{2} f(x) dx = 0. \quad (13)$$

Если решение задачи существует, то оно единственно с точностью до постоянных и может быть представлено в виде

$$u(x) = \int_0^1 w(tx) \frac{dt}{t}, \quad (14)$$

где

$$w(x) = \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial\Omega} g_0(\xi) \frac{\partial}{\partial \nu} \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi - \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial\Omega} (g_0(\xi) + g_1(\xi)) \Delta_\xi G_4(x, \xi) ds_\xi + \frac{1}{\omega_n} \int_{\Omega} G_4(x, \xi) J_L(\Lambda + 4) f(\xi) d\xi, \quad (15)$$

и оператор J_L определен в (5), а функция $G_4(x, \xi)$ в (7).

Доказательство. Сначала доказывается, что решение задачи (1), (3) представляется в виде (14), (15) при условии, что $w(0) = 0$. Затем, на основании работы [20], устанавливается, что

$$w(x) = w_0(x) + \frac{1}{\omega_n} \int_{\Omega} G_4(x, \xi) (\Lambda_\xi + 4) J_L f(\xi) d\xi,$$

где

$$w_0(x) = v_0(x) + \frac{1 - |x|^2}{2} \Lambda v_0(x) - \frac{1 - |x|^2}{2} v_1(x),$$

а $v_0(x)$ и $v_1(x)$ – гармонические в Ω функции такие, что $v_0(x)|_{\partial\Omega} = g_0$ и $v_1(x)|_{\partial\Omega} = g_0 + g_1$.

Лемма 2. Общее решение уравнения $(\Lambda + 4)v(x) = 0$ имеет вид

$$v(x) = C(\ln(x_2/x_1), \dots, \ln(x_n/x_1)) x_1^{-4},$$

где $C(\tau_2, \dots, \tau_n)$ – произвольная дифференцируемая функция.

На основании леммы 2 доказывается, что условие разрешимости $w(0) = 0$ является необходимым и достаточным условием разрешимости задачи Неймана (1), (2).

Лемма 3. При $n \geq 3$ справедливо равенство

$$\int_{\Omega} G_4(0, \xi) (\Lambda + 4) \hat{f}(\xi) d\xi = \int_{\Omega} \frac{1 - |\xi|^2}{4} \hat{f}(\xi) d\xi,$$

где $G_4(x, \xi)$ – функция Грина задачи Дирихле для бигармонического уравнения в шаре (7).

С помощью леммы 3 условие разрешимости задачи Неймана $w(0) = 0$ приводится к виду (13). Теорема доказана.

Исследование выполнено при поддержке грантового финансирования Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках научного проекта № AP08855810 и финансовой поддержке Правительства РФ (Постановление № 211 от 16.03.2013 г.), соглашение № 02.A03.21.0011.

Литература

1. Нахушев, А.М. Уравнения математической биологии / А.М. Нахушев. – М.: Высш. шк., 1995. – 301 с.
2. Андреев, А.А. Об аналогах классических краевых задач для одного дифференциального уравнения второго порядка с отклоняющимся аргументом / А.А. Андреев // Дифференц. уравнения. – 2004. – Т. 40, № 8. – С. 1126–1128.
3. Ashyralyev, A. Well-posedness of a parabolic equation with involution / A. Ashyralyev, A.M. Sarsenbi // Numerical Functional Analysis and Optimization. – 2017. – Vol. 38, no. 10. – P. 1295–1304.
4. Ashyralyev, A. Well-posedness of an elliptic equation with involution / A. Ashyralyev, A.M. Sarsenbi // Electronic Journal of Differential Equations. – 2015. – № 284. – С. 1–8.
5. Karachik, V.V. On the solvability of the main boundary value problems for a nonlocal Poisson equation / V.V. Karachik, A.M. Sarsenbi, B.Kh. Turmetov // Turkish Journal of Mathematics. – 2019. – Vol. 43, no. 3. – P. 1604–1625.
6. Kirane, M. Inverse problems for a nonlocal wave equation with an involution perturbation / M. Kirane, N. Al-Salti // Journal of Nonlinear Sciences and Applications. – 2016. – Vol. 9, Iss. 3. – P. 1243–1251.
7. Skubachevskii, A.L. Nonclassical boundary value problems. I / A.L. Skubachevskii // Journal of Mathematical Sciences. – 2008. – Vol. 155, Iss. 2. – P. 199–334.
8. Skubachevskii, A.L. Nonclassical boundary-value problems. II / A.L. Skubachevskii // Journal of Mathematical Sciences. – 2010. – Vol. 166, Iss. 4. – P. 377–561.

9. Przeworska-Rolewicz, D. Some boundary value problems with transformed argument / D. Przeworska-Rolewicz // *Commentationes Mathematicae*. – 1974. – Vol. 17, no. 2. – P. 451–457.
10. Карачик В.В. Об одной задаче типа Неймана для бигармонического уравнения / В.В. Карачик // *Математические труды*. – 2016. – Т. 19, № 2. – С. 86–108.
11. Sadybekov, M.A. On boundary value problems of the Samarskii–Ionkin type for the Laplace operator in a ball / M.A. Sadybekov, A.A. Dukenbayeva // *Complex Variables and Elliptic Equations*. – 2020. – P. 1–15.
12. Karachik, V.V. On solvability of some nonlocal boundary value problems for biharmonic equation / V.V. Karachik, B.Kh. Turmetov // *Mathematica Slovaca*. – 2020. – Vol. 70, Iss. 2. – P. 329–342.
13. Karachik, V.V. Solvability of one nonlocal Dirichlet problem for the Poisson equation / V.V. Karachik, B.Kh. Turmetov // *Novi Sad Journal of Mathematics*. – 2020. – Vol. 50, no. 1. – P. 67–88.
14. Турметов Б.Х., Карачик В.В. О задаче Дирихле для нелокального полигармонического уравнения / Б.Х. Турметов, В.В. Карачик // *Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математика. Механика. Физика*. – 2021. – Т. 13, № 2. – С. 37–45.
15. Karachik, V.V. Greens function of Dirichlet problem for biharmonic equation in the ball / V.V. Karachik // *Complex Variables and Elliptic Equations*. – 2019. – Vol. 64, no. 9. – P. 1500–1521.
16. Карачик, В.В. Функции Грина задач Навье и Рикье–Неймана для бигармонического уравнения в шаре / В.В. Карачик // *Дифференциальные уравнения*. – 2021. – Т. 57, no. 5. – P. 673–686.
17. Karachik V. Green's functions of some boundary value problems for the biharmonic equation. *Complex Variables and Elliptic Equations*. – 2021. (Online).
18. Karachik, V. Dirichlet and Neumann boundary value problems for the polyharmonic equation in the unit ball / V. Karachik // *Mathematics*. – 2021. – Vol. 9, no. 16. – Article no. 1907.
19. Karachik, V.V. On the Green's function for the third boundary value problem / V.V. Karachik, B.K. Turmetov // *Siberian Advances in Mathematics*. – 2019. – Т. 29, no. 1. – P. 32–43.
20. Sadybekov, M.A. Representation of Green's function of the Neumann problem for a multi-dimensional ball / M.A. Sadybekov, B.T. Torebek, B.K. Turmetov // *Complex Variables and Elliptic Equations*. – 2016. – Vol. 61, no. 1. – P. 104–123.

Поступила в редакцию 9 февраля 2022 г.

Сведения об авторах

Турметов Батирхан Худайбергенович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра математики, Международный казахско-турецкий университет имени А. Ясави, г. Туркестан, Республика Казахстан, e-mail: batirkhan.turmetov@ayu.edu.kz

Карачик Валерий Валентинович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра «Математический анализ и методика преподавания математики», старший научный сотрудник, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: karachikvv@susu.ru

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2022, vol. 14, no. 2, pp. 51–58*

DOI: 10.14529/mmph220205

NEUMANN BOUNDARY CONDITION FOR A NONLOCAL BIHARMONIC EQUATION

B.Kh. Turmetov¹, V.V. Karachik²

¹ Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkistan, Kazakhstan
E-mail: batirkhan.turmetov@ayu.edu.kz

² South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: karachik@susu.ru

The solvability conditions for a class of boundary value problems for a nonlocal biharmonic equation in the unit ball with the Neumann conditions on the boundary are studied. The nonlocality of the

equation is generated by some orthogonal matrix. The presence and uniqueness of a solution to the proposed Neumann boundary condition is examined, and an integral representation of the solution to the Dirichlet problem in terms of the Green's function for the biharmonic equation in the unit ball is obtained.

First, some auxiliary statements are established: the Green's function of the Dirichlet problem for the biharmonic equation in the unit ball is given, the representation of the solution to the Dirichlet problem in terms of this Green's function is written, and the values of the integrals of the functions perturbed by the orthogonal matrix are found. Then a theorem for the solution to the auxiliary Dirichlet problem for a nonlocal biharmonic equation in the unit ball is proved. The solution to this problem is written using the Green's function of the Dirichlet problem for the regular biharmonic equation. An example of solving a simple problem for a nonlocal biharmonic equation is given. Next, we formulate a theorem on necessary and sufficient conditions for the solvability of the Neumann boundary condition for a nonlocal biharmonic equation. The main theorem is proved based on two lemmas, with the help of which it is possible to transform the solvability conditions of the Neumann boundary condition to a simpler form. The solution to the Neumann boundary condition is presented through the solution to the auxiliary Dirichlet problem.

Keywords: nonlocal operator; the Neumann boundary condition; biharmonic equation; solvability conditions; Green's function.

References

1. Nakhushev, A.M. *Uravneniya matematicheskoy biologii* (Equations of Mathematical Biology). Moscow, Vyssh. shk., 1995, 301 p. (in Russ.).
2. Andreev A.A. Analogs of Classical Boundary Value Problems for a Second-Order Differential Equation with Deviating Argument. *Differential Equations*, 2004, Vol. 40, no. 8, pp. 1192–1194. DOI: 10.1023/B:DIEQ.0000049836.04104.6f
3. Ashyralyev A., Sarsenbi A. Well-Posedness of a Parabolic Equation with Involution. *Numerical Functional Analysis and Optimization*, 2017, Vol. 38, no. 10, pp. 1295–1304. DOI: 10.1080/01630563.2017.1316997
4. Ashyralyev A., Sarsenbi A. Well-Posedness of an elliptic Equation with Involution. *Electronic Journal of Differential Equations*, 2015, no. 284, pp. 1–8.
5. Karachik V.V., Sarsenbi A.M., Turmetov B.Kh. On the Solvability of the Main Boundary Value Problems for a Nonlocal Poisson Equation. *Turkish Journal of Mathematics*, 2019, Vol. 43, no. 3, pp. 1604–1625. DOI: 10.3906/mat-1901-71
6. Kirane M, Al-Salti N. Inverse Problems for a Nonlocal Wave Equation with an Involution Perturbation. *Journal of Nonlinear Sciences and Applications*, 2016; Vol. 9, Iss. 3, pp. 1243–1251. DOI: 10.22436/jnsa.009.03.49
7. Skubachevskii A.L. Nonclassical Boundary Value Problems. I. *Journal of Mathematical Sciences*, 2008, Vol. 155, Iss. 2, pp. 199–334. DOI: 10.1007/s10958-008-9218-9
8. Skubachevskii A.L. Nonclassical Boundary-Value Problems. II. *Journal of Mathematical Sciences*, 2010, Vol. 166, Iss. 4, pp. 377–561. DOI: 10.1007/s10958-010-9873-5
9. Przeworska-Rolewicz D. Some Boundary Value Problems with Transformed Argument. *Commentationes Mathematicae*, 1974, Vol. 17, no. 2, pp. 451–457.
10. Karachik, V.V. A Neumann-type problem for the biharmonic equation. *Siberian Advances in Mathematics*, 2017, Vol. 27, no. 2, pp. 103–118. DOI: 10.3103/S105513441702002X
11. Sadybekov M.A., Dukenbayeva A.A. On Boundary Value Problems of the Samarskii–Ionkin Type for the Laplace Operator in a Ball. *Complex Variables and Elliptic Equations*, 2020, pp. 1–15. DOI: 10.1080/17476933.2020.1828377
12. Karachik V.V., Turmetov B.Kh. On Solvability of Some Nonlocal Boundary Value Problems for Biharmonic Equation. *Mathematica Slovaca*, 2020, Vol. 70, Iss. 2, pp. 329–342. DOI: 10.1515/ms-2017-0355
13. Karachik V.V., Turmetov B.Kh. Solvability of one Nonlocal Dirichlet Problem for the Poisson Equation. *Novi Sad Journal of Mathematics*, 2020, Vol. 50, no. 1, pp. 67–88. DOI: 10.30755/NSJOM.08942

14. Turmetov B.Kh., Karachik V.V. On a Dirichlet problem for a nonlocal polyharmonic equation. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematics. Mechanics. Physics*, 2021, vol. 13, no. 2, pp. 37–45. DOI: 10.14529/mmph210206
15. Karachik V.V. Greens function of Dirichlet problem for biharmonic equation in the ball. *Complex Variables and Elliptic Equations*, 2019, Vol. 64, no. 9, pp. 1500–1521. DOI: 10.1080/17476933.2018.1536702
16. Karachik V.V. Green's Functions of the Navier and Riquier–Neumann Problems for the Biharmonic Equation in the Ball. *Differential Equations*, 2021, Vol. 57, no. 5, pp. 654–668. DOI: 10.1134/S0012266121050098
17. Karachik V. Green's functions of some boundary value problems for the biharmonic equation. *Complex Variables and Elliptic Equations*, 2021. DOI: 10.1080/17476933.2021.1897793
18. Karachik, V. Dirichlet and Neumann boundary value problems for the polyharmonic equation in the unit ball. *Mathematics*, 2021, Vol. 9, no. 16, Article no. 1907. DOI: 10.3390/math9161907
19. Karachik V.V., Turmetov B.K. On the Green's function for the third boundary value problem. *Siberian Advances in Mathematics*, 2019, Vol. 29, no. 1, pp. 32–43. DOI: 10.3103/S1055134419010036
20. Sadybekov M.A, Torebek B.T, Turmetov B.K. Representation of Green's function of the Neumann problem for a multi-dimensional ball. *Complex Variables and Elliptic Equations*, 2016, Vol. 61, no. 1, pp. 104–123. DOI: 10.1080/17476933.2015.1064402

Received February 9, 2022

Information about the authors

Turmetov Batirkhan Khudaybergenovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Mathematics Department, Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkistan, Kazakhstan, e-mail: batirkhan.turmetov@ayu.edu.kz

Karachik Valeriy Valentinovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Mathematical Analysis and Methods of Teaching Mathematics Department, Senior Staff Scientist, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: karachikvv@susu.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИВОЛИНЕЙНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ В ЗАДАЧАХ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ

Д.Д. Зарипова, Ю.М. Ковалев

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

Аннотация. Представлен способ задания начальных условий на границе тела произвольной формы на прямоугольной сетке. В качестве рассматриваемого тела выбран сферический объем сжатого газа, образовавшийся в результате взрыва над поверхностью Земли. Так как ячейки расчетной сетки прямоугольные, а контур криволинейный, то для задания условий на границе используются дробные ячейки. Давление и плотность внутри сферы известны и распределены равномерно по всему объему. Параметры на границе тела предлагается рассчитывать пропорционально объему, который занимает тело в каждой ячейке, через которую проходит контур. Такой объем может быть найден интегрированием по области, отсекаемой кривой от прямоугольной ячейки сетки. Тестирование алгоритма проводилось на численном решении задачи о разлете шара в чистом газе методом крупных частиц. Граница шара является контактным разрывом, поэтому для демонстрации работы метода приведены графики положения изолиний плотности в процессе расширения сферы. Результаты расчетов показали, что описанный механизм обеспечивает сохранение сферической границы в процессе счета: отклонение от значений, удовлетворяющих уравнению окружности, составило менее 1 %.

Ключевые слова: математическое моделирование; газодинамика; граничные условия; дробные ячейки.

Введение

В задачах газодинамики важную роль играет способ задания расчетной области, так как от этого зависит скорость и точность вычислений. Реальные задачи зачастую связаны с обтеканием тел произвольной формы, что делает процесс построения сетки нетривиальной задачей. В этом случае криволинейный контур пересекает расчетную сетку, не совпадая с границами целых ячеек, поэтому для описания начальных условий на границе вводятся дробные ячейки.

Задание граничных условий для тел произвольной формы представляет значительную сложность, поэтому исследования в данном направлении актуальны на сегодняшний день. Так, например, в некоторых работах [1, 2] приводятся расчетные формулы для дробных ячеек, но без постановки граничных условий, за исключением простого случая прямолинейной границы. В других работах [3, 4] вблизи криволинейной границы тела вводится локальная ортогональная система координат, направление осей которой не совпадает с основной прямоугольной системой координат, – такая процедура усложняет алгоритм и вызывает трудности для тел сложной конфигурации.

Подход, используемый в работе [5], не требует введения у поверхности тела какой-либо локальной системы координат, но связан с техническими сложностями построения граничных условий из-за добавления слоя фиктивных ячеек, прилегающих к дробным ячейкам, а также потерей точности при линейной аппроксимации границы тела.

В данной работе рассматривается способ задания начальных условий на границе шара, основанный на нахождении площади ячейки под кривой при помощи интегрирования. Так как для нашей задачи в качестве криволинейной границы выбрана окружность, то не представляет сложности рассчитать площадь, отсекаемую этой окружностью в прямоугольной ячейке. В этом случае существует аналитическое решение для полученного интеграла, чем достигается высокая точность расчетов. Для тела произвольной формы площадь рассчитывается численным интегрированием с кусочно-линейной аппроксимацией криволинейной границы контура.

Описание алгоритма

Рассмотрим расчетную область, содержащую некоторый сферический объем, на границе которого требуется задать начальные условия (рис. 1). Заштрихованные области вдоль криволинейного контура соответствуют дробным ячейкам. Для наглядности формулы приведены для плоского случая.

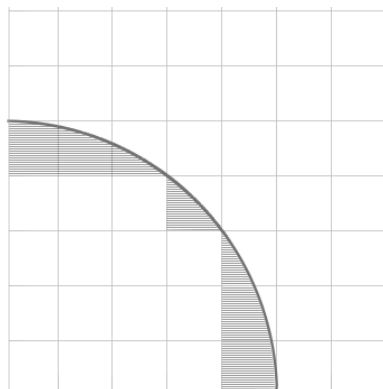


Рис. 1. Схематичное представление сетки с дробными ячейками

Таким образом, если r – радиус окружности, то интеграл может быть записан в виде

$$\int_{x_i}^{x_*} dx \int_{y_j}^{\sqrt{r^2 - x^2}} dy, \quad (1)$$

где x_i – горизонтальная координата левой границы ячейки, для которой происходит интегрирование в данный момент, x_* может принимать значение либо координаты правой границы ячейки, либо точки пересечения окружности с прямой y_j (вертикальная координата сетки); здесь и далее i и j – индексы ячеек, относящиеся к направлениям вдоль x и y соответственно.

При переходе к интегралу по одной переменной имеем

$$\int_{x_i}^{x_*} \sqrt{r^2 - x^2} - y_j dx. \quad (2)$$

После ряда преобразований получим точное решение для интеграла (2).

$$F(x) = \frac{x\sqrt{r^2 - x^2}}{2} + \frac{r^2 \arcsin\left(\frac{x}{r}\right)}{2} - y_j x + C. \quad (3)$$

Ключевым моментом технической реализации метода является определение пределов интегрирования, так как вариантов пересечения окружности с ячейками сетки может быть несколько – необходимо проработать все возможные типы дробных ячеек, которых в данном случае немного. Далее, подставляя пределы интегрирования для каждой дробной ячейки, находим значение площади по формуле (3).

Параметры на границе тела рассчитываются пропорционально занятой этим телом области в ячейке. Следовательно, найденное значение площади эквивалентно некоторой доле α_1 , занимаемой газодинамическими величинами сферы в данной ячейке, соответственно, $(1 - \alpha_1)$ приходится на область, граничащую со сферой.

Итак, если плотность и внутренняя энергия в шаре ρ_1 и E_1 , во внешней среде ρ_2 и E_2 , результирующие величины параметров в такой ячейке рассчитываются как

$$\begin{aligned} \rho &= \alpha_1 \rho_1 + (1 - \alpha_1) \rho_2, \\ E &= \frac{\alpha_1 \rho_1 E_1 + (1 - \alpha_1) \rho_2 E_2}{\rho}, \\ P &= f(\rho, E). \end{aligned} \quad (4)$$

После этапа задания начальных условий на границе тела расчет величин производится по формулам для целых ячеек.

Основные результаты и выводы

Рассмотрим в качестве примера задачу о разлете шара в чистом газе. Пусть в результате взрыва над поверхностью Земли образовался сферический объем сжатого газа, давление внутри объема постоянно. Центр объема находится на оси симметрии Oz цилиндрической системы координат. В начальный момент времени давление внутри шара равно $P_1 = 2500 \cdot 10^5$ Па, в невозмущенной среде $P_2 = 10^5$ Па, плотность $\rho_2 = 1,21$ кг/м³. Расчеты проводились методом крупных частиц [6] на сетке размером 330×210 узлов.

Моделирование проводилось путем численного решения нестационарной системы уравнений Эйлера, записанной в цилиндрической системе координат. Система законов сохранения и уравнение состояния в безразмерной форме имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho r}{\partial t} + \frac{\partial \rho u r}{\partial r} + \frac{\partial \rho v r}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u r}{\partial t} + \frac{\partial \rho u u r}{\partial r} + \frac{\partial \rho u v r}{\partial z} + \frac{\partial P r}{\partial r} &= 0, \\ \frac{\partial \rho v r}{\partial t} + \frac{\partial \rho v u r}{\partial r} + \frac{\partial \rho v v r}{\partial z} + \frac{\partial P r}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial \rho E r}{\partial t} + \frac{\partial \rho u E r}{\partial r} + \frac{\partial \rho v E r}{\partial z} + \frac{\partial P u r}{\partial r} + \frac{\partial P v r}{\partial z} &= 0, \end{aligned} \tag{5}$$

$$e = \frac{P}{\rho(\gamma - 1)},$$

$$E = e + \frac{w^2}{2},$$

где u и v – составляющие скорости w вдоль r и z соответственно, e – внутренняя энергия, γ – показатель адиабаты.

Перейдем к результатам расчетов. Представленные на рис. 2 изолинии плотности демонстрируют сохранение сферической формы контактного разрыва с течением времени. Для проверки было выбрано несколько точек на контактном разрыве, их координаты удовлетворяли уравнению окружности, отклонение составило менее 1 %.

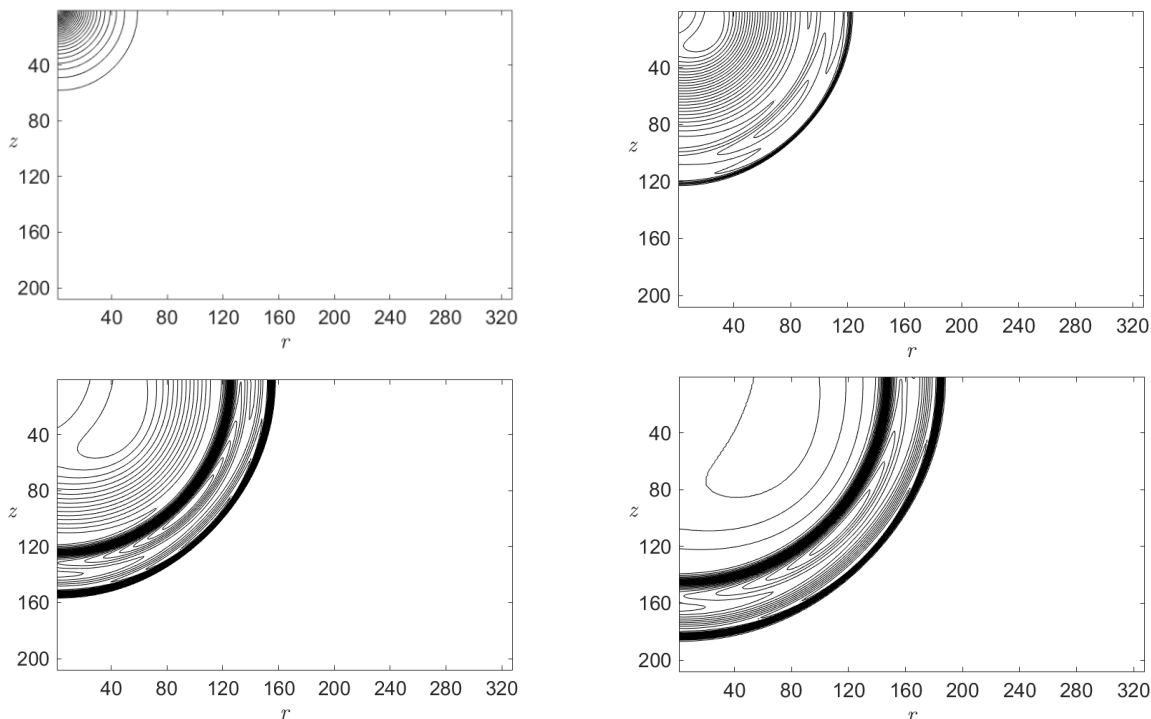


Рис. 2. Изолинии плотности при расширении шара в чистом газе.

Таким образом, введение дробных ячеек позволяет обеспечить сохранение сферической границы в процессе счета.

Выводы

Результаты расчетов распространения сферических ударных волн, приведенные на рис.и2 позволяют сделать следующие выводы:

1. Задание начальных условий на криволинейной границе с помощью дробных ячеек, в которых физические величины распределены пропорционально занятому телом объему, позволяет наиболее точно описывать расчетную область при решении задач газодинамики.
2. Преимуществами данного метода является его простота и возможность использования дробных ячеек только при задании начальных условий, проводя дальнейшие расчеты по формулам для целых ячеек.
3. Данный подход может быть распространен и на математические модели газозвеси с химическими превращениями [7].

Литература

1. Rich, M.A. A method for Eulerian fluid dynamics / M.A. Rich // Los Alamos Scientific Lab. Rept. № LAMS-2826. – 1963.
2. Jentry, R.A. An Eulerian Differencing Method for Unsteady Compressible Flow Problems / R.A. Jentry, R.E. Martin, B.J. Daly // Journal of Computational Physics. – 1966. – Vol. 1, no. 1. – P. 87–118.
3. Отрощенко, И.В. Разностный метод расчета течения газа в канале произвольной формы / И.В. Отрощенко, Р.П. Федоренко // Численные методы механики сплошной среды. – 1974. – № 1. – С. 98–111.
4. Magnus, R. Inviscid transonic flow over airfoil / R. Magnus, H. Yoshihara // AIAA Journal. – 1970. – Vol. 8, no. 12. – P. 2157–2162.
5. Давыдов, Ю.М. Расчет обтекания тел произвольной формы методом «крупных частиц» / Ю.М. Давыдов // Ж. вычисл. матем. и матем. физики. – 1971. – Т. 11, № 4. – С. 1056–1063.
6. Белоцерковский, О.М. Метод крупных частиц в газовой динамике / О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов. – М.: Наука, 1982. – 391 с.
7. Ковалев, Ю.М. Математическая модель газозвеси с химическими превращениями в приближении парных взаимодействий / Ю.М. Ковалев, Е.Е. Пигасов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2014. – Т. 7, № 3. – С. 40–49.

Поступила в редакцию 22 марта 2022 г.

Сведения об авторах

Зарипова Динара Дамировна – аспирант, кафедра «Вычислительная механика», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: zaripovadd@gmail.com

Ковалев Юрий Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра «Вычислительная механика», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: kovalevym@susu.ru

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2022, vol. 14, no. 2, pp. 59–63*

DOI: 10.14529/mmph220206

MODELING OF CURVED SURFACES IN GAS DYNAMICS PROBLEMS

D.D. Zaripova, Yu.M. Kovalev

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: kovalevym@susu.ru

Abstract. In this paper, a method for setting initial conditions on the boundary of an arbitrarily-shaped body on a rectangular grid is presented. A spherical volume of compressed gas, formed as a result of an explosion above the Earth's surface, is chosen as the body under consideration. Since the cells of the computational grid are rectangular and the contour is curvilinear, fractional cells are used to set

the conditions on the boundary. The pressure and density inside the sphere are known and distributed uniformly throughout the volume. The parameters on the boundary are proposed to be calculated in proportion to the volume that the body takes in each cell the contour crosses. Such a volume can be found by integrating over the region cut off by the curve from a rectangular grid cell. The algorithm has been tested on a numerical solution to the problem of the gas sphere expansion by the large-particle method. Since the boundary of the sphere is a contact discontinuity, graphs of the position of density isolines in the process of expansion of the sphere are presented. The calculation results have shown that the described mechanism ensures the preservation of the spherical boundary during the calculation process: the deviation from the values corresponding with the circle equation has equaled less than 1 %.

Keywords: mathematical modeling; gas dynamics; boundary conditions; fractional cells.

References

1. Rich M.A. A Method for Eulerian Fluid Dynamics. *Los Alamos Scientific Lab. Rept. no. LAMS-2826*, 1963.
2. Jentry R.A., Martin R.E., Daly B.J. An Eulerian Differencing Method for Unsteady Compressible Flow Problems. *J. Comput. Phys.*, 1966, Vol. 1, no. 1, pp. 87–118.
3. Otroshchenko, I.V. Raznostnyy metod rascheta techeniya gaza v kanale proizvol'noy formy (Difference method for calculating gas flow in a channel of arbitrary shape). *Chislennyye metody mekhaniki sploshnoy sredy*, 1974, no. 1, pp. 98–111. (in Russ.).
4. Magnus R., Yoshihara H. Inviscid Transonic Flow over Airfoil. *AIAA Journal*, 1970, Vol. 8, no. 12, pp. 2157–2162.
5. Davydov Yu.M. Calculation by the “Coarse Particle” Method of the Flow Past a Body of Arbitrary Shape. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1971, Vol. 11, no. 4, pp. 1056–1063. DOI: 10.1016/0041-5553(71)90026-7
6. Belotserkovskiy O.M., Davydov Yu.M. *Metod krupnykh chastits v gazovoy dinamike* (The Method of Large Particles in Gas Dynamics), Moscow, Nauka Publ., 1982. – 391 p.
7. Kovalev Yu.M., Pigasov E.E. A Mathematical Model of Gas Suspension with Chemical Reactions in the Pair-Interaction Approximation. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2014, Vol. 7, no. 3, pp. 40–49. (in Russ.).

Received March 22, 2022

Information about the authors

Zaripova Dinara Damirovna is Post-graduate Student, Computational Mechanics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: zaripovadd@gmail.com

Kovalev Yuriy Mikhaylovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Computational Mechanics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: kovalevym@susu.ru

AB INITIO MODELLING OF A BILAYER GRAPHENE

M.V. Kaplun, E.V. Anikina, V.P. Beskachko

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: kaplunmv@susu.ru

Abstract. Using the electron density functional theory, numerical modelling of bilayer graphene has been performed. The structure and binding energy of the layers depending on the representation of the wave function of the system have been studied: plane waves (VASP package) and atomic-like orbitals (SIESTA package); and choice of approximation for the exchange-correlation (XC) functional. It has been shown that being in the free form the system creates a stable AB structure of bilayer graphene. The calculation of the layer binding energy has shown that the results of modelling performed with different basis for the wave function are consistent when using XC functionals corresponding to each other and considering the correction to the basis set superposition error in the tight binding method. As expected, the generalized gradient approximation (GGA) has shown underestimated values of the interaction energy of graphene layers. Comparison with experimental data has shown that the energy and geometric characteristics of bilayer graphene are best described by the local electron density approximation (LDA). The 2nd and 3rd generation semi-empirical Grimme corrections for GGA have given estimates of the binding energy higher than LDA, but also close to the experimental results.

Keywords: bilayer graphene; density functional theory; ab initio modelling; binding energy.

Introduction

Bilayer graphene (BLG) is an intermediate structure between graphene and graphite consisting of only two graphene sheets. It has three configurations: a metastable AA structure obtained experimentally [1–3], a stable and well-studied AB structure (Bernal configuration [4]), and twisted bilayer graphene (tBLG), where two graphene layers are rotated by a small relative angle [5]. The latter structure has promising properties and may be of interest for nanoelectronics [6, 7], though it is difficult to obtain experimentally, and its model is too demanding for computer simulation. The intermediate A(B) structure (between AA and AB configurations), which has a bandgap of about 0,35 eV [3], also has possible applications in electronics and nanoelectronics, for example, as a channel for a field-effect transistor [1–3]. To investigate the BLG electronic properties, using the density functional theory, we needed the geometrical models. Therefore, in this research, we obtained the models of different BLG configurations and studied their structural properties and the interlayer binding energies.

Models and simulation details

For calculations, we utilized the SIESTA software package with an atomic-like basis set [8] and the VASP code with a plane wave basis set [9]. In both packages, the periodic boundary conditions were implemented. For exchange-correlation potential, we used local electron density approximation, LDA (Ceperley-Alder functional, CA [10]), and generalized gradients approximation, GGA (Perdew-Burke-Ernzerhof functional, PBE [11]). To take into account the van der Waals interactions, we utilized the Grimme semi-empirical corrections, DFT-D2 [12] and DFT-D3 [13]. For the SIESTA calculations, pseudopotentials were taken from the FHI database [14] and [15], for the VASP simulations, we used the 2012 version of pseudopotentials, with $2s^2 2p^2$ electrons for C as valence.

The simulation cell contained 64 carbon atoms (32 for each graphene layer). The optimized translational parameter was 9,86 Å and 9,79 Å for GGA (GGA+D) and LDA calculations, respectively. We chose the partitioning density of the reciprocal space (*k*-points) and the real space (the MeshCutoff parameter in the SIESTA package and the *Accurate* tag in the VASP code) so that the precision of the

structure's total energy was ~ 1 meV. For VASP, the cutoff energy of plane waves was taken as 600 eV. Simulation parameters are presented in Table 1. For one graphene layer, we performed both spin-polarized and not spin-polarized calculations. However, the difference between the resulting total energies was less than 1 meV. Therefore, the bilayer systems we modeled without spin polarization to save computer resources. The resulting precision of the interlayer binding energy was about 0,3 meV/atom.

Table 1

Simulation parameters		
DFT package	SIESTA	VASP
XC approximations	PBE-GGA, CA-LDA, PBE+D2	PBE-GGA, CA-LDA, PBE+D2, PBE+D3
k -points	$19 \times 19 \times 1$	$9 \times 9 \times 1$
Space partitioning (mesh detailing in the real space): MeshCutoff (SIESTA) / PREC (VASP)	GGA (+D2): 360 Ry; LDA: 230 Ry	Accurate
Total energy convergence criterion	10^{-6} eV	10^{-6} eV
Force convergence criterion	10^{-4} Ry/Bohr	10^{-3} eV/Å
Vacuum layer in the direction perpendicular to graphene, Å	at least 20	at least 20

Basis set optimization

We optimized the localized pseudoatomic orbitals of the carbon atom according to the procedure described in [16]. To minimize the computational time, we simulated the graphene primitive unit cell, which contains only 2 carbon atoms. The cell translation parameter was 2,47 Å, the simulation parameters were the same as in Table 1, except for k -points: in this case, we used a $32 \times 32 \times 1$ set. Since the unit cell is small, instead of the interatomic distance, we checked the system “pressure” which indicates how far the translational parameter of the simulation cell, and hence the distances between carbon atoms, are from optimal.

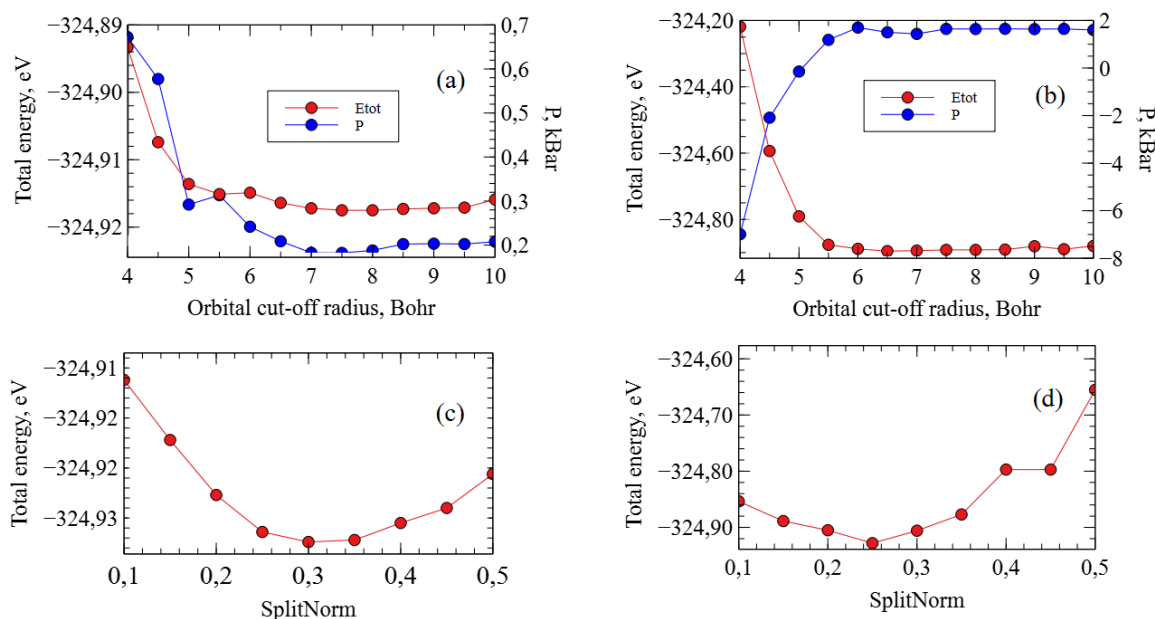


Fig. 1. Optimization of C(2p) and C(2s) orbitals for SIESTA calculations (GGA-PBE). Dependences of the total energy and pressure on the orbital cut-off radius of: (a) C(2s) and (b) C(2p) orbitals; dependence of the system total energy on the parameter SplitNorm for: (c) C(2s) and (d) C(2p) orbital

Figure 1 shows the results of orbital optimization for graphene, simulated with GGA. The used double- ζ basis set could be characterized by two parameters: the orbital cut-off radius, r_{cut} , and the SplitNorm parameter, which specifies the radius of the modified orbital, r_m [8]. The optimal parameters were chosen using the criterion of minimal total energy, while the pressure of the simulation cell was additionally monitored. Fig. 1a indicates that both system total energy and pressure were at approxi-

mately the same level after the C(2s) orbital cut-off radius reached ~ 7 Bohr. Since for a larger r_{cut} more computer resources are needed, we chose $r_{cut} = 7,0$ Bohr as optimal. The dependence of the total energy on the SplitNorm parameter had a pronounced minimum at SplitNorm = 0,30, which was chosen as optimal. The optimal parameters of C(2p) orbital were determined similarly (see Fig. 1, *b, d*). Optimal basis-set parameters are presented in Table 2.

Optimal basis set parameters for C(2p) and C(2s) orbitals, 1 Bohr $\approx 0,529$ Å

Table 2

XC approximation	GGA and GGA+D			LDA		
	Orbital	r_{cut} , Bohr	SplitNorm	r_m , Bohr	r_{cut} , Bohr	SplitNorm
Pseudopotential from [14]						
C(2s)	7,09	0,30	2,95	7,09	0,30	2,95
C(2p)	6,57	0,25	3,18	6,57	0,25	3,18
Pseudopotential from [15]						
C(2s)	6,57	0,25	3,11	7,09	0,30	3,03
C(2p)	7,09	0,25	3,22	6,57	0,25	3,18

Table 2 shows that the optimal parameters in the case of different XC approximations (GGA and LDA) practically coincide and are close for the chosen pseudopotentials.

Geometry optimization of different BLG configurations

After basis-set optimization, we investigated the structure of bilayer graphene using the SIESTA package. We considered starting configurations with various relative displacements in three directions of one graphene layer to another. The interlayer binding energy was calculated as:

$$E_{bind} = E_{2l} - 2E_{1l} - E_{CP}, \quad (1)$$

where E_{2l} and E_{1l} are the total energies of the bilayer system and the isolated layer, respectively, and E_{CP} is the Boys–Bernardi correction to the basis set superposition error [17].

Firstly, we shifted the second layer only along the Z-axis (AA structure, Fig. 2a). We tested different initial shifts (from 1 to 15 Å). Though, at $\Delta z \geq 10$ Å ($\Delta z \geq 5$ Å for PBE-GGA calculations) the layers did not interact: the interlayer distance, d , did not change after geometry optimization, and the interaction energy $E_{bind} = 0$ eV. All other initial structures moved to a stable state with a certain minimum interlayer distance (this distance varied depending on the used XC approximation, see Table 3).

At the next stage, we added a shift along the X-axis. The initial interlayer distance was taken from the stable AA configuration. We considered the initial shifts Δx in the range of 0,2–0,8 Å (with a step of 0,2 Å). After geometry optimization, we got either the A(B) configuration (Fig. 2, *b*) or AB (Fig. 2, *c*). In the case of SIESTA DFT-D2 calculations, we observed only the AB. Finally, when a shift along the Y-axis was added (we considered the same initial shifts Δy as Δx), all starting structures transferred to the AB configuration. The obtained values of the interlayer distances and the interlayer binding energies for SIESTA and VASP calculations are presented in Tables 3 and 4, respectively. The values in parentheses (Table 3) show the results obtained with the pseudopotential from [15].

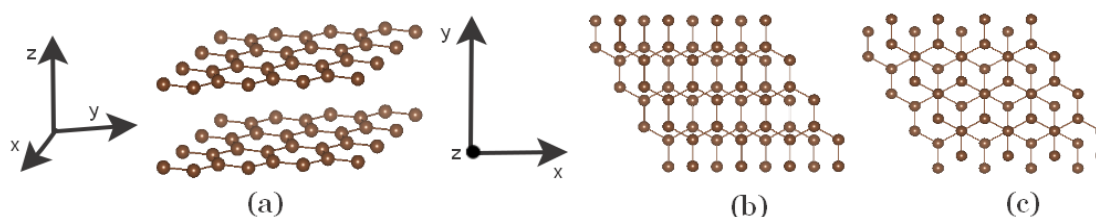


Fig. 2. Atomic structure of the (a) AA system (shift along the Z-axis); (b) A(B) system (shifts along the X- and Z-axes), and (c) AB system (shifts along the X-, Y- and Z-axes)

Table 3 shows that the GGA calculations predict the weak interaction of the layers or even their repulsion. In previous theoretical studies with various dispersion corrections (including quantum Monte Carlo and DMC methods), the BLG interlayer binding energy for the AA-structure was in the range of 10,4–31,1 meV/atom; for the AB-structure – in the range of 17,8–70,0 meV/atom [18]. Experimental values for the graphite interlayer binding energy are also very scattered: 0,21–0,37 J/m² (indirect measurements) and 0,19 J/m² (direct measurements) [19].

Table 3

The interlayer binding energy, E_{bind} , and distance, d , calculated using the SIESTA package

Structure	AA			A(B)			AB		
	PBE	CA	PBE+D2	PBE	CA	PBE+D2	PBE	CA	PBE+D2
$d, \text{Å}$	3,73 (4,02)	3,44 (3,45)	3,38	3,53 (3,55)	3,25 (3,23)	–	3,49 (3,48)	3,23 (3,23)	3,17
$ d - d_{exp} , \text{Å}$	0,18 (0,47)	0,11 (0,10)	0,17	–	–	–	0,14 (0,13)	0,12 (0,12)	0,18
$-E_{bind}, \text{meV/atom}$	-1,8 (-5,7)	19,2 (19,1)	41,6	-1,9 (-2,3)	26,8 (28,3)	–	-1,8 (-3,2)	28,1 (28,3)	54,1
$-E_{bind}, \text{J/m}^2$	-0,01 (-0,03)	0,12 (0,12)	0,25	-0,01 (-0,01)	0,17 (0,18)	–	-0,01 (-0,02)	0,17 (0,17)	0,33

We chose the empirical graphite interlayer binding energy for comparison because the calculated interlayer E_{bind} for graphite and BLG are close [20]. Experimentally obtained BLG interlayer distances are 3,55 Å and 3,35 Å for AA and AB configurations, respectively [1]. Therefore, LDA predictions for both the BLG interlayer binding energy and distance are closer to the experimental data than GGA values, although PBE-D2 binding energies are also close to previously obtained experimental and calculated values. Moreover, the difference in the calculation results obtained for considered pseudopotentials was within the calculation error.

Table 4

The interlayer binding energy, E_{bind} , and distance, d , calculated using the VASP package

Structure	AA				A(B)				AB			
	PBE	CA	D2	D3	PBE	CA	D2	D3	PBE	CA	D2	D3
$d, \text{Å}$	4,50	3,60	3,52	3,71	4,39	3,36	3,29	3,55	4,38	3,32	3,25	3,53
$ d - d_{exp} , \text{Å}$	0,95	0,05	0,03	0,16	–	–	–	–	1,03	0,03	0,10	0,18
$-E_{bind}, \text{meV/atom}$	1,1	14,9	38,7	39,1	1,3	22,9	48,8	43,5	1,3	24,5	50,6	44,1
$-E_{bind}, \text{J/m}^2$	0,01	0,09	0,24	0,24	0,01	0,14	0,30	0,26	0,01	0,15	0,31	0,27

The VASP simulations (Table 4) also show that the optimal approximation for studying bilayer graphene is LDA. DFT-D3 corrections tend to predict weaker interlayer binding and larger interlayer distances than DFT-D2. The used simulation packages gave similar results: the difference in binding energies while using the same XC approximations was only 3–4 meV/atom. We observed the smallest difference in the interlayer distance predictions for LDA and DFT+D2 approximations (it did not exceed 0,16 Å, which corresponds to ~4 % difference). The maximum distance variations were observed for GGA-simulated AB configuration: the VASP results exceeded the SIESTA values by 0,9 Å (which corresponds to more than 25 % difference).

Conclusion

In this work, we obtained the optimized model of bilayer graphene and studied its structural and energetic features using the electron density functional method implemented in the VASP and SIESTA packages. For the SIESTA calculations, we optimized the parameters of localized pseudoatomic orbitals for carbon. After the geometry optimization of BLG, we observed a stable Bernal structure (*AB* configuration) with a minimum total energy and two metastable structures: *AA* and *A(B)* configurations.

The comparison of BLG interlayer binding energies and distances showed that the results obtained by different packages (SIESTA and VASP) were consistent after the simulation parameters optimization (including basis sets) and taking into account the basis set superposition error. Finally, the best agreement with the available experimental data was obtained for the local electron density approximation. Grimme corrections gave the interlayer binding energy close to some experimental results for graphite, too, but its geometrical predictions for the most BLG configurations were less accurate than LDA values. GGA is not suitable for BLG simulation since its application resulted in non-interacting or repulsive layers.

The reported study utilized the supercomputer resources of South Ural State University [21].

References

1. Lee J.-K., Lee S.-Ch., Ahn J.-P., Kima S.-C., Wilson J.I.B., John P. The growth of A graphite on (111) diamond. *The Journal of Chemical Physics*, 2008, Vol. 129, Iss. 23, p. 234709. DOI: 10.1063/1.2975333
2. Liu Z., Suenaga K., Harris P.J.F., Iijima S. Open and Closed Edges of Graphene Layers. *Physical Review Letters*, 2009, Vol. 102, Iss. 1, p. 015501. DOI: 10.1103/physrevlett.102.015501
3. Lee, J.K., Kim, J.-G., Hembram, K., Kim, Y., Min, B.-K., Park, Y., Lee, J.-K., Moon, D., Lee, W., Lee, S.-G., John, P. The Nature of Metastable AA' Graphite: Low Dimensional Nano- and Single-Crystalline Forms. *Scientific Reports*, 2016, Vol. 6, p. 39624. DOI:10.1038/srep39624
4. McCann E., Koshino M. The electronic properties of bilayer graphene. *Reports on Progress in Physics*, 2013, Vol. 76, no. 5, p. 056503 (28pp). DOI: 10.1088/0034-4885/76/5/056503
5. Rozhkov A.V., Sboychakov A.O., Rakhmanov A.L., Franco Nori. Electronic properties of graphene-based bilayer systems. *Physics Reports*, 2016, Vol. 648, pp. 1–104. DOI: 10.1016/j.physrep.2016.07.003
6. Dai S., Xiang Y., Srolovitz D.J. Twisted Bilayer Graphene: Moire with a Twist. *Nano Letters*, 2016, Vol. 16, Iss. 9, pp. 5923–5927. DOI: 10.1021/acs.nanolett.6b02870
7. Havener R.W., Zhuang H., Brown L., Hennig R.G., Park J. Angle-Resolved Raman Imaging of Interlayer Rotations and Interactions in Twisted Bilayer Graphene. *Nano Letters*, 2012, Vol. 12, Iss. 6, pp. 3162–3167. DOI: 10.1021/nl301137k
8. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D., García A., Junquera J., Ordejón P., Sánchez-Portal D. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002, Vol. 14, no. 11, pp. 2745–2779. DOI: 10.1088/0953-8984/14/11/302
9. Kresse G. F.J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, 1996, Vol. 54, Iss. 16, pp. 11169–11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
10. Ceperley D.M., Alder B.J. Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method. *Physical Review Letters*, 1980, Vol. 45, Iss. 7, pp. 566–569. DOI: 10.1103/PhysRevLett.45.566
11. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 1996, Vol. 77, no. 18, pp. 3865–3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.78.1396
12. Grimme S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *Journal of computational chemistry*, 2006, Vol. 27, Iss. 15, pp. 1787–1799. DOI: 10.1002/jcc.20495
13. Grimme S., Antony J., Ehrlich S., Krieg H. A consistent and accurate *ab initio* parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *J. Chem. Phys.*, 2010, Vol. 132, no. 15, p. 154104. DOI: 10.1063/1.3382344
14. Abinit's Fritz-Haber-Institute (FHI) pseudo database. URL: https://departments.icmab.es/leem/SIESTA_MATERIAL/Databases/Pseudopotentials/periodictable-intro.html.

15. P. Rivero, V.M. Garcia-Suarez, D. Pereniguez et al.. Systematic pseudopotentials from reference eigenvalue sets for DFT calculations: Pseudopotential files. *Data in Brief*, 2015, Vol. 3, pp. 21–23. DOI: 10.1016/j.dib.2014.12.005
16. Anikina E.V., Beskachko V.P. Optimizatsiya parametrov bazisnogo nabora dlya modelirovaniya adsorbtsii vodoroda na uglerodnykh metananotrubkakh v pakete SIESTA (Optimization of the parameters of the basic set for modeling hydrogen adsorption on carbon nanotubes in the SIESTA package). *Materialy devyatoy nauchnoy konferentsii aspirantov i doktorantov, Chelyabinsk. 2017* (Proc. Ninth Scientific Conference of Postgraduates and Doctoral Students, Chelyabinsk, 2017), pp. 126–134.
17. Boys S.F., Bernardi F. The calculation of small molecular interactions by the differences of separate total energies. Some procedures with reduced errors. *Molecular Physics*, 1970, Vol. 19, Iss. 4, pp. 553–566. DOI: 10.1080/00268977000101561
18. Mostaani E., Drummond N.D. Fal'ko V.-I. Quantum Monte Carlo calculation of the binding energy of bilayer graphene. *Physical Review Letters*, 2015, Vol. 115, Iss. 11, pp. 115501. DOI: 10.1103/physrevlett.115.115501
19. Liu Z., Liu J.Z., Cheng Y., Li Z., Wang L., Zheng Q. Interlayer binding energy of graphite: a mesoscopic determination from deformation. *Physical Review B*, 2012, Vol. 85, Iss. 20, p. 205418. DOI: 10.1103/physrevb.85.205418
20. Lebègue S., Harl J., Gould T., Ángyán J.G., Kresse G., Dobson J.F. Cohesive properties and asymptotics of the dispersion interaction in graphite by the random phase approximation. *Physical Review Letters*, 2010, Vol. 105, Iss. 19, p. 196401. DOI: 10.1103/physrevlett.105.196401
21. Kostenetskiy P., Semenikhina P. SUSU Supercomputer Resources for Industry and fundamental Science. 2018 Global Smart Industry Conference (GloSIC), 2018, pp. 1–7. DOI: 10.1109/GloSIC.2018.8570068

Received March 22, 2022

Information about the authors

Kaplun Mariya Viktorovna, Assistant, Department of “Physics of Nanoscale Systems”, South Ural State University, Chelyabinsk, e-mail: kaplunmv@susu.ru

Anikina Ekaterina Vladimirovna, Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Department of “Physics of Nanoscale Systems”, South Ural State University, Chelyabinsk, e-mail: anikinaev@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/000-0002-3631-4429>

Beskachko Valeriy Petrovich is Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Senior Researcher of the Department of Scientific and Innovative Activity, Department of “Physics of Nanoscale Systems”, South Ural State University, Chelyabinsk, e-mail: beskachkovp@susu.ru

*Bulletin of the South Ural State University
Series “Mathematics. Mechanics. Physics”
2022, vol. 14, no. 2, pp. 64–71*

УДК 538.9

DOI: 10.14529/mmph220207

ПЕРВОПРИНЦИПНАЯ МОДЕЛЬ ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА

М.В. Каплун, Е.В. Аникина, В.П. Бескачко

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

Аннотация. С помощью метода функционала электронной плотности проведено численное моделирование двухслойного графена. Исследовалась структура и энергия связи слоев в зависимости от представления волновой функции системы: плоские волны (пакет VASP) и атомноподобные орбитали (пакет SIESTA) и выбора приближения для обменно-корреляционного (XC) функционала. Было показано, что в свободной форме система приходит к устойчивой AB-структуре двухслойного графена. Расчет энергии связи слоев показал, что результаты моделирования, выполненного с разным базисом для волновой функции, согласуются при использовании соответствующих друг другу XC-функционалов и учете поправки к ошибке суперпозиции базисного набора в методе сильной связи. Приближение обобщенных градиентов (GGA) ожидаемо дало заниженные значения энергии взаимодействия слоев графена. Сравнение с эксперименталь-

ными данными показало, что лучше всего энергетические и геометрические характеристики двухслойного графена описывает приближение локальной электронной плотности (LDA). Полуэмпирические поправки Гримме 2-го и 3-го поколения для GGA дали оценки энергии связи выше, чем LDA, но тоже близкие к экспериментальным результатам.

Ключевые слова: двухслойный графен; теория функционала плотности; моделирование из первых принципов, энергия связи.

Литература

1. The growth of A graphite on (111) diamond / J.-K. Lee, S.-Ch. Lee *et al.* // The Journal of Chemical Physics. – 2008. – Vol. 129, Iss. 23. – P. 234709
2. Liu, Z. Open and Closed Edges of Graphene Layers / Z. Liu, K. Suenaga, P.J.F. Harris, S. Iijima // Physical Review Letters. – 2009. – Vol. 102, Iss. 1. – P. 015501.
3. The Nature of Metastable AA' Graphite: Low Dimensional Nano- and Single-Crystalline Forms / J.K. Lee, J.-G. Kim, K. Hembam *et al.* // Scientific Reports. – 2016. – Vol. 6. – P. 39624.
4. McCann, E. The electronic properties of bilayer graphene / E. McCann, M. Koshino // Reports on Progress in Physics. – 2013. – Vol. 76, no. 5. – P. 056503
5. Rozhkov A.V., Sboychakov A.O., Rakhmanov A.L., Franco Nori. Electronic properties of graphene-based bilayer systems // Physics Reports. – 2016. – Vol. 648. – P. 1–104.
6. Dai, S. Twisted Bilayer Graphene: Moire with a Twist / S. Dai, Y. Xiang, D.J. Srolovitz // Nano Letters. – 2016. – Vol. 16, Iss. 9. – P. 5923–5927.
7. Angle-Resolved Raman Imaging of Interlayer Rotations and Interactions in Twisted Bilayer Graphene / R.W. Havener, H. Zhuang, L. Brown *et al.* // Nano Letters. – 2012. – Vol. 12, Iss. 6. – P. 3162–3167.
8. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation / J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2002. – Vol. 14, no. 11. – P. 2745–2779.
9. Kresse, G.F.J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G.F.J. Kresse // Physical Review B. – 1996. – Vol. 54, Iss. 16. – P. 11169–11186.
10. Ceperley, D.M. Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method / D.M. Ceperley, B.J. Alder // Physical Review Letters. – 1980. – Vol. 45, Iss. 7. – P. 566–569.
11. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Physical Review Letters. – 1997. – Vol. 78, Iss. 7. – P. 3865–3868.
12. Grimme, S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction / S. Grimme // Journal of computational chemistry. – 2006. – Vol. 27, Iss. 15. – P. 1787–1799.
13. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu / S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, H. Krieg // J. Chem. Phys. – 2010. – Vol. 132, no. 15. – P. 154104.
14. Abinit's Fritz-Haber-Institute (FHI) pseudo database [Электронный ресурс] URL: https://departments.icmab.es/leem/SIESTA_MATERIAL/Databases/Pseudopotentials/periodictable-intro.html (дата обращения: 14.12.2019).
15. Systematic pseudopotentials from reference eigenvalue sets for DFT calculations: Pseudopotential files / P. Rivero, V.M. Garcia-Suarez, D. Pereniguez *et al.* // Data in Brief. – 2015. – Vol. 3. – P. 21–23.
16. Аникина, Е.В. Оптимизация параметров базисного набора для моделирования адсорбции водорода на углеродных метананотрубках в пакете SIESTA / Е.В. Аникина, В.П. Бескачко // Материалы девятой научной конференции аспирантов и докторантов. – Челябинск, 2017. – P. 126–134.
17. Boys, S.F. The calculation of small molecular interactions by the differences of separate total energies. Some procedures with reduced errors. / S.F. Boys, F. Bernardi // Molecular Physics. – 1970. – Vol. 19, Iss. 4. – P. 553–566.
18. Mostaani, E. Quantum Monte Carlo calculation of the binding energy of bilayer graphene / E. Mostaani, N.D. Drummond, V.-I. Fal'ko // Physical Review Letters. – 2015. – Vol. 115, Iss. 11. – P. 115501.

19. Interlayer binding energy of graphite: a mesoscopic determination from deformation / Z. Liu, J.Z. Liu, Y. Cheng *et al.* // Physical Review B. – 2012. – Vol. 85, Iss. 20. – P. 205418.

20. Cohesive properties and asymptotics of the dispersion interaction in graphite by the random phase approximation / S. Lebegue, J. Harl, T. Gould *et al.* // Physical Review Letters. – 2010. – Vol. 105, Iss. 19. – P. 196401.

21. Kostenetskiy, P. SUSU Supercomputer Resources for Industry and fundamental Science / P. Kostenetskiy, P. Semenikhina // Proc. 2018 Global Smart Industry Conference (GloSIC). SUSU Supercomputer Resources for Industry and fundamental, Chelyabinsk, 2018. – P. 1–7.

Поступила в редакцию 22 марта 2022 г.

Сведения об авторах

Каплун Мария Викторовна – ассистент, кафедра физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия, e-mail: kaplunmv@susu.ru

Аникина Екатерина Владимировна – кандидат физико-математических наук, кафедра физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия, e-mail: anikinaev@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/000-0002-3631-4429>

Бескачко Валерий Петрович – доктор физико-математических наук, профессор, старший научный сотрудник управления научной и инновационной деятельности, кафедра «Физика наноразмерных систем», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, e-mail: beskachkovp@susu.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗОГРЕВА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Ю.М. Ковалев, Е.В. Помыкалов, О.А. Шершнева

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

Аннотация. Анализ известных приближений для описания зависимости теплоемкости при постоянном объеме энергетических материалов (молекулярные кристаллы) от температуры кристалла показал, что существуют надежные аппроксимации зависимости теплоемкости при постоянном объеме, не требующие проведения сложных квантово-механических расчетов для определения частот нормальных колебаний как межмолекулярных, так и внутри молекулы. Для получения зависимости тепловой части внутренней энергии молекулярного кристалла, которая отвечает за разогрев материала, от температуры требуется проинтегрировать по температуре выражение теплоемкости при постоянном объеме. В данной работе были проведены расчеты зависимости тепловой части внутренней энергии молекулярного кристалла для случая, когда она вычисляется через частоты нормальных колебаний, и случая, когда она вычисляется путем интегрирования теплоемкости при постоянном объеме по температуре при помощи аппроксимационных формул. При решении спектральной задачи по определению частот нормальных колебаний внутри молекулы были использованы квантово-химические методы РМ-3 и DFT. В работе представлены зависимости тепловой части внутренней энергии молекулярных кристаллов от температуры, рассчитанные для разных способов определения, и проведен сравнительный анализ, который показал, что различие составляет менее 1 %.

Ключевые слова: уравнение состояния; молекулярный кристалл; энергия Гельмгольца; постоянная Планка; постоянная Больцмана; приближение Дебая; приближение Эйнштейна.

Введение

Несмотря на прогресс в развитии современной вычислительной техники, проблема построения уравнений состояния, обладающих высокой точностью, для описания поведения энергетических материалов при ударно-волновом нагружении продолжает оставаться актуальной [1, 2]. В настоящее время активно развиваются квантово-механические методы расчета уравнений состояния [3, 4], молекулярно-динамическое моделирование [5–8], математические модели построения полуэмпирических уравнений состояния [9].

Все разработанные математические модели построения полуэмпирических уравнений состояния, опирающиеся на результаты динамических экспериментов, основаны на возможности разделения давления и внутренней энергии на «тепловые» и «холодные» составляющие с последующим введением функциональных зависимостей тепловых факторов от удельного объема и температуры, основанных на теоретических представлениях. Критерием достоверности построенных полуэмпирических уравнений состояния является совпадение теоретических расчетов и результатов эксперимента.

Процессы, протекающие при воздействии ударных волн на энергетические материалы, представляют большой как практический, так и теоретический интерес и являются объектом многочисленных исследований [10]. В данных исследованиях одной из актуальных проблем является проблема ударно-волнового разогрева энергетического материала. В силу того, что кинетика ударно-волнового инициирования детонации конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) существенным образом зависит от температуры, возникающей после прохождения ударной волны, разработка математических моделей уравнений состояния для определения температур ударно-волнового сжатия в задачах инициирования детонации становится особенно актуальной.

Целью настоящего исследования является построение математических моделей, позволяющих описывать тепловую часть уравнений состояния молекулярных кристаллов.

Уравнения состояния молекулярных кристаллов

Термодинамические свойства вещества полностью определяются, если известен один из термодинамических потенциалов. В работах [11, 12] было показано, что выражение свободной энергии Гельмгольца позволяет получить уравнения молекулярных кристаллов в виде:

$$P = \frac{MRT\gamma_D(V)}{V}(D(x_D)) + P_X, \quad P_X = -\frac{\partial U_C}{\partial V} - \frac{\partial U_M}{\partial V} + \frac{3}{8}MRT\gamma_D(V)x_D/V \quad (1)$$

$$E = U_C + U_M + E_0 + MRTD(x_D) + RT \sum_{i=M+1}^{3N} \frac{x_i}{\exp(x_i) - 1} : \quad (2)$$

$$C_V = C_{VD} + C_{VM} = MR \left(4D(x_D) - \frac{3x_D}{\exp(x_D) - 1} \right) + R \sum_{i=M+1}^{3N} \frac{x_i^2 \exp(x_i)}{(\exp(x_i) - 1)^2}. \quad (3)$$

Здесь R , M , N , $3N - M$, θ_D , θ_i – универсальная газовая постоянная, поделенная на молекулярную массу вещества μ , число низкочастотных колебаний, число атомов в молекуле, число высокочастотных колебаний, характеристическая температура Дебая, характеристические температуры высокочастотных колебаний. U_C – межмолекулярная (упругая) энергия, которая определяет энергию невалентных взаимодействий атомов между молекулами. Упругая энергия U_C зависит от геометрии молекулярного кристалла, т. е. от пространственного расположения молекул и объема элементарной ячейки. Внутримолекулярная энергия U_M является энергией образования молекулы и зависит исключительно от ее структуры. C_{VD} – составляющая теплоемкости при постоянном объеме, зависящая от низкочастотных колебаний молекулы и определяемая в приближении Дебая, а C_{VM} – составляющая теплоемкости при постоянном объеме, зависящая от внутримолекулярных (высокочастотных) колебаний. Часть теплоемкости C_{VM} называют внутримолекулярной. Коэффициент $\gamma_D(V)$ – коэффициент Грюнайзена (*Gruneisen*), который определяется выражением вида

$$\gamma_D(V) = -\frac{d(\ln \theta_D)}{d(\ln V)}.$$

Функция $D(x)$ – функция Дебая, имеющая следующий вид:

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \xi^3 \frac{d\xi}{\exp(\xi) - 1}.$$

Энергия нулевых колебаний E_0 определяется следующим выражением:

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} h\omega_{\alpha} = \frac{3}{8}MR\theta_D(V) + \frac{1}{2}R \sum_{i=M+1}^{3N} \theta_i.$$

Подробное изложение подходов к определению количества низкочастотных колебаний M приведено в работах [11, 12].

В работе [13] были проведены расчеты зависимости теплоемкости при постоянном объеме для ряда кристаллов нитросоединений по формуле (3) с начальными данными, приведенными в табл. 1. Силовые постоянные для расчета спектров нормальных колебаний внутри молекулы были определены с помощью квантово-химических методов PM-3 и DFT, подробно описанных в работах [14, 15]. Для обеспечения достоверности получаемых в расчетах внутримолекулярных колебательных спектров конформации молекул определялись из данных рентгеноструктурного анализа соответствующих молекулярных кристаллов. ИК – спектры для гексогена, тротила, тетрила, ТАТБ и ТЭНа хорошо согласуются с известными экспериментальными данными [16] и приведены в работе [13].

В результате проведенных расчетов теплоемкости при постоянном объеме в работах [13, 17] было показано, что зависимость теплоемкости при постоянном объеме от температуры может быть описана аппроксимационным выражением типа:

$$C_V = C_{VH} - (C_{VH} - C_V^0) \exp[-(T - T_0)/T_C], \quad (4)$$

где T_C – параметр, который находится в достаточно узком диапазоне значений 555–570 К (см. табл. 1).

Для математического моделирования тепловой части уравнений состояния энергетических материалов выделим ту его часть, которая определяет разогрев:

$$E_{T1} = E_0 + MRTD(x_D) + RT \sum_{i=M+1}^{3N} \frac{x_i}{\exp(x_i) - 1}, \quad x_i = \theta_i / T, \quad x_D = \theta_D / T. \quad (5)$$

Таблица 1

Параметры	Тепловые параметры для уравнения состояния кристалла			
	Название соединения			
	Гексоген	ТЭН	ТАТБ	Тротил
μ , кг/кмоль	222,13	316,50	258,18	227,13
ρ_0 , кг/м ³	1806,0	1778,0	1937,0	1653,0
C_{VH} , кДж/кг·К	2,3581	2,2880	2,3187	2,0866
C_V^0 , кДж/кг·К	1,0533	1,0105	0,9995	1,1222
T_0 , К	298,0	293,0	293,0	293,0
T_C , К	555,0	565,0	560,0	570,0
$\alpha \cdot 10^{-3}$, К ⁻¹	0,1927	0,2300	0,0995	0,0516
M	12	16	12	11
N	21	29	24	21

С другой стороны выражение для тепловой части уравнений состояния энергетических материалов может быть получено путем интегрирования по температуре выражения для теплоемкости при постоянном объеме (4). Проинтегрировав по температуре выражение (4), получим

$$E_{T2} = C_{VH}T + T_C \cdot (C_{VY} - C_V^0) \exp(-(T - T_0)/T_C) + E_{T2}^0. \quad (6)$$

Величина E_{T2}^0 определяется из условия совпадения значений тепловой энергии, вычисленных по формулам (5) и (6), при начальной температуре, определенной табл. 1.

В табл. 2–5 приведены зависимости тепловой энергии от температуры, вычисленные по формулам (5) и (6), в диапазоне значений 293–993 К для гексогена, ТАТБ, ТЭНа, тротила.

Таблица 2

Зависимость от температуры тепловых составляющих внутренней энергии гексогена					
T	E_{T1}	E_{T2}	T	E_{T1}	E_{T2}
298	1777,79	1423,59	658	2282,79	1927,52
318	1799,40	1445,18	678	2316,37	1961,29
338	1821,94	1467,67	698	2350,36	1995,54
358	1845,39	1491,04	718	2384,77	2030,24
378	1869,71	1515,24	738	2419,56	2065,39
398	1894,85	1540,26	758	2454,72	2100,95
418	1920,80	1566,06	778	2490,24	2136,92
438	1947,51	1592,61	798	2526,10	2173,30
458	1974,95	1619,89	818	2562,30	2210,05
478	2003,08	1647,88	838	2598,81	2247,17
498	2031,87	1676,54	858	2635,62	2284,64
518	2061,30	1705,86	878	2672,73	2322,46
538	2091,33	1735,80	898	2710,12	2360,60
558	2121,94	1766,35	918	2747,79	2399,06
578	2153,11	1797,49	938	2785,71	2437,83
598	2184,79	1829,20	958	2823,89	2476,90
618	2216,99	1861,45	978	2862,31	2516,25
638	2249,66	1894,23	998	2900,97	2555,87

Таблица 3

Зависимость от температуры тепловых составляющих внутренней энергии ТАТБ

T	E_{T1}	E_{T2}	T	E_{T1}	E_{T2}
293	1722,46	1418,69	653	2220,21	1902,68
313	1742,97	1439,12	673	2253,71	1935,41
333	1764,54	1460,45	693	2287,64	1968,62
353	1787,15	1482,67	713	2321,97	2002,29
373	1810,73	1505,73	733	2356,68	2036,40
393	1835,24	1529,61	753	2391,76	2070,95
413	1860,64	1554,28	773	2427,18	2105,90
433	1886,89	1579,712	793	2462,93	2141,26
453	1913,94	1605,88	813	2499,00	2177,01
473	1941,75	1632,75	833	2535,37	2213,13
493	1970,28	1660,31	853	2572,04	2249,60
513	1999,49	1688,53	873	2608,98	2286,43
533	2029,34	1717,38	893	2646,18	2323,59
553	2059,81	1746,85	913	2683,64	2361,07
573	2090,85	1776,91	933	2721,35	2398,87
593	2122,44	1807,55	953	2759,30	2436,96
613	2154,54	1838,73	973	2797,47	2475,35
633	2187,14	1870,45	993	2835,85	2514,01

Таблица 4

Зависимость от температуры тепловых составляющих внутренней энергии ТЭНа

T	E_{T1}	E_{T2}	T	E_{T1}	E_{T2}
293	1728,34	1387,16	653	2217,23	1873,13
313	1749,19	1407,99	673	2249,85	1905,71
333	1770,93	1429,69	693	2282,88	1938,75
353	1793,53	1452,23	713	2316,31	1972,24
373	1816,98	1475,58	733	2350,12	2006,14
393	1841,25	1499,70	753	2384,29	2040,46
413	1866,30	1524,58	773	2418,81	2075,18
433	1892,10	1550,18	793	2453,66	2110,29
453	1918,63	1576,49	813	2488,83	2145,76
473	1945,85	1603,47	833	2524,30	2181,59
493	1973,73	1631,11	853	2560,07	2217,77
513	2002,25	1659,37	873	2596,12	2254,28
533	2031,36	1688,25	893	2632,44	2291,11
553	2061,05	1717,71	913	2669,026	2328,25
573	2091,29	1747,74	933	2705,86	2365,69
593	2122,05	1778,31	953	2742,93	2403,43
613	2153,31	1809,41	973	2780,24	2441,44
633	2185,04	1841,03	993	2817,77	2479,72

В результате проведенных расчетов были получены значения энергии нулевых колебаний для тротила, ТЭНа, ТАТБ и гексогена 1604,50; 1544,86; 1561,22; 1594,77 Дж/кг и значения E_{T2}^0 – 360,80, 344,10, 317,53, 355,27 Дж/кг, соответственно.

В табл. 6 приведены зависимости тепловой составляющей внутренней энергии от температуры, рассчитанные по уравнениям (5) и (6).

Анализ результатов расчета тепловой составляющей внутренней энергии, представленных энергетических материалов показывает, что максимальное различие расчетов, выполненных по выражениям (5) и (6), составляет менее 1%.

Таблица 5

Зависимость от температуры тепловых составляющих внутренней энергии тротила

T	E_{T1}	E_{T2}	T	E_{T1}	E_{T2}
293	1786,02	1421,21	653	2262,97	1902,17
313	1806,40	1441,61	673	2294,98	1934,61
333	1827,63	1462,91	693	2327,43	1967,53
353	1849,68	1485,06	713	2360,30	2000,90
373	1872,52	1508,04	733	2393,57	2034,71
393	1896,15	1531,81	753	2427,23	2068,95
413	1920,53	1556,36	773	2461,27	2103,59
433	1945,63	1581,64	793	2495,67	2138,63
453	1971,44	1607,65	813	2530,41	2174,06
473	1997,93	1634,35	833	2565,49	2209,85
493	2025,07	1661,72	853	2600,89	2245,99
513	2052,85	1689,74	873	2636,59	2282,49
533	2081,23	1718,37	893	2672,59	2319,31
553	2110,19	1747,62	913	2708,88	2356,45
573	2139,71	1777,44	933	2745,43	2393,91
593	2169,77	1807,83	953	2782,26	2431,66
613	2200,35	1838,76	973	2819,34	2469,70
633	2231,42	1870,21	993	2856,66	2508,02

Таблица 6

Зависимость тепловой составляющей внутренней энергии от температуры

T	Гексоген		ТЭН		ТАТБ		Тротил	
	E_{T1}	E_{T2}	1	2	1	2	1	2
293	1777,79	1777,79	1728,34	1728,34	1722,46	1722,46	1786,02	1786,02
333	1821,94	1821,87	1770,92	1770,88	1764,54	1764,22	1827,62	1827,72
373	1869,70	1869,44	1816,98	1816,76	1810,72	1809,50	1872,52	1872,85
413	1920,80	1920,05	1866,29	1865,76	1860,64	1858,05	1920,52	1921,17
453	1974,94	1974,09	1918,63	1918,67	1913,94	1909,64	1971,44	1972,47
493	2031,87	2030,73	1973,73	1973,29	1970,28	1964,07	2025,07	2026,53
533	2091,33	2090,00	2031,36	2029,43	2029,34	2021,15	2081,22	2083,19
573	2153,10	2151,69	2091,28	2088,92	2090,84	2080,38	2139,71	2142,6
613	2216,98	2215,65	2153,30	2150,60	2154,54	2142,50	2200,34	2203,57
653	2282,79	2281,71	2217,22	2214,32	2220,20	2206,45	2262,97	2266,98
693	2350,36	2349,73	2282,88	2279,94	2287,64	2272,38	2327,42	2332,34
733	2419,55	2419,58	2350,12	2347,33	2356,68	2340,17	2393,57	2399,53
773	2490,23	2491,12	2418,80	2416,47	2427,17	2409,67	2461,27	2468,41
813	2562,29	2564,25	2488,82	2488,94	2499,00	2480,77	2530,41	2538,87
853	2635,62	2638,84	2560,07	2558,95	2572,03	2553,37	2600,88	2610,81
893	2710,12	2714,80	2632,44	2632,29	2646,18	2627,35	2672,59	2684,12
933	2785,71	2792,03	2705,85	2706,88	2721,35	2702,63	2745,43	2758,72
973	2862,31	2870,44	2780,23	2782,62	2797,46	2779,11	2819,33	2834,51
993	2900,96	2910,06	2817,77	2820,90	2835,85	2817,78	2856,66	2872,83

Данный факт позволяет при исследовании ударно-волновых процессов в энергетических материалах применять для расчетов тепловой составляющей внутренней энергии приближенную аппроксимацию (6) без потери точности при расчетах температуры ударного сжатия и кинетики фазовых и химических превращений.

Литература

1. Сон, Э.Е. Современные исследования теплофизических свойств веществ (на основе последних публикаций в ТВТ) (Обзор)/ Э.Е. Сон // Теплофизика высоких температур. – 2013. – Т. 51, № 3. – С. 392–411.

2. Исследования теплофизических свойств веществ и материалов в Новосибирском научном центре СО РАН в 2002–2012 годах / С.В. Станкус, Р.А. Хайрулин, В.Г. Мартынец, П.П. Безверхий // Теплофизика высоких температур. – 2013. – Т. 51, № 5. – С. 769–786. DOI: 10.7868/S0040364413050207

3. Hydrostatic and uniaxial compression studies of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene using density functional theory with van der Waals correction / M.M. Budzevich, A.C. Landerville, M.W. Conroy *et al.* // J. Appl. Phys. – 2010. – Vol. 107, Iss. 11. – p. 113524.

4. Rykounov, A.A. Investigation of the pressure dependent thermodynamic and elastic properties of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene using dispersion corrected density functional theory / A.A. Rykounov // J. Appl. Phys. – 2015. – Vol. 117, Iss. 21. – P. 215901.

5. A molecular dynamics simulation study of crystalline 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene as a function of pressure and temperature / D. Bedrov, O. Borodin, G.D. Smith *et al.* // J. Chem. Phys. – 2009. – Vol. 131, Iss. 22. – p. 224703.

6. Andersen, H.C. Molecular Dynamics Simulations at Constant Pressure and/or Temperature / H.C. Andersen // J. Phys. Chem. – 1980. – Vol. 72, Iss.4. – p. 2384.

7. Parrinello, M. Polymorphic Transitions in Single Crystals: A New Molecular Dynamics Method / M. Parrinello, A. Rahman // J. Appl. Phys. – 1981. – Vol. 52, Iss. 12. – P. 7182. DOI: 10.1063/1.328693

8. Wei, Y.S. Equations of State for the Calculation of Fluid-Phase Equilibria / Y.S. Wei, R.J. Sadus // J. Am. Inst. Chem. Eng. – 2000. – Vol. 46, Iss. 1. – P. 169–196. DOI: 10.1002/aic.690460119

9. Хищенко, К.В. Исследование уравнений состояния материалов при высокой концентрации энергии / К.В. Хищенко, В.Е. Фортов. // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. – 2014. – Т. IV, № 1. – С. 6–16.

10. Канель, Г.И. Ударно-волновые явления в конденсированных средах / Г.И. Канель, С.В. Разоренов, А.В. Уткин, В.Е. Фортов. – М.: «Янус-К», 1996. – 407 с.

11. Ковалев, Ю.М. Определение температурной зависимости изобарического коэффициента объемного расширения для некоторых молекулярных кристаллов нитросоединений / Ю.М. Ковалев // Инженерно-физический журнал. – 2018. – Т. 91, № 6. – С. 1653–1663.

12. Ковалев, Ю.М. Уравнения состояния для описания изотермического сжатия некоторых молекулярных кристаллов нитросоединений / Ю.М. Ковалев // Инженерно-физический журнал. – 2020. – Т. 93, № 1. – С. 229–239.

13. Ковалев, Ю.М. Определение температурной зависимости теплоемкости для некоторых молекулярных кристаллов нитросоединений / Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Инженерно-физический журнал. – 2018. – Т. 91, № 2. – С. 297–306.

14. Кларк, Т. Компьютерная химия. – М.: Мир, 1990. – 381 с.

15. Степанов, Н.Ф. Квантовая химия сегодня / Н.Ф. Степанов, Ю.В. Новаковская. // Рос. хим. журнал. – 2007. – Т. LI, № 5. – С. 5–17.

16. Gibbs, T.R. Last Explosive Property Data. Los Alamos Series on Dynamic Material Properties / T.R. Gibbs, A. Popolato. – Berkeley, Los Angeles, London: University of California Press, 1980.

17. Щетинин, В.Г. Расчет теплоемкости органических веществ в ударных и детонационных волнах / В.Г. Щетинин // Химическая физика. – 1999. – Т. 18, № 5. – С. 90–95.

Поступила в редакцию 30 марта 2022 г.

Сведения об авторах

Ковалев Юрий Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра «Вычислительная механика», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: kovalevym@susu.ru

Помыкалов Евгений Валерьевич – аспирант, кафедра «Вычислительная механика», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: boxcutter245@mail.ru

Шершнева Ольга Алексеевна – аспирант, кафедра «Вычислительная механика», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: ostrovaoa@list.ru

MODELING OF HEATING OF ENERGY MATERIALS

Yu.M. Kovalev, E.V. Pomykalov, O.A. Shershneva
South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: kovalevym@susu.ru

Abstract. An analysis of the known approximations for describing the dependence of the heat capacity at a constant volume of energetic materials (molecular crystals) on the crystal temperature has shown that there are reliable approximations of the dependence of the heat capacity at a constant volume that do not require complex quantum mechanical calculations to determine the frequencies of normal vibrations, both intermolecular and inside the molecule. To obtain the dependence of the thermal part of the internal energy of a molecular crystal, which is responsible for heating the material, it is required to integrate the heat capacity expression at constant volume over temperature. In this work, calculations have been made for the dependence of the thermal part of the internal energy of a molecular crystal in case when it is calculated through the frequencies of normal vibrations, and in case when it is calculated by integrating the heat capacity at a constant volume with respect to temperature using approximation formulas. When solving the spectral problem of determining the frequencies of normal vibrations within the molecule, the PM3 and DFT quantum chemical methods have been used. The paper presents the dependences of the thermal part of the internal energy of molecular crystals on temperature, calculated for different methods of determination, and a comparative analysis, which has shown that the difference has equaled less than 1 %.

Keywords: equation of state; molecular crystal; Helmholtz energy; Planck constant; Boltzmann constant; Debye approximation; Einstein approximation.

References

1. Son E.E. Current investigations of thermophysical properties of substances (based on recent publications in the journal *High Temperature*). *High Temperature*, 2013, Vol. 51, no. 3, p. 351–368. DOI: 10.1134/S0018151X1303005X
2. Stankus S.V., Khairulin R.A., Martynets V.G., Bezverkhii P.P. Studies of the thermophysical properties of substances and materials at the Novosibirsk scientific center of the Siberian branch of the Russian academy of sciences, 2002–2012. *High Temperature*, 2013, Vol. 51, no. 5, pp. 695–711. DOI: 10.7868/S0040364413050207
3. Budzevich M.M., Landerville A.C., Conroy M.W., Lin Y., Oleynik I.I., White C.T. Hydrostatic and uniaxial compression studies of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene using density functional theory with van der Waals correction. *J. Appl. Phys.*, 2010, Vol. 107, Iss. 11, p. 113524. DOI: 10.1063/1.3361407
4. Rykounov A.A. Investigation of the pressure dependent thermodynamic and elastic properties of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene using dispersion corrected density functional theory. *J. Appl. Phys.*, 2015, Vol. 117, Iss. 21, p. 215901. DOI: 10.1063/1.4921815
5. Bedrov D., Borodin O., Smith G.D., Sewell T.D., Dattelbaum D.M., Stevens L.L. A molecular dynamics simulation study of crystalline 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene as a function of pressure and temperature. *J. Chem. Phys.*, 2009, Vol. 131, Iss. 22, p. 224703. DOI: 10.1063/1.3264972
6. Andersen H.C. Molecular Dynamics Simulations at Constant Pressure and/or Temperature. *J. Phys. Chem.*, 1980, Vol. 72, Iss. 4, p. 2384. DOI: 10.1063/1.439486
7. Prinello M., Rahman A. Polymorphic Transitions in Single Crystals: A New Molecular Dynamics Method. *J. Appl. Phys.*, 1981, Vol. 52, Iss. 12, p. 7182. DOI: 10.1063/1.328693
8. Li Y.S., Sadus R.J. Equations of State for the Calculation of Fluid-Phase Equilibria. *J. Am. Inst. Chem. Eng.*, 2000, Vol. 46, Iss. 1, p. 169–196. DOI: 10.1002/aic.690460119

9. Khishchenko K.V., Fortov V.E. Investigation of Equations of State of Materials at High Concentration of Energy. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*, 2014, Vol. IV, no. 1, pp. 6–16. (In Russ.).

10. Kanel' G.I., Razorenov S.V., Utkin A.V., Fortov V.E. *Udarno-volnovye yavleniya v kondensirovannykh sredakh* (Shock-Wave Phenomena in Condensed Media). Moscow, Yanus-K Publ., 1996, p. 407. (In Russ.).

11. Kovalev Y.M. Determination of the temperature dependence of the isobaric volumetric expansion coefficient for certain molecular crystals of nitro compounds. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2018, Vol. 91, no. 6, pp. 1573–1582. DOI: 10.1007/s10891-018-1895-8

12. Kovalev Y.M. Equations of state to describe isothermal compression of certain molecular nitro compound crystals. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2020, Vol. 93, no. 1. pp. 223–233. DOI: 10.1007/s10891-020-02112-9

13. Kovalev Y.M., Kuropatenko V.F. Determination of the temperature dependence of heat capacity for some molecular crystals of nitro compounds. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2018, Vol. 91, no. 2, pp. 278–287. DOI: 10.1007/s10891-018-1747-6

14. Klark, T. *Komp'yuternaya khimiya* (Computer chemistry). Moscow, Mir Publ., 1990, 381 p. (in Russ.).

15. Stepanov N.F., Novakovskaya Yu.V. Kvantovaya khimiya segodnya (Quantum Chemistry Today). *Ros. Khim. Zhurnal*, 2007, Vol. LI, no. 5, pp. 5–17. (in Russ.).

16. Gibbs T.R., Popolato A. *Last explosive property data. Los Alamos series on dynamic material properties*. Berkeley, Los Angeles, London, University of California Press, 1980.

17. Shchetinin V.G. Calculation of the heat capacity of organic substances in shock and detonation waves (Raschet teploemkosti organicheskikh veshchestv v udarnykh i detonatsionnykh volnakh). *Khimicheskaya fizika*, 1999, Vol. 18, no. 5, pp. 90–95. (in Russ.).

Received March 30, 2022

Information about the authors

Kovalev Yuriy Mikhaylovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Computational Mechanics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: kovalevym@susu.ru

Pomykalov Evgenii Valerievich is Post-graduate Student, Computational Mechanics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: boxcutter245@mail.ru

Shershneva Olga is Post-graduate Student, Computational Mechanics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: ostrovaoa@list.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 редколлегию предоставляется электронная (документ MS Word 2003) версия работы объемом не более 6 страниц, экспертное заключение о возможности опубликования работы в открытой печати, сведения об авторах (Ф.И.О., место работы, звание и должность для всех авторов работы), контактная информация ответственного за подготовку рукописи.

3. Структура статьи: УДК, название (не более 12–15 слов), список авторов, аннотация (150–250 слов), список ключевых слов, текст работы, литература (в порядке цитирования, в скобках, если это возможно, дается ссылка на оригинал переводной книги или статьи из журнала, переводящегося на английский язык). После текста работы следует название, расширенная аннотация (реферат статьи) объемом до 1800 знаков с пробелами, список ключевых слов и сведения об авторах на английском языке.

4. Параметры набора. Поля: зеркальные, верхнее – 23, нижнее – 23, внутри – 22, снаружи – 25 мм. Шрифт – Times New Roman 11 pt, масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 пт, межстрочный интервал – одинарный.

5. Формулы. Стиль математический (цифры, функции и текст – прямой шрифт, переменные – курсив), основной шрифт – Times New Roman 11 pt, показатели степени 71 % и 58 %. Выключенные формулы должны быть выровнены по центру.

6. Рисунки все черно-белые. Желательно предоставить рисунки и в виде отдельных файлов.

7. Адрес редакционной коллегии журнала «Вестник ЮУрГУ» серии «Математика. Механика. Физика»:

Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, факультет математики, механики и компьютерных технологий, кафедра математического и компьютерного моделирования, главному редактору профессору Загребиной Софье Александровне. [Prof. Zagrebina Sophiya Aleksandrovna, Mathematical and Computer Modeling Department, SUSU, 76, Lenin prospekt, Chelyabinsk, Russia, 454080].

8. Адрес электронной почты: mmph@susu.ru

9. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта журнала: см. <http://vestnik.susu.ru/mmph>.

10. Журнал распространяется по подписке. Электронная версия: см. www.elibrary.ru, <http://vestnik.susu.ru/mmph>, <http://вестник.юургу.рф/mmph>.

11. Плата с аспирантов за публикацию не взимается.

СВЕДЕНИЯ О ЖУРНАЛЕ

Журнал основан в 2009 году. Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-57362 выдано 24 марта 2014 г. Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

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

Главный редактор журнала – д.ф.-м.н., проф. С.А. Загребина.

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук» по следующим научным специальностям и соответствующим им отраслям науки: 01.01.01 – Вещественный, комплексный и функциональный анализ (физико-математические науки), 01.01.02 – Дифференциальные уравнения, динамические системы и оптимальное управление (физико-математические науки), 01.01.07 – Вычислительная математика (физико-математические науки), 01.01.09 – Дискретная математика и математическая кибернетика (физико-математические науки), 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы (физико-математические науки), 01.04.05 – Оптика (физико-математические науки), 01.04.07 – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

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

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

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

Периодичность выхода – 4 номера в год.

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

ВЕСТНИК
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
Серия
«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»
Том 14, № 2
2022

16+

Редактор *С.И. Уварова*
Техн. редактор *А.В. Миних*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 29.04.2022. Дата выхода в свет 06.05.2022.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 9,76.

Тираж 500 экз. Заказ 102/144. Цена свободная.

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