

ВЕСТНИК



**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

**2023
Т. 15, № 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 **Гуидетти Д.** (Болонский университет, г. Болонья, Италия)
д.ф.-м.н., профессор **Жуковский В.И.** (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва)
к.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Заляпин И.В.** (Университет Невады, г. Рино, США)
д.ф.-м.н., профессор **Зелик С.В.** (Университет Суррея, г. Гилфорд, Великобритания)
д.ф.-м.н., профессор **Короткий А.И.** (Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, г. Екатеринбург)
Ph. D., профессор **Ким Джейван** (Корейский институт передовых исследований KIAS, г. Сеул, Южная Корея)
Ph. D., профессор **Ким Кишик** (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

2023

Vol. 15, 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

- БОЗИЕВ О.Л. Априорные оценки производных решений одномерных неоднородных уравнений теплопроводности с интегральной нагрузкой в главной части..... 5
- PEREVOZCHIKOVA K.V. The Analysis and Processing of Information for One Stochastic System of The Sobolev Type..... 14
- САГАДЕЕВА М.А., ШАФРАНОВ Д.Е. Пространства дифференциальных форм со стохастическими комплекснозначными коэффициентами..... 21
- ФИЛАТОВ В.В. Массивные множества, порождённые полулинейными эллиптическими операторами на некомпактных римановых многообразиях 26

Механика

- ЖАРЫЛКАНОВА М.С., КЛИНАЧЕВА Н.Л., ЯЛОВЕЦ А.П. Полуаналитический метод решения уравнений газовой динамики в переменных Эйлера..... 32

Физика

- БЕЛОВ К.Н., БЕРДНИКОВ А.С., КИРЕЕВ В.Б., КУНДИКОВА Н.Д., ПРОСЕКОВ Д.Н., ФУНГ ДЫК МАНЬ, ШЕШИН Е.П. Спектры комбинационного рассеяния углеродных материалов, используемых в качестве катодов автоэмиссионных источников излучения..... 41
- ЕРАГЕР К.Р., БАЙГУТЛИН Д.Р., СОКОЛОВСКИЙ В.В., БУЧЕЛЬНИКОВ В.Д. Особенности нанодвойниковых структур в сплавах Гейслера $Ni_2Mn_{1,5}In_{0,5}$ и $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$ 48
- КУЗНЕЦОВ А.А. Магнитодинамика разбавленного ферроколлоида в сдвиговом потоке..... 59
- МУХИН Ю.В., ГАТАУЛЛИНА Ю.Р., КУНДИКОВА Н.Д. Поляризационные эффекты при отражении света от границы одноосного кристалла..... 66

- Информация** 73

CONTENTS

Mathematics

BOZIEV O.L. A Priori Estimates for Derivative Solutions of One-Dimensional Inhomogeneous Heat Conduction Equations with an Integral Load in the Main Part	5
PEREVOZCHIKOVA K.V. The Analysis and Processing of Information for One Stochastic System of The Sobolev Type.....	14
SAGADEEVA M.A., SHAFRANOV D.E. Spaces of Differential Forms with Stochastic Complex-Valued Coefficients	21
FILATOV V.V. Massive Sets Produced by Semilinear Elliptic Operators on Non-Compact Riemann Manifolds	26

Mechanics

ZHARYLKANOVA M.S., KLINACHEVA N.L., YALOVETS A.P. Semianalytic Method for Solving Gas Dynamics Equations in Euler Variables	32
---	----

Physics

BELOV K.N., BERDNIKOV A.S., KIREEV V.B., KUNDIKOVA N.D., PROSEKOV D.N., FUNG Duc Man, SHESHIN E.P. Raman Scattering Spectra of Carbon Materials Used as Cathodes of Auto-Emission Radiation Sources.....	41
ERAGER K.R., BAIGUTLIN D.R., SOKOLOVSKIY V.V., BUCHELNIKOV V.D. Peculiarities of Nanotwin Structures in $Ni_2Mn_{1.5}In_{0.5}$ and $Ni_2Mn_{1.75}In_{0.25}$ Heusler Alloys.....	48
KUZNETSOV A.A. Magnetodynamics of a Dilute Ferrocolloid in a Shear Flow	59
MUKHIN Y.V., GATAULLINA Y.R., KUNDIKOVA N.D. The Polarisation Effects of Light Reflection from the Interface with a Uniaxial Crystal	66

Information	73
--------------------------	-----------

АПРИОРНЫЕ ОЦЕНКИ ПРОИЗВОДНЫХ РЕШЕНИЙ ОДНОМЕРНЫХ НЕОДНОРОДНЫХ УРАВНЕНИЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ С ИНТЕГРАЛЬНОЙ НАГРУЗКОЙ В ГЛАВНОЙ ЧАСТИ

О.Л. Бозиев^{1,2}

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

² Кабардино-Балкарский государственный университет, г. Нальчик, Российская Федерация
E-mail: bozиеv@yandex.ru

Аннотация. Рассматривается вторая начально-краевая задача с однородными граничными условиями для одномерного модифицированного уравнения теплопроводности. Модификация состоит в замене коэффициента температуропроводности интегральной нагрузкой. В работе она имеет вид степенной функции от интеграла квадрата модуля производной решения уравнения по пространственной переменной. Уравнения с подобной нагрузкой ассоциированы с некоторыми практически важными параболическими уравнениями со степенной нелинейностью в главной части. Это позволяет использовать решения нагруженных задач для начала процесса последовательного приближения к решениям редуцируемых к ним нелинейных задач. В этом случае по отношению к исходному нелинейному уравнению нагруженное уравнение содержит ослабленную нелинейность. Линеаризация нагруженного уравнения позволяет найти его приближенное решение. В рассматриваемых в работе трех случаях интегральная нагрузка представляет собой квадрат нормы производной решения по x в пространстве L_2 в натуральной, обратной к натуральной и целой отрицательной степенях. Установлены соответствующие априорные неравенства, правая часть которых используется для перехода к линеаризованным уравнениям. Приводятся примеры линеаризации данным способом уравнений теплопроводности с интегральной нагрузкой в главной части.

Ключевые слова: уравнение теплопроводности; интегральная нагрузка; априорная оценка; линеаризация.

Введение

Как известно, заданное в области $Q = \{(x, t) : x \in \Omega \subseteq R^n, t \in (0, T)\}$ дифференциальное уравнение называется нагруженным, если оно содержит на принадлежащих $\bar{\Omega}$ многообразиях размерности меньше n один или несколько следов операций от искомого решения. Будем говорить об интегральной нагрузке в случае, когда дифференциальное уравнение в частных производных содержит какую-либо функцию от интеграла по пространственной переменной некоторой степени решения или его производной. На практике интегральная нагрузка возникает, в частности, в случае, когда при невозможности определения точного значения какого-либо коэффициента уравнения используется его усредненное значение на некотором промежутке.

Параболическое уравнение с интегральной нагрузкой в главной части, по-видимому, впервые рассматривалось в работе [1, с. 23]. Подобные уравнения, в том числе с младшими членами, исследовались в работах [2, 3]. В настоящее время продолжается изучение вопросов разрешимости начально-краевых задач для таких уравнений (см., например, [4–6]). К подобным уравнениям можно редуцировать практически важные параболические уравнения со степенной нелинейностью в главной части описывающих процессы фильтрации и диффузии газов [7, с. 136–137]. В этом случае редукция производится путем замены нелинейного члена его интегралом по пространственной переменной. Также представляют интерес параболические уравнения с интегральной нагрузкой в младших членах или редуцируемые к таковым [8–11]. Подобные уравнения

возникают, например, при исследовании нестационарных процессов в биологии и экологии. Можно заметить, что в уравнениях, содержащих степенную нелинейность под знаком интеграла, интегральная нагрузка либо непосредственно, либо после простых преобразований представляет собой функцию от натуральной степени модуля искомого решения или его производной, т. е. норму в некотором лебеговом пространстве. Этот факт позволяет использовать правую часть априорного неравенства, оценивающего данную норму, для линейризации нагруженного уравнения. Точное или приближенное решение линейризованного уравнения можно впоследствии принять за исходное приближение к решению ассоциированного нелинейного уравнения [12–14].

В работе рассматривается модифицированное одномерное неоднородное уравнение теплопроводности

$$u_t - a(\|u_x\|^2)u_{xx} = f(x, t), \quad a > 0, \quad (1)$$

при условиях

$$u(x, 0) = \varphi(x), \quad 0 \leq x \leq l, \quad u_x(0, t) = u_x(l, t) = 0, \quad 0 \leq t \leq T. \quad (2)$$

Модификация уравнения состоит в замене коэффициента температуропроводности интегральной нагрузкой $a(\|u_x\|^2)$, т. е. функцией, зависящей от квадрата нормы производной решения в пространстве $L_2(\Omega)$:

$$\|u_x\|^2 = \int_{\Omega} |u_x|^2 dx, \quad \Omega = [0, l].$$

В указанной норме устанавливаются априорные неравенства для пространственной производной решения задачи (1)–(2) с функциями

$$a(\|u_x\|^2) = (\|u_x\|^2)^{\frac{p}{2}} = \|u_x\|^p, \quad a(\|u_x\|^2) = (\|u_x\|^2)^{\frac{1}{p}} = \|u_x\|^{\frac{2}{p}}, \quad a(\|u_x\|^2) = (\|u_x\|^2)^{-\frac{p}{2}} = \|u_x\|^{-p}, \quad p \in N.$$

Случай $p = 2$ был отдельно рассмотрен в [15]. Приводятся примеры, в которых с целью линейризации первоначального уравнения интегральная нагрузка заменяется некоторой известной функцией от t , определяемой посредством правой части априорной оценки.

В предположении $u \in H^1(\Omega)$ всюду ниже будут использоваться следующие преобразования скалярных произведений функций в пространстве $L_2(\Omega)$:

$$\begin{aligned} (u_t, u_t) &= \int_{\Omega} u_t^2 dx = \int_{\Omega} |u_t|^2 dx = \|u_t\|^2, \\ -(u_{xx}, u_t) &= -\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} (u_x u_t) dx + \int_{\Omega} u_x u_{tx} dx = -(u_x u_t)|_{x=0}^{x=l} + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} u_x^2 dx = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_x\|^2, \\ \int_{\Omega} f u_t dx &\leq \int_{\Omega} |f u_t| dx \leq \frac{1}{2} \left(\int_{\Omega} f^2 dx + 2 \int_{\Omega} u_t^2 dx \right). \end{aligned} \quad (3)$$

В последнем случае использовано неравенство Коши с $\varepsilon = 0,5$.

1. Интегральная нагрузка $a(\|u_x\|^2) = \|u_x\|^p, p \in N$

При условиях (2) рассмотрим уравнение

$$u_t - \|u_x\|^p u_{xx} = f(x, t). \quad (4)$$

Теорема 1. Пусть функция $u \in H^1(\Omega)$ такая, что $u_t \in L_2(\Omega)$, является решением задачи (2), (4), $\varphi_x, f \in L_2(\Omega)$. Тогда для всех $p \in N$ функция $\|u_x\|^{p+2}$ ограничена константой, зависящей только от t .

Доказательство. Запишем скалярное произведение (1) с u_t :

$$(u_t, u_t) - \|u_x\|^p (u_{xx}, u_t) = (f, u_t).$$

Заметим, что

$$-\|u_x\|^p (u_{xx}, u_t) = \|u_x\|^p \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_x\|^2 = \left(\|u_x\|_{2,\Omega}^2 \right)^{\frac{p}{2}} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_x\|^2 = \frac{1}{p+2} \frac{d}{dt} \|u_x\|^{p+2}.$$

Это приводит скалярное произведение к виду

$$\|u_t\|^2 + \frac{1}{p+2} \frac{d}{dt} \|u_x\|^{p+2} = \int_{\Omega} f u_t dx.$$

Интегрируя его по t , получим

$$(p+2) \int_0^t \|u_t\|^2 d\tau + \|u_x\|^{p+2} = (p+2) \int_0^t \int_{\Omega} f u_t dx d\tau + \|u_x(x, 0)\|^{p+2}.$$

К пространственному интегралу в правой части применим неравенство (3):

$$(p+2) \int_{\Omega} f u_t dx \leq \frac{p+2}{2} \left(\frac{1}{2} \int_{\Omega} f^2 dx + 2 \int_{\Omega} u_t^2 dx \right) = \frac{p+2}{4} \int_{\Omega} f^2 dx + (p+2) \int_{\Omega} u_t^2 dx.$$

Это позволяет перейти к неравенству

$$(p+2) \int_0^t \|u_t\|^2 d\tau + \|u_x\|^{p+2} \leq (p+2) \int_0^t \|u_t\|^2 d\tau + \frac{p+2}{4} \int_0^t \|f\|^2 d\tau + \|\varphi_x\|^{p+2},$$

в силу которого имеем

$$\|u_x\|^{p+2} \leq \frac{p+2}{4} \int_0^t \|f\|^2 d\tau + \|\varphi_x\|^{p+2}.$$

Таким образом, получена выполняющаяся для всех $t \in [0, T]$ оценка

$$\|u_x\|^{p+2} \leq K(t), \tag{5}$$

$$K(t) = \frac{p+2}{4} \int_0^t \|f\|^2 d\tau + \|\varphi_x\|^{p+2}.$$

Теорема 1 доказана.

Из (5) следует, что

$$\|u_x\|^p \leq (K(t))^{\frac{p}{p+2}}. \tag{6}$$

Выбирая в (6) верхнюю границу оценки и подставляя в (4), получаем его линеаризацию

$$u_t - (K(t))^{\frac{p}{p+2}} u_{xx} = f(x, t). \tag{7}$$

Пример 1. Пусть в условиях (2)

$$l=1, \varphi(x) = x(x-1), f(x, t) = xt. \tag{8}$$

В этом случае

$$\|\varphi_x\|^2 = \int_0^1 (2x-1)^2 dx = \frac{1}{3}, \int_0^t \|f\|^2 d\tau = \frac{t^3}{9}, \tag{9}$$

$$\|\varphi_x\|^{p+2} = \left(\|\varphi_x\|^2 \right)^{\frac{p+2}{2}} = 3^{-\frac{p+2}{2}}, K(t) = \frac{1}{3} \left(\frac{p+2}{12} t^3 + \frac{1}{\sqrt{3^p}} \right).$$

Подстановка в (4) приводит к линейному уравнению

$$u_t - {}^{p+2} \sqrt{\left(\frac{1}{3} \left(\frac{p+2}{12} t^3 + \frac{1}{\sqrt{3^p}} \right) \right)^p} u_{xx} = xt.$$

В частности, при $p = 2$ получаем уравнение

$$u_t - \frac{1}{3} \sqrt{t^3 + 1} u_{xx} = xt.$$

2. Интегральная нагрузка $a\left(\|u_x\|^2\right)=\|u_x\|^{\frac{2}{p}}, p \in N$

При условиях (2) рассмотрим уравнение

$$u_t - \|u_x\|^{\frac{2}{p}} u_{xx} = f(x, t). \quad (10)$$

Теорема 2. Пусть функция $u \in H^1(\Omega)$ такая, что $u_t \in L_2(\Omega)$, является решением задачи (2), (10), $\varphi_x, f \in L_2(\Omega)$. Тогда для всех $p \in N$ функция $\|u_x\|^{\frac{2}{p}}$ ограничена константой, зависящей только от t .

Доказательство. Запишем скалярное произведение (10) с u_t :

$$(u_t, u_t) - \|u_x\|^{\frac{2}{p}} (u_{xx}, u_t) = (f, u_t).$$

Заметим, что

$$-\|u_x\|^{\frac{2}{p}} (u_{xx}, u_t) = \|u_x\|^{\frac{2}{p}} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_x\|^2 = \frac{1}{2} \left(\|u_x\|^2\right)^{\frac{1}{p}} \frac{d}{dt} \|u_x\|^2 = \frac{1}{2} \frac{p}{p+1} \frac{d}{dt} \left(\|u_x\|^2\right)^{\frac{p+1}{p}}.$$

Это приводит к уравнению

$$\|u_t\|^2 + \frac{1}{2} \frac{p}{p+1} \frac{d}{dt} \left(\|u_x\|^2\right)^{\frac{p+1}{p}} = \int_{\Omega} f u_t dx.$$

Интегрирование последнего дает

$$2 \frac{p+1}{p} \int_0^t \|u_t\|^2 d\tau + \left(\|u_x\|^2\right)^{\frac{p+1}{p}} = 2 \frac{p+1}{p} \int_0^t \int_{\Omega} f u_t dx d\tau + \left(\|u_x(x, 0)\|^2\right)^{\frac{p+1}{p}}. \quad (11)$$

Воспользуемся (3) в первом слагаемом правой части:

$$2 \frac{p+1}{p} \int_{\Omega} f u_t dx \leq \frac{p+1}{p} \left(\frac{1}{2} \int_{\Omega} f^2 dx + 2 \int_{\Omega} u_t^2 dx \right).$$

Это позволяет перейти от (11) к неравенству

$$\left(\|u_x\|^2\right)^{\frac{p+1}{p}} \leq \frac{p+1}{2p} \int_0^t \|f\|^2 d\tau + \left(\|\varphi_x\|^2\right)^{\frac{p+1}{p}}.$$

Отсюда легко получается оценка, выполняющаяся для всех $t \in [0, T]$:

$$\|u_x\|^{\frac{2}{p}} \leq (K(t))^{\frac{1}{p+1}}, \quad (12)$$

$$K(t) = \frac{p+1}{2p} \int_0^t \|f\|^2 d\tau + \left(\|\varphi_x\|^2\right)^{\frac{p+1}{p}}.$$

Теорема 2 доказана.

Выбирая равенство в (12), перейдем от (10) к линейному уравнению

$$u_t - (K(t))^{\frac{1}{p+1}} u_{xx} = f(x, t).$$

Пример 2. Пусть имеет место (8). Пользуясь (9), получаем

$$K(t) = \frac{p+1}{2p} t^3 + 3^{-\frac{p+1}{p}}.$$

Тогда уравнение (10) можно записать в виде

$$u_t - \left(\frac{p+1}{2p} t^3 + 3^{-\frac{p+1}{p}} \right)^{\frac{1}{p+1}} u_{xx} = f(x, t).$$

В частности, при $p = 2$ получаем

$$K(t) = 0,75t^3 + 0,19245.$$

Подстановка в (12) приводит к линейному уравнению

$$u_t - \sqrt[3]{0,75t^3 + 0,19245} u_{xx} = xt.$$

3. Интегральная нагрузка $a(\|u_x\|^2) = \|u_x\|^{-p}$, $p \in N$

При условиях (2) рассмотрим уравнение

$$u_t - \|u_x\|^{-p} u_{xx} = f(x,t). \quad (13)$$

Теорема 3.1. Пусть функция $u \in H^1(\Omega)$ такая, что $u_t \in L_2(\Omega)$, является решением задачи (12), (2), $\varphi_x, f \in L_2(\Omega)$. Тогда для всех натуральных $p \neq 2$ функция $\|u_x\|^{2-p}$ ограничена константой, зависящей только от t .

Доказательство. Рассмотрим скалярное произведение (13) и функции u :

$$(u_t, u) - \|u_x\|^{-p} (u_{xx}, u) = (f, u).$$

С учетом того, что

$$\begin{aligned} (u_t, u) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} u^2 dx = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u\|^2, \\ -(u_{xx}, u) &= - \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} (u_x u) dx + \int_{\Omega} u_x u_x dx = -(u_x u) \Big|_{x=0}^{x=l} + \int_{\Omega} u_x^2 dx = \|u_x\|^2, \\ -\|u_x\|^{-p} (u_{xx}, u) &= \|u_x\|^{2-p}, \end{aligned}$$

запишем уравнение

$$\frac{d}{dt} \|u\|^2 + 2\|u_x\|^{2-p} = 2 \int_{\Omega} f u dx,$$

от которого перейдем к неравенству

$$\frac{d}{dt} \|u\|^2 + 2\|u_x\|^{2-p} \leq \|f\|^2 + \|u\|^2. \quad (14)$$

Проинтегрируем (14), предварительно опустив в левой части второе слагаемое:

$$\|u\|^2 \leq \int_0^t \|u\|^2 d\tau + F(t), \quad F(t) = \int_0^t \|f\|^2 d\tau + \|\varphi(x)\|^2.$$

Применяя к последнему неравенству обобщение неравенства Гронуолла [16, теорема 1.4]) получаем

$$\|u\|^2 \leq K_0(t), \quad (15)$$

$$K_0(t) = \int_0^t F(\tau) e^{t-\tau} d\tau + F(t).$$

Предполагая равенство в (15), подставим его правую часть в (14).

$$2\|u_x\|^{2-p} \leq \|f\|^2 + K_0(t) - K_0'(t). \quad (16)$$

Пусть функция $K_0(t)$ не убывает при $t \in [0, T]$, т. е. $K_0'(t) \geq 0$. Тогда для гарантированного сохранения знака неравенства в (16) опустим отрицательное слагаемое. В случае невозрастающей $K_0(t)$, т. е. при $K_0'(t) \leq 0$, сохраним (16) без изменения. В результате для всех $t \in [0, T]$ приходим к оценке

$$\begin{aligned} \|u_x\|^{2-p} &\leq K(t), \\ K(t) &= 0,5 \left(\|f\|^2 + K_0(t) + K_1(t) \right), \end{aligned} \quad (17)$$

$$K_1(t) = \begin{cases} 0, & K'_0(t) \geq 0, \\ -K'_0(t), & K'_0(t) \leq 0. \end{cases}$$

Теорема доказана.

Выбирая верхнюю границу оценки (17), запишем, что

$$\|u_x\|^{-p} = (K(t))^{p-2},$$

что позволяет перейти от (13) к линейному уравнению

$$u_t - (K(t))^{p-2} u_{xx} = f(x, t).$$

Пример 3.1. Пусть при $p = 3$ имеет место (8). Тогда

$$\|\varphi\|^2 = \int_0^1 |x(x-1)|^2 dx = \frac{1}{30}, \int_0^t \|f\|^2 d\tau = \frac{t^3}{9}, F(t) = \frac{1}{6} \left(\frac{t^3}{3} + \frac{1}{5} \right), K_0(t) = \frac{1}{6} \left(\frac{t^3}{3} + \frac{1}{5} \right) e^t.$$

Так как функция $K_0(t)$, т. е. $K'_0(t)$ возрастающая, то $K(t)$ ищем в виде

$$K(t) = \frac{1}{2} \left(\int_0^t \|f\|^2 d\tau + K_0(t) \right) = \frac{1}{6} \left(\frac{t^3}{3} + \left(\frac{t^3}{3} + \frac{1}{5} \right) e^t \right).$$

С помощью последней функции линеаризуем уравнение (13):

$$u_t - \frac{1}{216} \left(\frac{t^3}{3} + \left(\frac{t^3}{3} + \frac{1}{5} \right) e^t \right)^3 u_{xx} = xt.$$

Теорема 3.2. Пусть функция $u \in H^1(\Omega)$ такая, что $u_t \in L_2(\Omega)$, является решением задачи (13), (2), $\varphi_x, f \in L_2(\Omega)$. Тогда при $p = 2$ функция $\|u_x\|^2$ ограничена константой, зависящей только от t .

Доказательство. Рассмотрим скалярное произведение (13) и функции u_t

$$(u_t, u_t) - \|u_x\|^{-2} (u_{xx}, u_t) = (f, u_t)$$

и заметим, что имеет место равенство

$$-\|u_x\|^{-2} (u_{xx}, u_t) = \frac{1}{2} \|u_x\|^{-2} \frac{d}{dt} \|u_x\|^2 = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \ln \|u_x\|^2.$$

С учетом этого запишем (14) в виде

$$\|u_t\|^2 + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \ln \|u_x\|^2 = \int_{\Omega} f u_t dx,$$

а от последнего перейдем к неравенству

$$2 \int_0^t \|u_t\|^2 d\tau + \ln \|u_x\|^2 \leq \frac{1}{2} \int_0^t \|f\|^2 d\tau + 2 \int_0^t \|u_t\|^2 d\tau + \ln \|\varphi_x\|^2.$$

Отсюда следует выполняющаяся для всех $t \in [0, T]$ априорная оценка

$$\|u_x\|^2 \leq K(t), \tag{18}$$

$$K(t) = \|\varphi_x\|^2 e^{\int_0^t 0,5 \|f\|^2 d\tau}.$$

Теорема доказана.

Рассматривая (18) как равенство, можно записать

$$\|u_x\|^{-2} = (K(t))^{-1}.$$

Это позволяет перейти от (13) к линейному уравнению

$$u_t - (K(t))^{-1} u_{xx} = f(x, t). \tag{19}$$

Пример. 3.2. Пусть при $p = 2$ имеет место (8). В этом случае из (9) следует

$$(K(t))^{-1} = 3e^{-\frac{t^3}{18}}.$$

Подстановка в (19) приводит к линейному уравнению

$$u_t - 3e^{-\frac{t^3}{18}} u_{xx} = xt.$$

Заключение

В работе установлены априорные оценки производных решений второй смешанной задачи (2) для одномерных неоднородных уравнений теплопроводности (1) с интегральной нагрузкой в главной части. Рассмотрено три случая, в которых интегральная нагрузка $a(\|u_x\|^2)$ последовательно принимает вид $\|u_x\|^p, \|u_x\|^{\frac{2}{p}}, \|u_x\|^{-p}, p \in N$. Первому случаю соответствует оценка (5), второму – оценка (12), третьему – оценки (17) и (18) при $p \neq 2$ и $p = 2$ соответственно. Правые части оценок используются для линеаризации нагруженных уравнений. Данный способ линеаризации в отличие от других позволяет переходить от нагруженного уравнения к линейному с сохранением в общих чертах физического (биологического, экологического) смысла процесса, моделируемого нагруженным уравнением. Точное или приближенное решение линеаризованного уравнения, найденное при исходных начальном и граничных условиях, можно принять за приближенное решение нагруженного уравнения, которое может быть использовано для запуска итерационного процесса последовательных приближений к точному решению нагруженной задачи.

Литература

1. Бернштейн, С.Н. Об одном классе функциональных уравнений с частными производными / С.Н. Бернштейн // Известия Академии наук СССР. Серия математическая. – 1940. – Т. 4, Вып. 1. – С. 17–26.
2. Джангвеладзе, Т.А. Об одном нелинейном интегро-дифференциальном уравнении параболического типа / Т.А. Джангвеладзе // Дифференциальные уравнения. – 1985. – Т. 21, № 1. – С. 41–46.
3. Лаптев, Г.И. Квазилинейные параболические уравнения второго порядка с интегральными коэффициентами / Г.И. Лаптев // ДАН СССР. – 1987. – Т. 293, № 2. – С. 306–309.
4. Dawidowski, L. The Quasilinear Parabolic Kirchhoff Equation / L. Dawidowski // Open Math. – 2017. – Vol. 15, Iss. 1. – P. 382–392.
5. Matsuyama, T. On the Gevrey Well-Posedness of the Kirchhoff Equation / T. Matsuyama, M. Ruzhansky // arXiv:1508.05305 [math.AP].
6. On a Kirchhoff Diffusion Equation with Integral Condition / D.H.Q. Nam, D. Dalenu, N.H. Luc, N.H. Can // Advances in Difference Equations. – 2020. – Article number: 617.
7. Калашников, А.С. Некоторые вопросы качественной теории нелинейных вырождающихся параболических уравнений второго порядка / А.С. Калашников // Успехи мат. наук. – 1987. – Т. 42, вып. 2(254). – С. 135–176.
8. Xulong, Q. Boundary Layer Study of a Nonlinear Parabolic Equation with a Small Parameter / Q. Xulong, Z. Xu, Zh. Wenshu // Mathematical methods in the applied Sciences. – 2021 – Vol. 45, Iss 7. – P. 3393–3400.
9. Yaman, M. Finite-Time Behaviour of Solutions to Nonlinear Parabolic Equation / M. Yaman, Z. Misir // New Trends in Mathematical Sciences. – 2022 – Vol. 10, no. 4. – P. 47–53.
10. On the Fujita exponent for a nonlinear parabolic equation with a forcing term / A. Alshehri, N. Aljaber, H. Altamimi, M. Majdoub // arXiv:2206.04930v1 [math.AP] 10.06.2022. <https://arxiv.org/abs/2206.04930>
11. Boccardo, L. Solutions of Nonlinear Parabolic Equations without Growth Restrictions on the Data / L. Boccardo, T. Gallouet, J.L. Vazquez // Electronic Journal of Differential Equations. – 2001. – no. 60. – P. 1–20. URL: <https://ejde.math.txstate.edu/Volumes/2001/60/boccardo.pdf>
12. Бозиев, О.Л. Об одном методе приближенного решения параболического уравнения с интегральной нагрузкой / О.Л. Бозиев // Математический вестник Вятского государственного университета. – 2021. – № 2(21). С. 9–12.

13. Бозиев, О.Л. О приближенном методе решения нагруженных уравнений гиперболического и параболического типов / О.Л. Бозиев // Известия Кабардино-Балкарского научного центра РАН. – 2021. – № 2(100). – С. 5–10.

14. Бозиев, О.Л. Об одном методе приближенного решения параболического уравнения со степенной нелинейностью / О.Л. Бозиев // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика–Математика. – 2021. – № 3. – С. 18–28.

15. Бозиев, О.Л. О линеаризации параболических уравнений с интегральной нагрузкой в главной части с помощью априорной оценки их решений / О.Л. Бозиев // Математический вестник Вятского государственного университета. – 2022. – № 2(25). – С. 4–8.

16. Филатов, А.Н. Интегральные неравенства и теория нелинейных колебаний / А.Н. Филатов, Л.В. Шарова. – М.: Наука, 1976. – 152 с.

Поступила в редакцию 10 февраля 2023 г.

Сведения об авторе

Бозиев Олег Людинович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры компьютерных технологий и информационной безопасности института искусственного интеллекта и цифровых технологий Кабардино-Балкарского государственного университета, г. Нальчик, Российская Федерация; старший научный сотрудник института информатики и проблем регионального управления Кабардино-Балкарского научного центра РАН, г. Нальчик, Российская Федерация, E-mail: bozиеv@yandex.ru

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2023, vol. 15, no. 2, pp. 5–13*

DOI: 10.14529/mmph230201

A PRIORI ESTIMATES FOR DERIVATIVE SOLUTIONS OF ONE-DIMENSIONAL INHOMOGENEOUS HEAT CONDUCTION EQUATIONS WITH AN INTEGRAL LOAD IN THE MAIN PART

O.L. Bozиеv^{1,2}

¹ Institute of Computer Science and Problems of Regional Management of KBSC of the Russian Academy of Sciences, Nal'chik, Russian Federation

² Kabardino-Balkar State University, Nal'chik, Russian Federation

E-mail: bozиеv@yandex.ru

Abstract. This article considers the second initial-boundary value problem with homogeneous boundary conditions for a one-dimensional modified heat equation. The modification consists in replacing the temperature-conductivity coefficient with an integral load. In our case, it has the form of a power function of the integral of the square of the modulus of the derivative of the solution of the equation with respect to the spatial variable. Equations with such a load are associated with some practically important parabolic equations with a power nonlinearity in the main part. This makes it possible to use previously found solutions of loaded problems to start the successive approximation to solutions of the nonlinear problems reduced to them. In this case, with respect to the original nonlinear equation, the loaded equation contains a weakened nonlinearity. Linearization of the loaded equation makes it possible to find its approximate solution. The article considers three cases of integral load: the square of the norm of the derivative of the solution with respect to x in the space L_2 in natural, inverse to natural, and integer negative powers. The corresponding *a priori* inequalities are established. Their right sides are used to pass to linearized equations. Examples of linearization of heat conduction equations with an integral load in the main part are given.

Keywords: parabolic equation; integral load; a priori estimation; linearization.

References

1. Bernstein S.N. Ob odnom klasse funktsional'nykh uravneniy s chastnymi proizvodnymi (Sur Une Classe D'équations Fonctionnelles aux Dérivées Partielles). *Izvestiya Akademii nauk SSSR. Seriya matematicheskaya*, 1940, Vol. 4, Iss. 1, pp. 17–26. (in Russ.).
2. Jangveladze T.A. Ob odnom nelineynom integro-differentsial'nom uravnenii parabolicheskogo tipa (A Nonlinear Integro-Differential Equation of Parabolic Type). *Differ. Uravn.*, 1985, Vol. 21, no. 1, pp. 41–46. (in Russ.).
3. Laptev G.I. Kvazilineynyye parabolicheskiye uravneniya vtorogo poryadka s integral'nymi koeffitsiyentami (Second-Order Quasilinear Parabolic Equations with Integral Coefficients). *Dokl. Akad. nauk SSSR*, 1987, Vol. 293, no. 2, pp. 306–309. (in Russ.).
4. Dawidowski L. The Quasilinear Parabolic Kirchhoff Equation, *Open Math.*, 2017, Vol. 15, Iss. 1, pp. 382–392. DOI: 10.1515/math-2017-0036.
5. Matsuyama T., Ruzhansky M. On the Gevrey Well-Posedness of the Kirchhoff Equation. *arXiv:1508.05305 [math.AP]*. DOI: 10.48550/arXiv.1508.05305
6. Nam D. H.Q., Dalenu D., Luc N.H., Can N.H. On a Kirchhoff Diffusion Equation with Integral Condition. *Advances in Difference Equations*, 2020, Article no. 617. DOI: 10.1186/s13662-020-03077-y
7. Kalashnikov, A.S. Some Problems of the Qualitative Theory of Non-Linear Degenerate Second-Order Parabolic Equations. *Russian Mathematical Surveys*, 1987, Vol. 42, Iss. 2, pp. 169–222. DOI: 10.1070/RM1987v042n02ABEH001309
8. Xulong Q., Xu Zh., Wenshu Zh. Boundary Layer Study of a Nonlinear Parabolic Equation with a Small Parameter. *Mathematical methods in the applied Sciences*, 2021, Vol. 45, Iss. 7, pp. 3393–3400. DOI: 10.1002/mma.7985
9. Yaman M., Misir Z. Finite-Time Behaviour of Solutions to Nonlinear Parabolic equation. *New Trends in Mathematical Sciences*, 2022, Vol. 10, no. 4, pp. 47–53. DOI: 10.20852/ntmsci.2022.487
10. Alshehri A., Aljaber N., Altamimi H., Majdoub M. On the Fujita Exponent for a Nonlinear Parabolic Equation with a Forcing Term. *arXiv:2206.04930v1 [math.AP]* 10.06.2022. DOI: 10.48550/arXiv.2206.04930
11. Boccardo L., Gallouet T., Vazquez J.L. Solutions of Nonlinear Parabolic Equations without Growth Restrictions on the Data. *Electronic Journal of Differential Equations*, 2001, no. 60, pp. 1–20. <https://ejde.math.txstate.edu/Volumes/2001/60/boccardo.pdf>
12. Boziev O.L. On One Method of Approximate Solution of a Parabolic Equation with an Integral Load. *Mathematical bulletin of Vyatka State University*, 2021, Iss. 2 (21). pp. 9–12. DOI: 10.25730/VSU.0536.21.009 (in Russ.).
13. Boziev O.L. On an Approximate Method for Solving Loaded Equations of Hyperbolic and Parabolic types. *News of the Kabardino-Balkarian Scientific Center of RAS*, 2021, no. 2 (100), pp. 5–10. DOI: 10.35330/1991-6639-2021-2-100-5-10
14. Boziev O.L. A Method for an Approximate Solution to a Parabolic Equation with a Power-Law Nonlinearity. *Bulletin MSRU. Series: Physics and Mathematics*, 2021, no. 3, pp. 18–28. DOI: 10.18384/2310-7251-2021-3-18-28 (in Russ.).
15. Bosiev O.L. On the Linearization of Parabolic Equations with Integral Load in the Main Part by a Priori Estimation of Their Solutions. *Mathematical bulletin of Vyatka State University*, 2022, Iss. 2 (25). pp. 4–8. DOI: 10.25730/VSU.0536.22.010 (in Russ.).
16. Filatov A.N., Sharova L.V. *Integral'nye neravenstva i teoriya nelineynykh kolebaniy* (Integral Inequality and Theory of Nonlinear Oscillations). Moscow, Nauka Publ., 1976, 152 p. (in Russ.).

Received February 10, 2023

Information about the author

Boziev Oleg Ludinovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Computer Technologies and Information Security Department, Kabardino-Balkarian State University, Nal'chik, Russian Federation; Senior Re-searcher, Institute of Computer Science and Problems of Regional Management of Kabardino-Balkarian Science Center of the Russian Academy of Sciences, Nal'chik, Russian Federation, e-mail: boziev@yandex.ru

THE ANALYSIS AND PROCESSING OF INFORMATION FOR ONE STOCHASTIC SYSTEM OF THE SOBOLEV TYPE

K.V. Perevozchikova

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: perevozchikovakv@susu.ru

Abstract. This article is devoted to the analysis and processing of information for a stochastic model based on the equation of potential distribution in a crystalline semiconductor with the Nelson–Glicklich derivative and the Showalter–Sidorov initial condition. By semiconductors, we mean substances that have a finite electrical conductivity that rapidly increases with increasing temperature. It is assumed that the initial experimental data may be affected by random noise, which leads to the study of the stochastic model. An analysis of the stochastic model of the potential distribution in a crystalline semiconductor is given. Conditions under which there are step-by-step solutions of the model under study with the Showalter–Sidorov initial condition are found. Further, on the basis of the theoretical results, an algorithm for the numerical analysis of the system is given. Its implementation is presented in the form of a computational experiment, which is necessary for the further processing of information.

Keywords: stochastic model of potential distribution in a crystalline semiconductor; analysis and processing of information; the Nelson–Glicklich derivative; Sobolev type equations.

Introduction

As a rule, functioning of real physical processes is accompanied by the impact of hard-to-control perturbations. Under their influence, the study of systems is no longer possible in a deterministic case and, as a result, the transition to stochastic modeling takes place. Stochastic differential equations can be considered with various additive random processes. One of the classical ways to study stochastic models is the Ito–Stratonovich–Skorokhod method, which allows to move from differential equations to integral ones. At the moment, the method is extended to the infinite-dimensional situation [1], and various applications to classical models of mathematical physics are considered [2]. This approach has also been extended to degenerate Sobolev-type models [3].

Another direction in the study of stochastic models is the approach where “white noise” is considered as the Nelson–Glicklich derivative $\overset{o}{\eta}$ of the Wiener process [4, 5]. An example would be a Shestakov–Sviridyuk model measuring device model [6]. This model is based on a Leontief type stochastic system. Note also that if η is a function then the Nelson–Glicklich derivative can be considered in the classical case. The idea of “white noise” in this theory, which existed in finite-dimensional spaces [7, 8] shows high efficiency. Therefore, later the principle was carried over to infinite-dimensional spaces [9, 10]. This approach allows us to transfer to the stochastic case the applied (well-known) methods of functional analysis in the deterministic case.

In this work, we present the analysis and processing of information for one stochastic system. To this end, first of all, we analyze the Sobolev-type stochastic model itself. Next, we find the conditions under which there exists a trajectory solution to the problem. This makes it possible to construct an algorithm for the numerical method and conduct a series of computational experiments. With the help of computational methods it is possible to process information. In the stochastic case, the mathematical model of the distribution of potential in a crystalline semiconductor has the form

$$\eta(s, t) = 0, (s, t) \in \partial D \times [0, T], \quad (1)$$

$$(\lambda - \Delta)\overset{o}{\eta} - a_1 \Delta \eta - a_2 \operatorname{div}(|\nabla \eta|^2 \nabla \eta) = 0, \quad (2)$$

with the weakened Showalter–Sidorov problem

$$\lim_{t \rightarrow 0+} (\lambda - \Delta)(\eta(t) - \eta_0) = 0, \quad s \in D. \quad (3)$$

Here the function $\eta = \eta(s, t)$ is the potential electric field, the parameters $\lambda \in \mathbb{R}$, $a_1, a_2 \in \mathbb{R}$, and $D \subset \mathbb{R}^n$ is a bounded domain and ∂D of the class C^∞ . The mathematical interpretation of the model is presented

in [11]. Note that in the stochastic model η_0 is a random influence. Problem (1), (2) can be reduced to the stochastic equation

$$L\overset{\circ}{\eta} = M\eta + N(\eta) \tag{4}$$

with condition (3). A solution to (4) is $\eta = \eta(t)$ that is a stochastic K-process and each of the processes is considered to be equated, if almost surely each trajectory of one of the processes coincides with a process otherwise.

1. Analysis of Stochastic Mathematical Model

Consider a complete probability space $\Omega \equiv (\Omega, A, P)$ and the set of real numbers \mathbb{R} endowed with a Borel σ -algebra. The set of random variables (a measurable mapping $\xi: D \rightarrow \mathbb{R}$) with zero expectations (i.e. $E\xi = 0$) and finite variance forms the Hilbert space L_2 (i.e. $D\xi < +\infty$) with the inner product $(\xi_1, \xi_2) = E\xi_1\xi_2$. Here E, D are the expectation and variance of the random variable, respectively. A mapping $\eta: I \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ of the form $\eta = \eta(t, \omega) = g(f(t), \omega)$ is called an (*one-dimensional*) *random process*, where $f: I \rightarrow L_2$ ($I \subset \mathbb{R}$ is some set) and $g: L_2 \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. The set of continuous stochastic processes forms a Banach space $C(I, L_2)$.

Consider a real separable Hilbert space $(H, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ identified with its conjugate space with the orthonormal basis $\{\varphi_k\}$. Let's write down $x = \sum_{k=1}^{\infty} \langle x, \varphi_k \rangle \varphi_k$ for each element $x \in H$. Next, choose a

monotonely decreasing numerical sequence $K = \{\mu_k\}$ such that $\sum_{k=1}^{\infty} \mu_k^2 < +\infty$. Consider a sequence of

random variables $\{\xi_k\} \subset L_2$ such that $\sum_{k=1}^{\infty} \mu_k^2 D\xi_k < +\infty$. Denote by $H_K L_2$ the Hilbert space of *random*

K-variables of the form $\xi = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k \xi_k \varphi_k$. Moreover, there is a random K-variable $\xi \in H_K L_2$. Note that

dot prouct in $H_K L_2$ has form $(\xi^1, \xi^2) = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k^2 E \xi_k^1 \xi_k^2$. Consider a sequence of random processes

$\{\eta_k\} \subset C(I, L_2)$ and define the *H-valued continuous stochastic K-process*

$$\eta(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k \eta_k(t) \varphi_k, \tag{5}$$

which is denoted by $C^1(I; H_K L_2)$ and

$$\eta_0 = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k \eta_{0k} \varphi_k. \tag{6}$$

Note that the Nelson–Gliklikh derivatives of the random K-process

$$\overset{\circ}{\eta}(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k \overset{\circ}{\eta}_k(t) \varphi_k \tag{7}$$

inclusively in the right-hand side, and all series converge uniformly in the norm $H_K L_2$ on any compact from I . Next, consider the space $C^1(I; H_K L_2)$ of continuous stochastic K-processes whose trajectories are almost surely continuously differentiable by Nelson–Gliklikh.

Consider dual pairs of reflexive Banach spaces (N, N^*) and (B, B^*) , where $N = W_4^1(D)$, $B = W_2^1(D)$, $H = L_2(D)$ (note that B^* and N^* are dual spaces to B and N) are defined in the domain D such that the embeddings

$$\mathbf{N} \subset \mathbf{B} \subset \mathbf{H} \subset \mathbf{N}^* \subset \mathbf{B}^* \tag{8}$$

are dense and continuous.

The solvability of the problem (1)–(3) in deterministic case is considered in [12]. Let us use similar reasoning for the stochastic case. Since model (1)–(3) refers to the deterministic case, we obtain the following splittings of the spaces:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{N} \supset \ker L \equiv \operatorname{coker} L \subset \mathbf{N}^*, \\ \mathbf{N} = \operatorname{coim} L \oplus \ker L, \\ \mathbf{N}^* = \operatorname{coker} L \oplus \operatorname{im} L, \\ \mathbf{B} = \ker L \oplus [\overline{\operatorname{coim} L \cap \mathbf{B}^*}], \\ \mathbf{B}^* = \operatorname{coker} L \oplus [\operatorname{im} L \cap \mathbf{B}^*], \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \mathbf{N}_K L_2 \supset [\ker L]_K L_2 \equiv [\operatorname{coker} L]_K L_2 \subset \mathbf{N}_K^* L_2, \\ \mathbf{N}_K L_2 = [\operatorname{coim} L]_K L_2 \oplus [\ker L]_K L_2, \\ \mathbf{N}_K^* L_2 = [\operatorname{coker} L]_K L_2 \oplus [\operatorname{im} L]_K L_2, \\ \mathbf{B}_K L_2 = [\ker L]_K L_2 \oplus [\overline{\operatorname{coim} L \cap \mathbf{B}^*}]_K L_2, \\ \mathbf{B}_K^* L_2 = [\operatorname{coker} L]_K L_2 \oplus [\operatorname{im} L \cap \mathbf{B}^*]_K L_2. \end{aligned}$$

In stochastic case, the operators L, M and N are defined as follows:

$$\begin{aligned} (L\eta, \zeta) &= \int_D (\lambda \eta \zeta + \nabla \eta \cdot \nabla \zeta) ds \quad \forall \eta, \zeta \in \mathbf{N}_K L_2, \\ (M\eta, \zeta) &= -a_1 \int_D \nabla \eta \cdot \nabla \zeta ds \quad \forall \eta, \zeta \in \mathbf{N}_K L_2, \\ (N(\eta), \zeta) &= -a_2 \int_D |\nabla \eta|^2 \nabla \eta \cdot \nabla \zeta ds \quad \forall \eta, \zeta \in \mathbf{B}_K L_2, \end{aligned}$$

where (\cdot, \cdot) is the scalar product in $\mathbf{H}_K L_2$. Note that $L: \mathbf{N} \rightarrow \mathbf{N}^*$ is a linear, continuous, self-adjoint, non-negatively defined and Fredholm operator in the deterministic case, then $L: \mathbf{N}_K L_2 \rightarrow \mathbf{N}_K^* L_2$ it has the same properties. For all $a_1 \in \mathbf{R}, a_2 \in \mathbf{R}$ the operator $M: \mathbf{N}_K L_2 \rightarrow \mathbf{N}_K^* L_2$ and $N: \mathbf{B}_K L_2 \rightarrow \mathbf{B}_K^* L_2$ are dissipative. Similarly, we construct the spaces $\mathbf{N}_K L_2$. For an orthonormal basis, consider the sequence of eigenfunctions $\{\varphi_k\}$ and eigenvalues $\{\lambda_k\}$ for homogeneous Dirichlet problem for the Laplace operator $(-\Delta)$ in the domain D .

Let $\lambda \geq \lambda_1$

$$\ker L = \begin{cases} \{0\}, & \lambda > -\lambda_1; \\ \operatorname{span}\{\varphi_1\}, & \lambda = -\lambda_1. \end{cases}$$

Then

$$\begin{aligned} [\operatorname{im} L]_K L_2 &= \begin{cases} \mathbf{N}_K^* L_2, & \lambda > -\lambda_1; \\ \{\eta \in \mathbf{N}_K^* L_2 : (\eta, \varphi_1) = 0\}, & \lambda = -\lambda_1, \end{cases} \\ [\operatorname{coim} L]_K L_2 &= \begin{cases} \mathbf{N}_K L_2, & \lambda > -\lambda_1; \\ \{\eta \in \mathbf{N}_K L_2 : (\eta, \varphi_1) = 0\}, & \lambda = -\lambda_1. \end{cases} \end{aligned}$$

Suppose that $I \equiv (0, T)$. We use the space \mathbf{H} in order to construct the spaces of K -“noises”, the spaces $C^1(I; \mathbf{H}_K L_2)$ and $C^1(I; \mathbf{N}_K L_2)$, $k \in N$. Consider stochastic Sobolev type equation (4). A stochastic K -process $\eta \in C^1(I; \mathbf{N}_K L_2)$ is said to be a solution to equation (4), if almost surely all trajectories of η satisfy equation (4) for all $t \in I$. A solution $\eta = \eta(t)$ to equation (4) that satisfies the initial value condition

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} L(\eta(t) - \eta_0) = 0 \tag{9}$$

is called a solution to Showalter–Sidorov problem (4), (9) for some random K -variable $\eta_0 \in \mathbf{N}_K L_2$. Fix $\omega \in \Omega$, since the solution of the problem is considered trajectory.

Theorem Let $\lambda \geq -\lambda_1, a_1, a_2 \in \mathbf{R}$, then for any $\eta_0 \in \mathbf{N}_K L_2$, there exists a unique solution $\eta \in C^1(I; \mathbf{N}_K L_2)$ to problem (1)–(3).

Proof. Since $\omega \in \Omega$ is fixed, then the proof of the theorem is equivalent to those in the deterministic case [12]. \square

2. Process Information

In [13] an algorithm was proposed for numerical study of Sobolev type stochastic models with Showalter–Sidorov conditions. A feature of the study of models with random influence is that it is necessary to carry out m computational experiments. Each of them uses a normally distributed generator of random variables with specified parameters of mathematical expectation and variance. As a result, we get several implementations of the solution. According to the results of the experiment, the selective mathematical expectation $\mathbf{E}(\eta(s, t))$, for any value of t , is equal to the mathematical expectation of the corresponding part, i.e. the mean trajectory obtained as a result of processing m experience. In addition to showing the performance of the experiments, it is also necessary to check if they are within the confidence interval. The width of the confidence interval depends on the size of the standard error, which, in turn, depends on the sample size and, when considering a numerical variable from the variability of the data, give wider confidence intervals than studies of a large data set of few data. If the realizations lie within the confidence interval, then the results are consistent with this likely value. The probability that the confidence interval contains the realizations of the experiment is called the confidence probability (usually 0,95 or 0,99).

Consider problem (1)–(3) and represent the solution: $\eta_N(s, t) = \sum_{k=1}^N \mu_k \eta_k(t) \varphi_k(s)$. Initial random influence has form $\eta_{0N} = \sum_{k=1}^N \mu_k \eta_{0k} \varphi_k$. Let's set the initial data: $\lambda = 1, a_1 = 1, a_2 = 1, \mu_k = 1 \setminus k^2$, the parameter $T = 1$ of the time interval $[0, T]$, Galerkin approximation $N = 5$, the parameter of the random effect is the mathematical expectation of 0 and the standard deviation of 2, the domain $D = (0; \pi)$. For each experiment, initial random influence η_{0k} is randomly generated.

In Fig. 1, the graphs represent the function $\eta(s, t), i = 1, 5, 10$. On Fig. 2 shows the execution of the estimate, the lines represent the graphs of the functions $\eta(s, t), i = 1, \dots, 10$, at a fixed point in time; dotted lines show the boundaries of the confidence interval obtained numerically.

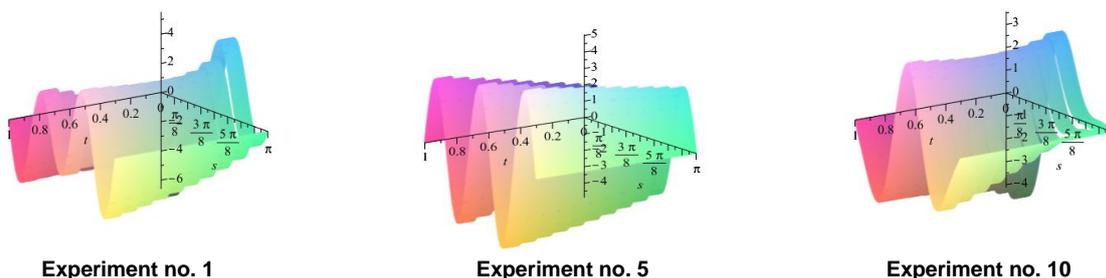


Fig. 1. Graphs of the function $\eta(s, t), i = 1, 5, 10$

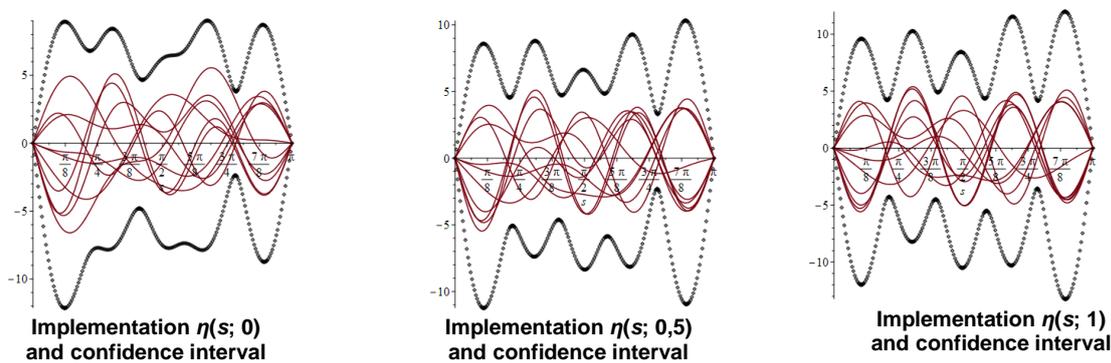


Fig. 2. Implementation $\eta(s; t)$ at a fixed point in time and confidence interval

References

1. Da Prato G., Zabczyk J. *Stochastic Equations in Infinite Dimensions*. Cambridge, Cambridge University Press, 1992. DOI: 10.1017/CBO9780511666223
2. Kovacs M., Larsson S. Introduction to Stochastic Partial Differential Equations. *Proc. New Directions in the Mathematical and Computer Sciences*, National Universities Commission, Abuja, Nigeria, October 8-12, 2007, Publications of the ICMCS, vol. 4, 2008, pp. 159–232.

3. Zamyshlyayeva A.A. Stochastic Incomplete Linear Sobolev Type High-Ordered Equations with Additive White Noise. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2012, no. 40(299), Iss. 14, pp. 73–82.
4. Gliklikh Yu.E. *Global and Stochastic Analysis with Applications to Mathematical Physics*. Springer, London, Dordrecht, Heidelberg, N.-Y., 2011, 436 p. DOI: 10.1007/978-0-85729-163-9
5. Nelson E. *Dynamical Theories of Brownian Motion*. Princeton University Press, 1967, 142 p.
6. Shestakov A.L., Sviridyuk G.A. On the Measurement of the “White Noise”. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2012, no. 27(286), Iss. 13, pp. 99–108. (in Russ.).
7. Shestakov A.L., Sviridyuk G.A. Optimal Measurement of Dynamically Distorted Signals. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2011, no. 17 (234), Iss. 8, pp. 70–75. (in Russ.).
8. Shestakov A.L., Sviridyuk G.A., Hudyakov Yu.V. Dynamic Measurement in Spaces of “Noise”. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Computer Technologies, Automatic Control, Radio Electronics*, 2013, Vol. 13, no. 2, pp. 4–11. (in Russ.).
9. Favini A., Sviridyuk G.A., Zamyshlyayeva A.A. One Class of Sobolev Type Equations of Higher Order with Additive “White Noise”. *Communications on Pure and Applied Analysis*, 2016, Vol. 15, no. 1, pp. 185–196. DOI:10.3934/cpaa.2016.15.185
10. Favini A., Zagrebina S.A., Sviridyuk G.A. Multipoint Initial-Final Value Problems for Dynamical Sobolev-Type Equations in the Space of Noises. *Electronic Journal of Differential Equations*, 2018, Vol. 2018, no. 128, pp. 1–10.
11. Korpusov M.O., Sveshnikov A.G., Three-Dimensional Nonlinear Evolution Equations of Pseudoparabolic Type in Problems of Mathematical Physics. *Comput. Math. Math. Phys.*, 2003, Vol. 43, no. 12, pp. 1765–1797.
12. Manakova N.A., Vasiuchkova K.V. Research of One Mathematical Model of the Distribution of Potentials in a Crystalline Semiconductor. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2019, Vol. 12, no. 2, pp. 150–157. (in Russ.).
13. Perevochikova K.V., Manakova N.A., Gavrilova O.V., Manakov I.M. Nonlinear Filtration Mathematical Model with a Random Showalter–Sidorov Initial Condition. *Journal of Computational and Engineering Mathematics*, 2022, Vol. 9, no. 2, pp. 39–51. DOI: 10.14529/jcem220204

Received April 14, 2023

Information about the authors

Perevozchikova Ksenia Vladimirovna is Senior Lecturer, Department of Mathematical Physics Equations, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, email: perevozchikovakv@susu.ru

АНАЛИЗ И ОБРАБОТКА ИНФОРМАЦИИ ДЛЯ ОДНОЙ СТОХАСТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ СОБОЛЕВСКОГО ТИПА**К.В. Перевозчикова**

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

E-mail: perevozchikovakv@susu.ru

Аннотация. Статья посвящена анализу и обработке информации для стохастической модели, основанной на уравнении распределения потенциалов в кристаллическом полупроводнике с производной Нельсона–Гликлиха и начальным условием Шоултера–Сидорова. Под полупроводником мы будем понимать вещества, обладающие конечной электропроводностью, быстро возрастающей с ростом температуры. Предполагается, что на экспериментальные начальные данные возможно влияние случайных помех, которые приводят к исследованию стохастической модели. В работе приведен анализ полученной стохастической модели распределения потенциалов в кристаллическом полупроводнике. Найдены условия, при которых существует потраекторное существование решений исследуемой модели с начальным условием Шоултера–Сидорова. На базе теоретических результатов разработан алгоритм численного анализа системы и представлена его реализация в виде вычислительного эксперимента, который необходим для дальнейшей обработки информации.

Ключевые слова: стохастическая модель распределения потенциалов в кристаллическом полупроводнике; анализ и обработка информации; производная Нельсона–Гликлиха; уравнения соболевского типа.

Литература

1. Da Prato, G. Stochastic Equations in Infinite Dimensions / G. Da Prato, J. Zabczyk. – Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
2. Kovacs, M. Introduction to Stochastic Partial Differential Equations / M. Kovacs, S. Larsson // Proceedings of New Directions in the Mathematical and Computer Sciences. – 2008. – Vol. 4. – P. 159–232.
3. Замышляева, А.А. Стохастические неполные линейные уравнения соболевского типа высокого порядка с аддитивным белым шумом / А.А. Замышляева // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 40(299), Вып. 14. – С. 73–82.
4. Gliklikh, Yu.E. Global and Stochastic Analysis with Applications to Mathematical Physics / Yu.E. Gliklikh. – Springer, London, Dordrecht, Heidelberg, N.-Y. – 2011. – 436 p.
5. Nelson, E. Dynamical theory of Brownian motion / E. Nelson. – Princeton: Princeton University Press, 1967. – 142 p.
6. Shestakov, A.L. On the Measurement of the “White Noise” / A.L. Shestakov, G.A. Sviridyuk // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – Вып. 13. – С. 99–108.
7. Shestakov, A.L. Optimal Measurement of Dynamically Distorted Signals / A.L. Shestakov, G.A. Sviridyuk // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2011. – № 17(234), Вып. 8. – С. 70–75.
8. Шестаков, А.Л. Динамические измерения в пространствах «шумов» / А.Л. Шестаков, Г.А. Свиридюк, Ю.В. Худяков // Вестник ЮУрГУ. Серия: Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. – 2013. – Т. 13, № 2. – С. 4–11.
9. Favini, A. One Class of Sobolev Type Equations of Higher Order with Additive “White Noise” / A. Favini, G.A. Sviridyuk, A.A. Zamyshlyeva // Communications on Pure and Applied Analysis. – 2016. – Vol. 15, no. 1. – P. 185–196.

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

11. Корпусов, М.О. Трехмерные нелинейные эволюционные уравнения псевдопараболического типа в задачах математической физики / М.О. Корпусов, А.Г. Свешников // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. – 2003. – Т. 43, № 12. – С. 1835–1869.

12. Манакова, Н.А. Исследование одной математической модели распределения потенциалов в кристаллическом полупроводнике / Н.А. Манакова, К.В. Васючкова // *Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование»*. – 2019. – Т. 12, № 2. – С. 150–157.

13. Numerical Algorithm for Finding a Solution to a Nonlinear Filtration Mathematical Model with a Random Showalter–Sidorov Initial Condition / K.V. Perevichikova, N.A. Manakova, O.V. Gavrilova, I.M. Manakov // *Journal of Computational and Engineering Mathematics*. – 2022. – Vol. 9, no. 2. – P. 39–51.

Поступила в редакцию 14 апреля 2023 г.

Сведения об авторах

Перевозчикова Ксения Владимировна – старший преподаватель, кафедра уравнений математической физики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: perevozchikovakv@susu.ru

ПРОСТРАНСТВА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ФОРМ СО СТОХАСТИЧЕСКИМИ КОМПЛЕКСНОЗНАЧНЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ

М.А. Сагадеева, Д.Е. Шафранов

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

E-mail: sagadeevama@susu.ru, shafranovde@susu.ru

Аннотация. Статья посвящена проблеме построения пространств дифференциальных форм с коэффициентами, являющимися стохастическими комплекснозначными K -процессами. Рассматривается полное вероятностное пространство и комплекснозначные случайные величины на измеримых подмножествах этого пространства, и также вводятся непрерывные случайные комплекснозначные K -процессы. Далее строятся пространства дифференциальных форм с коэффициентами в виде таких стохастических комплекснозначных K -процессов.

Ключевые слова: комплекснозначные случайные величины; комплекснозначные стохастические процессы; стохастические K -процессы; дифференциальные формы.

Введение

В челябинской научной школе по неклассическим уравнениям математической физики под руководством профессора Г.А. Свиридюка [1] с давних пор идут исследования решения различных задач для абстрактных и конкретных уравнений соболевского типа. В последнее время особенно интенсивно стали проводиться исследования в области стохастических вариантов этих уравнений [2, 3]. Здесь тоже имеются различные направления, в частности, в работах Д.Е. Шафранова стохастические варианты уравнения рассматриваются в пространствах дифференциальных форм со стохастическими коэффициентами [4, 5]. Для неклассических уравнений с относительно ограниченными операторами и относительно секториальными операторами (см. [1]) рассматривались случайные величины $\xi: \Omega \rightarrow \mathbf{R}$, действующие из полного вероятностного пространства $\Omega = (\Omega, \mathbf{A}, \mathbf{P})$ в действительные числа, но в случае уравнений и систем, содержащих в своей записи комплексную мнимую единицу и редуцируемых к уравнению с относительно радиальным оператором (см. [1]), требуется исследовать разрешимость стохастических вариантов уравнений в пространствах с комплексными числами в основе.

Статья помимо введения и заключения содержит два пункта. В первом пункте вводятся комплекснозначные случайные величины $\xi: \Omega \rightarrow \mathbf{C}$ и строятся комплекснозначные непрерывные стохастические процессы. Описывается процедура построения пространств дифференцируемых в смысле Нельсона–Гликлиха [6] стохастических процессов. Во втором пункте описываются дифференциальные формы с комплекснозначными стохастическими коэффициентами.

1. Пространство стохастических K -процессов

Отождествим $\Omega = (\Omega, \mathbf{A}, \mathbf{P})$ – полное вероятностное пространство с вероятностной мерой \mathbf{A} , ассоциированной σ -алгеброй \mathbf{A} измеримых подмножеств множества Ω , а \mathbf{C} – множество комплексных чисел, наделенное борелевой σ -алгеброй.

Измеримое отображение $\xi: \Omega \rightarrow \mathbf{C}$ называется *случайной величиной*. Множество случайных величин с нулевым математическим ожиданием и конечной дисперсией образует гильбертово пространство $\mathbf{L}_2 = \mathbf{L}_2(\Omega; \mathbf{C}) = \{ \xi: \mathbf{E}\xi = 0, D\xi < r < +\infty \}$ со скалярным произведением $(\xi_1, \xi_2) = \mathbf{E}\xi_1 \bar{\xi}_2$ и нормой $\|\xi\|_{\mathbf{L}_2}^2 = D\xi$. В дальнейшем будут очень важны те случайные величины $\xi \in \mathbf{L}_2(\Omega; \mathbf{C})$, которые имеют нормальное (гауссово) распределение; их назовем *гауссовыми величинами*.

Замечание 1. В \mathbf{L}_2 ортогональность векторов ξ и η (т. е. $(\xi, \eta) = 0$) эквивалентна отсутствию корреляции.

Возьмем множество $I \subset \mathbf{R}$ и рассмотрим два отображения: $f: I \rightarrow \mathbf{L}_2$, которое каждому $t \in I$ ставит в соответствие случайную величину $\xi \in \mathbf{L}_2$, и $g: \mathbf{L}_2 \times \Omega \rightarrow \mathbf{C}$, которое каждой паре (ξ, ω) ставит в соответствие точку $\xi(\omega) \in \mathbf{C}$.

Отображение $\eta: I \times \Omega \rightarrow \mathbf{C}$ (или что то же самое $\eta: I \rightarrow \mathbf{L}_2$, имеющее вид $\eta = \eta(t, \omega) = g(f(t), \omega)$), мы назовем *комплекснозначным стохастическим процессом*.

Стохастический процесс $\eta = \eta(t)$ непрерывен на интервале I , если п. н. (почти наверное) все его траектории непрерывны (т. е. при п. в. (почти всех) $\omega \in \mathbf{A}$ траектории $\eta(\cdot, \omega)$ являются непрерывными функциями).

Множество непрерывных стохастических процессов $\eta: I \rightarrow \mathbf{L}_2$ образует банахово пространство со стандартной sup-нормой, которое мы обозначим символом $C(I; \mathbf{L}_2)$.

Пусть \mathbf{H} есть комплексное сепарабельное гильбертово пространство с ортонормированным базисом $\{\varphi_k\}$, монотонная последовательность $\mathbf{K} = \{\lambda_k\} \subset \mathbf{R}_+$ такова, что $\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 < +\infty$, и последовательность $\{\xi_k = \{\xi_k(\omega)\}\} \subset \mathbf{L}_2$ случайных величин таких, что $\|\xi_k\|_{\mathbf{L}_2} \leq \text{const}$ при всех $k \in \mathbf{N}$.

Построим \mathbf{H} -значную случайную \mathbf{K} -величину

$$\xi(\omega) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \xi_k(\omega) \varphi_k.$$

Пополнение линейной оболочки множества $\{\lambda_k \xi_k \varphi_k\}$ по норме $\|\xi\|_{\mathbf{H}_K \mathbf{L}_2} = \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 \mathbf{D} \xi_k \right)^{1/2}$ называется *пространством \mathbf{H} -значных случайных \mathbf{K} -величин* и обозначается символом $\mathbf{H}_K \mathbf{L}_2$. Как нетрудно видеть, пространство $\mathbf{H}_K \mathbf{L}_2$ – гильбертово, причем построенная выше случайная \mathbf{K} -величина $\xi = \xi(\omega) \in \mathbf{H}_K \mathbf{L}_2$.

Отображение $\eta: I \rightarrow \mathbf{H}_K \mathbf{L}_2$, заданное формулой

$$\eta(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \eta_k(t) \varphi_k,$$

где $\{\eta_k(t)\} \subset C(I; \mathbf{L}_2)$, называется *непрерывным \mathbf{H} -значным стохастическим \mathbf{K} -процессом*, если ряд в этом равенстве сходится равномерно по норме $\|\cdot\|_{\mathbf{H}_K \mathbf{L}_2}$ на любом компакте в I и траектории процесса $\eta = \eta(t)$ почти наверное непрерывны.

\mathbf{H} -значный стохастический \mathbf{K} -процесс назовем *дифференцируемым по Нельсону–Гликлиху*, если ряд в выражении $\overset{\circ}{\eta}(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \overset{\circ}{\eta}_k(t) \varphi_k$

сходится равномерно по норме $\|\cdot\|_{\mathbf{H}_K \mathbf{L}_2}$ на любом компакте в I и траектории процесса $\overset{\circ}{\eta} = \overset{\circ}{\eta}(t)$

почти наверное непрерывны. Здесь $\overset{\circ}{\eta}_k(t)$ есть производная Нельсона–Гликлиха стохастического процесса и $\eta_k: I \rightarrow \mathbf{L}_2$. Через $C(I; \mathbf{H}_K \mathbf{L}_2)$ обозначим пространство непрерывных \mathbf{H} -значных стохастических \mathbf{K} -процессов и аналогично через $C^\ell(I; \mathbf{H}_K \mathbf{L}_2)$ обозначим пространство \mathbf{H} -значных стохастических \mathbf{K} -процессов, непрерывно дифференцируемых по Нельсону–Гликлиху до порядка $\ell \in \mathbf{N}$ включительно.

Пусть теперь \mathbf{U} и \mathbf{F} есть комплексные сепарабельные гильбертовы пространства с ортонормированными базисами $\{\varphi_k\}$ и $\{\psi_k\}$ соответственно. Символами $\mathbf{U}_K \mathbf{L}_2$ и $\mathbf{F}_K \mathbf{L}_2$ обозначим гильбертовы пространства, которые есть пополнение линейной оболочки *случайных \mathbf{K} -величин*

$\xi(\omega) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \xi_k \varphi_k$, $\xi_k \in \mathbf{L}_2$ и $\zeta(\omega) = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k \zeta_k \psi_k$, $\zeta_k \in \mathbf{L}_2$ по нормам $\|\eta\|_{\mathbf{U}_K \mathbf{L}_2}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \mathbf{D}\eta_k$ и $\|\chi\|_{\mathbf{F}_K \mathbf{L}_2}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k \mathbf{D}\chi_k$ соответственно.

Заметим, что в разных пространствах ($\mathbf{U}_K \mathbf{L}_2$ и $\mathbf{F}_K \mathbf{L}_2$) последовательность \mathbf{K} может быть разной ($\mathbf{K} = \{\lambda_k\}$ в $\mathbf{U}_K \mathbf{L}_2$ и $\mathbf{K} = \{\mu_k\}$ в $\mathbf{F}_K \mathbf{L}_2$), однако все последовательности, отмеченные символом \mathbf{K} , должны быть монотонными и суммируемыми с квадратом.

Все результаты, вообще говоря, будут верны при разных последовательностях $\{\lambda_k\}$ и $\{\mu_k\}$, и простоты ради мы ограничимся случаем $\lambda_k = \mu_k$.

2. Пространство дифференциальных форм с комплекснозначными стохастическими коэффициентами

Следуя работе Р. Нарасимхана, хаусдорфово топологическое пространство V называется комплексным многообразием комплексной размерности n , если задано семейство $\{(U_i, \varphi_i) : i \in \mathcal{J}\}$, где φ_i – гомеоморфизм U_i на открытое множество в \mathbf{C}^n и $\varphi_j \circ \varphi_i^{-1}$ голоморфны в $\varphi_i(U_i \cap U_j)$ для всех i, j . Комплексно аналитическая структура определяется аналогично дифференцируемой структуре в вещественном случае. Также обозначим через $n = \dim V = \dim_{\mathbf{C}} V$ (комплексную) размерность V .

Далее если V есть C^k -многообразие (дифференцируемое до k порядка включительно), U открытое подмножество V , то отображение $f : U \rightarrow \mathbf{R}$ называется C^r -функцией в U , если для любой системы координат (W, ψ) на V такой, что $W \subset U$, функция $f \circ \psi^{-1} : \psi(W) \rightarrow \mathbf{R}$ принадлежит классу C^r ($0 \leq r \leq k$). Множество C^r -функций на V обозначается $C^r(V)$. Носителем C^r -функций f на V называется замыкание в V множества $\{x \in V : f(x) \neq 0\}$. Голоморфные функции определяются аналогично.

Достаточно просто определяется диффеоморфизм и изоморфизм двух многообразий V и V' в случае \mathbf{R} . А в комплексном случае вводится голоморфный (= комплексно аналитический) изоморфизм.

Дифференциал в точке $a \in V$ для комплексной C^k -функции f является элементом пространства $T_a^*(V) \otimes \mathbf{C}$. Для любого $X \in T_a(V)$ и для любой комплексной функции f значение $(df)_a(X)$ есть комплексное число. Более того, если запишем $f = f_1 + if_2$, где f_1, f_2 – действительные C^k -функции, то

$$(df)_a(X) = (df_1)_a(X) + i(df_2)_a(X).$$

Зачастую вместо пространства $T_a(V), T_a^*(V)$ рассматриваются $T(V) \otimes \mathbf{C}, T_a^*(V) \otimes \mathbf{C}$ и оперируют с комплекснозначными числами.

Пусть далее V – комплексное многообразие комплексной размерности n и $a \in V$. Пусть (U, φ) – система координат, $a \in U$; тогда φ – голоморфный изоморфизм U на некоторое открытое множество в \mathbf{C}^n . Запишем $\varphi(z) = (z_1, z_2, \dots, z_n)$, где $z \in U, z_j = x_j + iy_j, x_j, y_j$ – действительные функции класса C^∞ . Касательное пространство $T_a(V)$, где V рассматривается как действительное C^∞ -многообразие размерности $2n$, имеет естественную структуру комплексного векторного пространства ($\mathbf{C}^n \cong \mathbf{R}^{2n}$) относительно изоморфизма

$$(z_1, z_2, \dots, z_n) \mapsto (x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_n, y_n).$$

Отображение $X \mapsto ((dx_1)_a(X), (dy_1)_a(X), \dots, (dx_n)_a(X), (dy_n)_a(X))$ является \mathbf{R} -изоморфизмом $T_a(V) \mapsto \mathbf{R}^{2n}$, а отображение $X \mapsto ((dz_1)_a(X), (dz_2)_a(X), \dots, (dz_n)_a(X))$ является \mathbf{R} -изоморфизмом $T_a(V) \mapsto \mathbf{C}^n$ и одновременно определяет на $T_a(V)$ структуру \mathbf{C} -векторного пространства.

Если V, W – комплексные многообразия и $f: V \rightarrow W$ – голоморфное отображение, то $f_*: T_a(V) \rightarrow T_{f(a)}(W)$ является \mathbf{C} -линейным отображением.

Комплекснозначной дифференциальной формой $\varpi(a)$ типа (p, q) будет

$$\varpi(a) = \sum_{\substack{j_1 < j_2 < \dots < j_p \\ k_1 < k_2 < \dots < k_q}} \varpi_{JL} dz_J \wedge d\bar{z}_L, \quad J = (j_1, j_2, \dots, j_p), \quad K = (k_1, k_2, \dots, k_q),$$

где $dz_J \wedge d\bar{z}_L = dz_{j_1} \wedge dz_{j_2} \wedge \dots \wedge dz_{j_p} \wedge d\bar{z}_{k_1} \wedge d\bar{z}_{k_2} \wedge \dots \wedge d\bar{z}_{k_q}$.

Мы рассматриваем пространства дифференциальных r -форм ($r = p + q$), в которых добавляется зависимость коэффициентов от времени t при действии на r -форму группой или полугруппой операторов и также в случае стохастических коэффициентов зависимость от $\omega \in \Omega$.

Окончательно получаем дифференциальную r форму $\varpi(a)$ типа (p, q) вида

$$\varpi(a, t, \omega) = \sum_{\substack{j_1 < j_2 < \dots < j_p \\ k_1 < k_2 < \dots < k_q}} \varpi_{JL}(t, \omega) dz_J \wedge d\bar{z}_L, \quad J = (j_1, j_2, \dots, j_p), \quad K = (k_1, k_2, \dots, k_q),$$

где $dz_J \wedge d\bar{z}_L = dz_{j_1} \wedge dz_{j_2} \wedge \dots \wedge dz_{j_p} \wedge d\bar{z}_{k_1} \wedge d\bar{z}_{k_2} \wedge \dots \wedge d\bar{z}_{k_q}$

Заключение. В дальнейшем планируется проведение вычислительных экспериментов для стохастических вариантов уравнений Шредингера и/или Гинзбурга–Ландау, содержащих мнимую единицу и, следовательно, требующих поиска решений в комплекснозначных пространствах \mathbf{K} -процессов и в пространствах дифференциальных форм со стохастическими комплекснозначными коэффициентами, являющихся \mathbf{K} -процессами.

Литература

1. Свиридюк, Г.А. К общей теории полугрупп операторов / Г.А. Свиридюк // Успехи мат. наук. – 1994. – Т. 49, № 4(298). – С. 47–74.
2. Свиридюк, Г.А. Динамические модели соболевского типа с условием Шоултера–Сидорова и аддитивными «шумами» / Г.А. Свиридюк, Н.А. Манакова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2014. – Т. 7, № 1. – С. 90–103.
3. Favini, A. Linear Sobolev Type Equations with Relatively P-Radial Operators in Space of «Noises» / A. Favini, G.A. Sviridyuk, M. Sagadeeva // Mediterranean Journal of Mathematics. – 2016. – Т. 13, № 6. – С. 4607–4621.
4. Shafranov, D.E. The Barenblatt–Zhel'tov–Kochina Model with the Showalter–Sidorov Condition and Additive “White Noise” in Spaces of Differential Forms on Riemannian Manifolds without Boundary / D.E. Shafranov, O.G. Kitaeva // Global and Stochastic Analysis. – 2018. – Vol. 5, no. 2. – P. 145–159.
5. Shafranov, D.E. Degenerate Holomorphic Semigroups of Operators in Spaces of \mathbf{K} -“Noises” on Riemannian Manifolds / D.E. Shafranov, G.A. Sviridyuk // Semigroups of Operators: Theory and Applications SOTA-2018, Springer Proceedings in Mathematics and Statistics. – 2020. – P. 279–292.
6. Gliklikh, Yu.E. Global and Stochastic Analysis with Applications to Mathematical Physics / Yu.E. Gliklikh. – London, Dordrecht, Heidelberg, N.Y., Springer, 2011. – 436 p.

Поступила в редакцию 24 апреля 2023 г.

Сведения об авторах

Сагадеева Минзиля Алмасовна – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры математического и компьютерного моделирования, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Российская Федерация, e-mail: sagadeevama@susu.ru

Шафранов Дмитрий Евгеньевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры математического и компьютерного моделирования, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Российская Федерация, e-mail: shafranovde@susu.ru

MSC 93E03

DOI: 10.14529/mmph230203

SPACES OF DIFFERENTIAL FORMS WITH STOCHASTIC COMPLEX-VALUED COEFFICIENTS

M.A. Sagadeeva, D.E. Shafranov

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: sagadeevama@susu.ru, shafranovde@susu.ru

Abstract. This article investigates the construction of spaces of differential forms with coefficients which are stochastic complex-valued K -processes. A complete probability space and complex-valued random variables on measurable subsets of this space are considered, and continuous random complex-valued K -processes are also introduced. Next, we construct spaces of differential forms with coefficients in the form of such stochastic complex-valued K -processes.

Keywords: *complex-valued random variables; complex-valued stochastic processes; stochastic K -processes; differential forms.*

References

1. Sviridyuk G.A. On the General Theory of Operator Semigroups. *Russian Mathematical Surveys*, 1994, Vol. 49, no 4, pp. 45–74. DOI: 10.1070/RM1994v049n04ABEH002390
2. Sviridyuk G.A., Manakova N.A. The Dynamical Models of Sobolev Type with Showalter–Sidorov Condition and Additive “Noise”. *Bulletin of the South Ural State University. Series “Mathematical Modelling, Programming and Computer Software”*, 2014, Vol. 7, no. 1, pp. 90–103. (in Russ.). DOI: 10.14529/mmp140108
3. Favini A., Sviridyuk G.A., Sagadeeva M. Linear Sobolev Type Equations with Relatively P -Radial Operators in Space of “Noises”. *Mediterranean Journal of Mathematics*, 2016, Vol. 13, no 6, pp. 4607–4621. DOI: 10.1007/s00009-016-0765-x
4. Shafranov D.E., Kitaeva O.G. The Barenblatt–Zheltov–Kochina Model with the Showalter–Sidorov Condition and Additive “White Noise” in Spaces of Differential Forms on Riemannian Manifolds without Boundary. *Global and Stochastic Analysis*, 2018, Vol. 5, no. 2, pp. 145–159.
5. Kitaeva O.G., Shafranov D.E., Sviridyuk G.A. Degenerate Holomorphic Semigroups of Operators in Spaces of K -“Noises” on Riemannian manifolds. In: Banasiak, J., Bobrowski, A., Lachowicz, M., Tomilov, Y. (eds) *Semigroups of Operators – Theory and Applications*. SOTA 2018. Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, Vol 325. Springer, Cham., 2020, pp. 279–292. DOI: 10.1007/978-3-030-46079-2_16
6. Gliklikh Yu.E. *Global and Stochastic Analysis with Applications to Mathematical Physics*. London, Dordrecht, Heidelberg, N.Y., Springer, 2011, 436 p.

Received April 24, 2023

Information about the authors

Sagadeeva Minzilya Almasovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Mathematical and Computer Modelling Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: sagadeevama@susu.ru

Shafranov Dmitriy Evgen'evich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Mathematical and Computer Modelling Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: shafranovde@susu.ru

МАССИВНЫЕ МНОЖЕСТВА, ПОРОЖДЁННЫЕ ПОЛУЛИНЕЙНЫМИ ЭЛЛИПТИЧЕСКИМИ ОПЕРАТОРАМИ НА НЕКОМПАКТНЫХ РИМАНОВЫХ МНОГООБРАЗИЯХ

В.В. Филатов

Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Российская Федерация

E-mail: filatov@volsu.ru

Аннотация. Одним из истоков тематики данного исследования является классификационная теория некомпактных римановых поверхностей. Хорошо известно, что на поверхностях параболического типа всякая ограниченная снизу супергармоническая функция является тождественной постоянной. В свою очередь поверхности гиперболического типа содержат нетривиальные супергармонические функции. Данное свойство поверхностей параболического типа легло в основу определений многообразий параболического типа размерности выше двух.

Классификационная теория римановых многообразий имеет прямое отношение к теоремам типа Лиувилля, утверждающих тривиальность ограниченных решений эллиптических уравнений. Высокую эффективность в данной тематике показала емкостная техника, развиваемая в работах А.А. Григорьяна, А.Г. Лосева, Е.А. Мазепы и других исследователей. В частности, были получены оценки размерностей ограниченных гармонических функций и решений стационарного уравнения Шредингера на некомпактных римановых многообразиях в терминах массивных множеств.

Исследуются свойства массивных множеств, порожденных полулинейным эллиптическим оператором. Удалось доказать, что свойство массивности сохраняется при вариациях потенциала. Также получено необходимое условие существования нетривиальных ограниченных решений полулинейного уравнения.

Ключевые слова: полулинейное уравнение; интеграл энергии; массивное множество; теорема Лиувилля.

Введение

Данная работа посвящена исследованию решений полулинейных эллиптических уравнений вида

$$Lu \equiv \Delta u - u\varphi(|u|) = 0 \quad (1)$$

на некомпактных римановых многообразиях. Предполагается, что $\varphi(\xi) \geq 0$ – гладкая, монотонно невозрастающая функция.

Пусть M – произвольное некомпактное риманово многообразие с пустым краем. Сформулируем понятие L -массивных множеств введённое в работе [1]. Говорят, что множество $\Omega \subset M$ является L -массивным, если на M существует v -нетривиальное субрешение уравнения (1), такое, что $v|_{M \setminus \Omega} = 0, 0 \leq v \leq 1$. Если, кроме того, выполнено

$$D(M, v, \varphi) = \int_M |\Delta v|^2 + 2 \left(\int_0^{|v|} t\varphi(t) dt \right) dx < \infty,$$

то такое множество называют LD -массивным. Такую функцию v называют допустимой для Ω .

Сформулируем некоторые уже известные результаты, полученные с помощью данного понятия. В случае стационарного уравнения Шредингера

$$Lu \equiv \Delta u - q(x)u = 0$$

в работах [2, 3] доказано, что размерность пространств ограниченных решений стационарного уравнения Шредингера (с конечным интегралом энергии) не менее числа попарно непересекающихся L -массивных (LD -массивных) множеств.

Приведём результат, полученный Е.А. Мазепой [4], для лучшего понимания дальнейшего изложения. Пусть $0 \leq \varphi_1(\xi) \leq A\varphi(\xi)$, где $A = \text{const} > 0$, $\varphi_1(\xi) \neq 0$ при $\xi \geq 0$. Рассмотрим также уравнение $L_1 u \equiv \Delta u - u\varphi_1(|u|) = 0$. Тогда если всякое ограниченное решение уравнения $L_1 u = 0$ есть тождественный ноль, то и всякое ограниченное решение уравнения $Lu = 0$ будет являться тождественным нулём. Заметим, что объединяя теоремы, полученные в работах [1, 4], можно получить следующее утверждение: если на M существует L -массивное множество, то на M существует L_1 -массивное множество. Однако данное утверждение удалось существенно уточнить.

Связь между существованием массивных множеств при вариациях потенциала

Основным результатом данной статьи является следующая теорема.

Теорема 1. Всякое LD -массивное множество является L_1D -массивным.

Доказательство. 1) Рассмотрим случай $0 < A \leq 1$. Пусть Ω – LD -массивное множество, v – допустимая функция для Ω . Покажем, что в данном случае Ω будет являться L_1D -массивным множеством. Рассмотрим $L_1 v$.

$$\begin{aligned} L_1 v &= \Delta v - v\varphi_1(v) \geq v\varphi(v) - v\varphi_1(v)v(\varphi(v) - \varphi_1(v)) = v \left(\frac{A\varphi(v)}{A} - \varphi_1(v) \right) \geq \\ &\geq v \left(\frac{\varphi_1(v)}{A} - \varphi_1(v) \right) = v\varphi_1(v) \left(\frac{1}{A} - 1 \right). \end{aligned}$$

Так как $0 < A \leq 1$ то $v\varphi_1(v) \left(\frac{1}{A} - 1 \right) \geq 0$, и, следовательно, $L_1 v \geq 0$. Несложно показать (см. [1, 4]), что, можно считать, что $v \in C^2(\Omega)$, учитывая, что $L_1 v \geq 0$ в Ω , то v является субрешением в Ω . Таким образом, Ω является L_1 -массивным множеством. Рассмотрим $D(M, v, \varphi_1)$.

$$D(M, v, \varphi_1) = \int_M |\nabla v|^2 + 2 \left(\int_0^v t\varphi_1(t) dt \right) dx \leq \int_M |\nabla v|^2 + 2 \left(\int_0^v t\varphi(t) dt \right) dx < \infty.$$

Таким образом Ω есть L_1D массивное множество и первый случай рассмотрен.

2) Пусть теперь $A > 1$. Пусть на M существует Ω – LD – массивное множество, v^* – допустимая для Ω функция. Построим v – нетривиальное ограниченное $0 \leq v \leq 1$ решение уравнения $Lv = 0$ на M с конечным интегралом энергии $D(M, v, \varphi)$. Пусть $\{B_k\}_{k=1}^\infty$ – гладкое исчерпание M , то есть последовательность предкомпактных открытых множеств, таких, что $\overline{B_k} \subset B_{k+1}, \bigcup_{k=1}^\infty B_k = M$. Рассмотрим следующие решения задач Дирихле в B_k :

$$\begin{cases} \Delta v_k - v_k \varphi(v_k) = 0, \\ v_k|_{\partial B_k} = v|_{\partial B_k}^*. \end{cases}$$

В силу принципа максимума (см. [4]) получаем $0 \leq \sup_{B_k} v_k \leq \sup_M v^* \leq 1$. Учитывая, что v^* – нетривиальное субрешение уравнения $Lu = 0$, то с помощью принципа сравнения (см. [4]) мы получаем $v_k^* \geq v^*$ в B_k . Следовательно, мы делаем вывод, что на семейство функций $\{v_k\}_{k=1}^\infty$ компактно в классе $C^{2,\alpha}(B)$ (см. [4]). Из последнего следует, что существует подпоследовательность последовательности $\{v_k\}_{k=1}^\infty$, сходящаяся к предельной функции v в норме $C^2(B)$. Применяя переобозначения, мы будем считать, что $\{v_k\}_{k=1}^\infty$ и есть сходящаяся подпоследовательность. Всюду далее мы будем применять аналогичные рассуждения. Таким образом, $\lim_{k \rightarrow \infty} v_k = v$ – нетривиальное решение уравнения $Lv = 0$, такое, что $0 \leq v^* \leq v \leq 1$, очевидно, что последние неравен-

ства выполнены, в частности, на Ω . Сходимость интеграла энергии $D(M, v, \varphi)$ следует из принципа Дирихле (см. [1]) и сходимости интеграла энергии $D(M, v^*, \varphi)$.

Обозначим $\varphi_2(u) \equiv A\varphi(u)$ и $L_3 u = \Delta u - u\varphi_2(u)$. Покажем теперь, что на M существует L_3 -массивное множество. Рассмотрим решения задач Дирихле в $B_k \cap \Omega$.

$$\begin{cases} \Delta u_k - u_k \varphi_2(u_k) = 0, \\ u_k|_{\partial(B_k \cap \Omega)} = u^*|_{\partial(B_k \cap \Omega)}. \end{cases}$$

В силу принципа максимума выполнено $0 \leq u_k \leq \sup_{\Omega} v \leq 1$. Следовательно, на Ω существует предел $\lim_{k \rightarrow \infty} u_k = u^*$. Из оценок $\Delta u_k = A u_k \varphi(u_k) \geq u_k \varphi(u_k)$ получаем, что $u_k \varphi(u_k) - \Delta u_k \leq 0$, что эквивалентно $\Delta u_k - u_k \varphi(u_k) \geq 0$. Последнее означает, что u_k – субрешение уравнения $Lu = 0$, и, таким образом, в $B_k \cap \Omega$ в силу принципа сравнения выполнено $u_k \leq v$ и как следствие $u^* \leq v$. Покажем, что $D(\Omega, u^*, \varphi_2) < \infty$. Справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned} D(B_k \cap \Omega, u_k, \varphi_2) &= D(B_k \cap \Omega, u_k, A\varphi) = \int_{B_k \cap \Omega} |\nabla u_k|^2 + 2 \left(\int_0^{u_k} A t \varphi(|t|) dt \right) dx \leq \\ &\leq \int_{B_k \cap \Omega} |\nabla v|^2 + 2 \left(\int_0^v A t \varphi(|t|) dt \right) dx \leq A \int_M |\nabla v|^2 + 2 \left(\int_0^v t \varphi(|t|) dt \right) dx < \infty. \end{aligned}$$

Переходя к пределу при $k \rightarrow \infty$, получаем нужное.

Покажем нетривиальность u^* . Пусть $w_k, \bar{v}_k, \bar{u}_k$ – решения следующих задач Дирихле в $B_k \cap \Omega$:

$$\begin{aligned} \Delta w_k &= 0, \Delta \bar{v}_k = -v\varphi(v), \Delta \bar{u}_k = -A u_k \varphi(u_k), \\ w_k|_{\partial(B_k \cap \Omega)} &= v|_{\partial(B_k \cap \Omega)}, \bar{v}_k|_{\partial(B_k \cap \Omega)} = 0, \bar{u}_k|_{\partial(B_k \cap \Omega)} = 0. \end{aligned}$$

Ясно, что $w_k - \bar{u}_k = u_k, w_k - \bar{v}_k = v$ и $v \leq w_k \leq \sup_M v, \bar{u}_k \geq 0, \bar{v}_k \geq 0$. Покажем, что $\bar{u}_k \leq A \bar{v}_k$. Действительно,

$$\Delta(A \bar{v}_k) = -A v \varphi(v) \leq -A u_k \varphi(u_k) = \Delta \bar{u}_k,$$

тогда из принципа сравнения получаем $A \bar{v}_k \geq \bar{u}_k$. Пусть x_0 – точка, в которой $v(x_0) > \sup_{\Omega} v - \xi$,

где ξ – достаточно малая положительная постоянная. Тогда

$$\begin{aligned} w_k(x_0) &> \sup_{\Omega} v - \xi, \\ \bar{v}_k(x_0) &= w_k(x_0) - v(x_0) \leq \sup_{\Omega} v - v(x_0) < \xi, \\ \bar{u}_k(x_0) &\leq A \xi, u_k(x_0) = w_k(x_0) - \bar{u}_k(x_0) > \sup_{\Omega} v - (A+1)\xi. \end{aligned}$$

Отсюда при $k \rightarrow \infty$ получаем $u(x_0) \geq \sup_{\Omega} v - (A+1)\xi > 0$ при достаточно малом ξ . Следовательно, u^* – нетривиальное, ограниченное решение уравнения $\Delta u^* - u^* \varphi_2(u^*) = 0$ на Ω с конечным интегралом энергии $D(\Omega, u^*, \varphi_2) < \infty$.

Пусть $\sup u^* = a > 0$. Несложно показать, что L_2D -массивным множеством будет, например, множество $\Omega \supset \Omega^* = \{x : u^* > \frac{a}{2}\}$ с допустимой функцией $\left(u^* - \frac{a}{2}\right)_+$, где f_+ – положительная срезка. В силу доказанного пункта 1) заключаем, что Ω^* является L_1D -массивным множеством. Учитывая, что если у множества есть L_1D -массивное подмножество, то оно само является L_1D -массивным, получаем нужное.

Необходимое условие лиувиллева свойства ограниченных решений полулинейного уравнения

Для формулировки второго результата работы введём необходимые понятия. Пусть M – произвольное некомпактное риманово многообразие, B – компакт в M , $\{B_k\}_{k=1}^\infty$ – гладкое исчерпание M . Рассмотрим решения задач Дирихле в $B_k \setminus B$:

$$Lh_k = \Delta h_k - h_k \varphi(|h_k|) = 0, h_k|_{\partial B} = 1, h_k|_{\partial B_k} = 1,$$

$$Ls_k = \Delta s_k - s_k \varphi(|s_k|) = 0, s_k|_{\partial B} = 1, s_k|_{\partial B_k} = 1,$$

$$Lu_k = \Delta u_k - h_k \varphi(|u_k|) = 0, u_k|_{\partial B} = 1, u_k|_{\partial B_k} = 1.$$

Несложно показать с помощью принципа сравнения, что каждая из последовательностей будет иметь предел. Предельную функцию $\lim_{k \rightarrow \infty} h_k = h_B$ называют функцией Лиувилля внешности компакта B , порожденную оператором L . Предельную функцию $\lim_{k \rightarrow \infty} s_k = s_B$ называют ёмкостным потенциалом внешности компакта B , $\lim_{k \rightarrow \infty} u_k = u_B$ называют гармонической мерой внешности компакта B .

Рассмотрим решения задач Дирихле в B_k

$$\begin{cases} LH_k = \Delta H_k - H_k \varphi(|H_k|) = 0 \\ H_k|_{\partial B_k} = 1 \end{cases}.$$

Предельную функцию $\lim_{k \rightarrow \infty} H_k = H$ называют функцией Лиувилля многообразия M , порожденную оператором L . Отметим две теоремы, доказанные в работе [1]. Первая теорема утверждает, что на многообразии M всякое ограниченное решение уравнения $Lu = 0$ является тождественным нулём тогда и только тогда, когда функция Лиувилля $H \equiv 0$. Вторая теорема утверждает, что функция Лиувилля $H \equiv 0$ тогда и только тогда, когда всякая гармоническая мера $u_B \equiv 0$.

В текущей работе получены необходимое условие тривиальности функции Лиувилля многообразия M , порожденной оператором L . Перейдём к точной формулировке результата.

Теорема 2. Если функция Лиувилля $H \equiv 0$ то для всякого компакта B выполнено $h_B \equiv s_B$.

Доказательство. Рассмотрим $L(h_k - s_k)$. Справедливы следующие равенства

$$\begin{aligned} L(h_k - s_k) &= \Delta(h_k - s_k) - (h_k - s_k)\varphi(h_k - s_k) = \Delta h_k - \Delta s_k - h_k\varphi(h_k - s_k) + s_k\varphi(h_k - s_k) = \\ &= (\Delta h_k - h_k\varphi(h_k)) - (\Delta s_k - s_k\varphi(s_k)) + h_k\varphi(h_k) - s_k\varphi(s_k) - h_k\varphi(h_k - s_k) + s_k\varphi(h_k - s_k) = \\ &= h_k\varphi(h_k) - s_k\varphi(s_k) - h_k\varphi(h_k - s_k) + s_k\varphi(h_k - s_k). \end{aligned}$$

Оценим снизу $h_k\varphi(h_k)$:

$$\begin{aligned} h_k\varphi(h_k) &= (s_k + (h_k - s_k))\varphi(s_k + (h_k - s_k)) = s_k\varphi(s_k + (h_k - s_k)) + (h_k - s_k)\varphi(s_k + (h_k - s_k)) \\ &\geq s_k\varphi(s_k) + (h_k - s_k)\varphi(h_k - s_k). \end{aligned}$$

Из последнего следует, что $L(h_k - s_k) \geq 0$ и, как следствие, $(h_k - s_k)$ – субрешение полулинейного уравнения, такое, что $(h_k - s_k)|_{\partial B} = 0, (h_k - s_k)|_{\partial B} = 1$, следовательно, в силу принципа сравнения выполнено $u_k \geq (h_k - s_k) \geq 0$ в $B_k \setminus B$. Учитывая, что $\lim_{k \rightarrow \infty} u_k = 0$, делаем вывод, что $h_B = s_B$.

Замечание 1. Заметим, что в работе [1] были получены необходимые и достаточные условия тривиальности функции Лиувилля многообразия M , порождённой оператором Шредингера:

$$Lu = \Delta u - q(x)u = 0.$$

А именно, доказано, что H -функция Лиувилля, порождённая оператором Шредингера, есть тождественный ноль тогда и только тогда, когда для всякого компакта $B \subset M$ его ёмкостный потенциал совпадает с функцией Лиувилля внешности компакта, то есть $h_B \equiv s_B$.

Замечание 2. Вообще говоря, данная теорема справедлива и для более общих полулинейных эллиптических уравнений вида

$$Lu \equiv \Delta u - g(x, u) = 0.$$

Предполагается, что функция $g: M \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ является липшицевой и обладает следующими тремя свойствами:

- $g(x, -\xi) = -g(x, \xi)$;
- $g(x, \xi_1) \geq g(x, \xi_2), \forall \xi_1, \xi_2 : \xi_1 > \xi_2$;
- $g(x, a) - g(x, b) \geq g(x, a - b), \forall a, b : 1 > a \geq b > 0$.

Несложно показать, что при данных условиях на функцию g разность $h_k - s_k$ будет являться субрешением и, как следствие, получить необходимый результат.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-31-90110.

Литература

1. Losev, A.G. Liouville Type Theorems for Solutions of Semilinear Equations on Non-Compact Riemannian Manifolds // A.G. Losev, V.V. Filatov // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. – 2021. – Т. 31, № 4 – С. 629–639.
2. Григорьян, А.А. О размерности пространств решений стационарного уравнения Шредингера на некомпактных римановых многообразиях // А.А. Григорьян, А. Г. Лосев // Математическая физика и компьютерное моделирование. – 2017. – Т. 20, № 3. – С. 34–42.
3. Losev A. G. Dimensions of Solution Spaces of the Schrodinger Equation with Finite Dirichlet Integral on Non-compact Riemannian Manifolds // A.G. Losev, V.V. Filatov // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2019. – Т. 40. – С. 1363–1370.
4. Мазепа, Е.А. Краевые задачи и лиувиллевы теоремы для полулинейных эллиптических уравнений на римановых многообразиях // Е.А. Мазепа // Известия высших учебных заведений. Математика. – 2005. – № 3. – С. 59–66.

Поступила в редакцию 8 февраля 2023 г.

Сведения об авторах

Филатов Владимир Владимирович – ассистент, кафедра математического анализа и теории функций, Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Российская Федерация, e-mail: vladimfilatov@yandex.ru

**MASSIVE SETS PRODUCED BY SEMILINEAR ELLIPTIC OPERATORS
ON NON-COMPACT RIEMANN MANIFOLDS****V.V. Filatov**Volgograd State University, Volgograd, Russian Federation
E-mail: filatov@volsu.ru

Abstract. One of the origins of the topic of this study is the classification theory of non-compact Riemannian surfaces. It is well known that on parabolic surfaces, any superharmonic functions bounded from below is the identical constant. Hyperbolic surfaces contain nontrivial superharmonic functions. This distinct property of parabolic surfaces form the basis for the definitions of parabolic manifolds with dimensions greater than two.

The classification theory of Riemannian manifolds is directly related to Liouville-type theorems which assert the triviality of bounded solutions of elliptic equations. High efficiency in this topic was shown by the capacitive technique developed in the works of Grigoryan, Losev, Mazepa, and others. In particular, estimates were obtained for the dimensions of bounded harmonic functions and solutions of the stationary Schrödinger equation on noncompact Riemannian manifolds in terms of massive sets. In this paper, we study the properties of massive sets generated by a semilinear elliptic operator. It was possible to prove that the property of massiveness is preserved under variations of the potential.

The current work generalizes or strengthens the results of Mazepa. A necessary condition for the existence of nontrivial bounded solutions of a semilinear equation is also obtained.

Keywords: semilinear equation; energy integral; massive set; Liouville's theorem.

References

1. Losev A.G., Filatov V.V. Liouville Type Theorems for Solutions of Semilinear Equations on Non-Compact Riemannian Manifolds. *Vestn. Udmurtsk. Univ. Mat. Mekh. Komp. Nauki*, 2021, Vol. 31, no. 4, pp. 629–639. DOI: 10.35634/vm210407
2. Grigor'yan A.A., Losev A.G. Dimension of Spaces of Solutions of the Schrodinger Equation on Noncompact Riemannian Manifolds. *Mathematical Physics and Computer Simulation*, 2017, Vol. 20, Iss. 3, pp. 34–42. DOI: 10.15688/mpcm.jvolsu.2017.3.3
3. Losev A.G., Filatov V.V. Dimensions of Solution Spaces of the Schrodinger Equation with Finite Dirichlet Integral on Non-compact Riemannian Manifolds. *Lobachevskii Journal of Mathematics*, 2019, Vol. 40, pp. 1363–1370. DOI: 10.1134/s1995080219090142
4. Mazepa E.A. Boundary value Problems and Liouville Theorems for Semilinear Elliptic Equations on Riemannian Manifolds. *Russian Math. (Iz. VUZ)*, 2005, Vol. 49, Iss. 3, pp. 56–62.

Received February 8, 2023

Information about the author

Filatov Vladimir Vladimirovich is Assistant, Department of Mathematical Analysis and Theory of Functions, Volgograd State University, Volgograd, Russian Federation, e-mail: vladimfilatov@yandex.ru

ПОЛУАНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ В ПЕРЕМЕННЫХ ЭЙЛЕРА

М.С. Жарылканова, Н.Л. Клиначева, А.П. Яловец

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

E-mail: klinachevanl@susu.ru

Аннотация. Представлен полуаналитический метод решения системы уравнений газовой динамики в эйлеровых координатах. Поскольку конечными разностями заменяются только пространственные производные, система уравнений газовой динамики сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений на пространственной сетке. Приближенное аналитическое решение данной системы дифференциальных уравнений для малого временного интервала применяется для описания динамики газа во всем требуемом временном интервале. Проведена верификация на одномерных тестовых задачах о распаде произвольного разрыва и распространении стационарных ударных волн различной интенсивности. Для сравнения одномерных задач приведено решение тестовых задач простым в реализации базовым методом крупных частиц. Показано, что полуаналитический метод обладает высокой точностью вычислений, а также является наиболее универсальным методом для расчета прикладных задач.

Ключевые слова: полуаналитический метод; метод крупных частиц; ударная волна; распад произвольного разрыва.

Введение

В работе [1] описан метод решения системы уравнений механики сплошной среды, записанной в лагранжевых переменных, который отличается от традиционных методов тем, что конечными разностями заменяются только производные по пространственным переменным. В результате такого подхода уравнения в частных производных сводятся к системе обыкновенных дифференциальных уравнений на пространственной сетке. Для малого временного интервала было найдено приближенное аналитическое решение этой системы уравнений. Полученное аналитическое решение дает возможность описать динамику рассматриваемой системы во всем требуемом временном интервале. Применение данного метода для решения задач газовой динамики и расчета упругопластических течений в твердых телах показало, что данный метод обеспечивает высокую точность выполнения законов сохранения и характеризуется высокой устойчивостью решения, что обусловлено отказом от аппроксимации конечными разностями производных по времени.

Поскольку применение лагранжевых переменных для решения задач газовой динамики ограничено характером течений рассматриваемой системы, то возникает необходимость обобщения метода [1] на случай решения задач в эйлеровых переменных. В данной работе приводится описание применения метода [1] к решению задач газовой динамики в эйлеровых переменных, тестирование его на стандартных задачах путем сравнения результатов расчета предлагаемым методом с решениями, полученными базовым методом крупных частиц (МКЧ) [2], различные модификации которого широко используется для решения многих прикладных задач [3, 4].

Описание метода для эйлеровых координат

Рассмотрим систему уравнений газовой динамики в эйлеровых координатах в одномерном случае (законы сохранения массы, импульса и энергии):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v^2)}{\partial x} = -\frac{\partial P}{\partial x}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U v)}{\partial x} = -P \frac{\partial v}{\partial x}. \quad (3)$$

Здесь и далее ρ – плотность, v – массовая скорость, U – внутренняя энергия единицы массы, P – давление. Данную систему уравнений следует дополнить начальными и граничными условиями.

Чтобы данная система уравнений обеспечивала выполнение второго закона термодинамики, в ней применяется неравновесное давление, которое учитывает конечное время релаксации физической системы к равновесию [5]. Следствием конечного времени релаксации к равновесному состоянию является то, что при уменьшении объема газа с конечной скоростью он в каждый момент времени не находится в равновесии, и тогда неравновесное давление может быть представлено в виде

$$P = P^0 + \delta P, \quad (4)$$

где P^0 – равновесное давление, которое находится через уравнение состояния $P^0 = P^0(\rho, U)$, $\delta P = c^2 \delta \rho$ – неравновесная добавка, обусловленная локальным изменением массовой плотности среды при сжатии, c – скорость звука. Локальное изменение плотности определяется как $\delta \rho = \dot{\rho} \tau_{rel}$, где $\tau_{rel} = \xi / c$ – время релаксации к равновесию, ξ – характерный линейный размер рассматриваемого объема среды. Поскольку изменение плотности среды связано с изменением объема соотношением $\dot{\rho} / \rho = -\dot{V} / V$, то из сказанного выше следует, что при сжатии среды неравновесная добавка к давлению имеет вид при $\dot{V} < 0$:

$$\delta P = -\rho c \xi \dot{V} / V. \quad (5)$$

Адиабатическое расширение среды происходит за счет убыли внутренней энергии, причем максимальная скорость убыли внутренней энергии определяется свойствами самой среды и реализуется при равновесном процессе. Примером может служить разлет газа в пустоту [5], который является равновесным процессом (энтропия сохраняется). Таким образом, в случае расширения среды, когда $\dot{V} > 0$, величина $\delta P = 0$.

Для численного решения уравнений (1)–(3) на занятую область наносится неподвижная сетка $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_l$. Массовая скорость среды v_i определена в узлах, а центрах ячеек определяются термодинамические характеристики среды $\rho_{i+1/2}, m_{i+1/2}, P_{i+1/2}, U_{i+1/2}$.

Для построения численной схемы проинтегрируем уравнения (1) и (3) в интервале от x_i до x_{i+1} , а уравнение движения (2) – в интервале от $x_{i-1/2}$ до $x_{i+1/2}$. Для малых интервалов интегрирования можно записать соотношения:

$$m_{i+1/2} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \rho dx = \rho_{i+1/2} \xi_{i+1/2}, \quad (mU)_{i+1/2} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \rho U dx, \quad (mv)_i = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \rho v dx,$$

где $\xi_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i$ есть объем ячейки с единичной поперечной площадью.

Сумма диагональных элементов тензора скоростей деформации определяет скорость относительного изменения объема и, соответственно, массовой плотности при сжатии или разрежении. В плоской геометрии разностный аналог этого выражения будет иметь вид:

$$(\nabla \vec{v})_{i+1/2} = \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)_{i+1/2} = \frac{v_{i+1} - v_i}{\xi_{i+1/2}} = \frac{\dot{V}_{i+1/2}}{\xi_{i+1/2}}.$$

Таким образом, имеем $\dot{V}_{i+1/2} = v_{i+1} - v_i$. Данное выражение характеризует изменение объема массы в ячейке только за счет процессов разрежения или сжатия без потоков массы через границы ячейки.

В результате интегрирования уравнения (1) получим:

$$\frac{\partial m_{i+1/2}}{\partial t} = -(J_{i+1} - J_i), \quad (6)$$

где потоки массы через границы ячеек вычисляются как в [2]:

$$J_i = v_i \begin{cases} \rho_{i-1/2}, & v_i > 0 \\ \rho_{i+1/2}, & v_i < 0 \end{cases}, J_{i+1} = v_{i+1} \begin{cases} \rho_{i+1/2}, & v_{i+1} > 0 \\ \rho_{i+3/2}, & v_{i+1} < 0 \end{cases}$$

Интегрирование уравнения (2) дает:

$$m_i \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial m_i}{\partial t} v_i = -(P_{i+1/2} - P_{i-1/2}) - (I_{i+1/2} - I_{i-1/2}), \quad (7)$$

где потоки импульса через границы $x_{i-1/2}$ и $x_{i+1/2}$ вычисляются аналогично потокам массы:

$$I_{i-1/2} = v_{i-1/2} \begin{cases} \rho_{i-1} v_{i-1}, & v_{i-1/2} > 0 \\ \rho_i v_i, & v_{i-1/2} < 0 \end{cases}, I_{i+1/2} = v_{i+1/2} \begin{cases} \rho_i v_i, & v_{i+1/2} > 0 \\ \rho_{i+1} v_{i+1}, & v_{i+1/2} < 0 \end{cases}$$

$$v_{i\pm 1/2} = 0,5(v_{i\pm 1} + v_i), \quad \rho_i = \frac{m_{i+1/2} + m_{i-1/2}}{x_{i+1} - x_{i-1}}, \quad m_i = 0,5(m_{i+1/2} + m_{i-1/2}).$$

Результат интегрирования уравнения (3) может быть представлен в виде

$$\frac{\partial(mU)_{i+1/2}}{\partial t} = -P_{i+1/2}(v_{i+1} - v_i) - (\mathfrak{S}_{i+1} - \mathfrak{S}_i), \quad (8)$$

где потоки внутренней энергии вычисляются аналогично потокам массы или импульса:

$$\mathfrak{S}_i = v_i \begin{cases} \rho_{i-1/2} U_{i-1/2}, & v_i > 0 \\ \rho_{i+1/2} U_{i+1/2}, & v_i < 0 \end{cases}, \mathfrak{S}_{i+1} = v_{i+1} \begin{cases} \rho_{i+1/2} U_{i+1/2}, & v_{i+1} > 0 \\ \rho_{i+3/2} U_{i+3/2}, & v_{i+1} < 0 \end{cases}$$

Уравнения (6)–(8) представляют собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений на всей пространственной сетке. Будем интегрировать эту систему на некотором временном интервале от t_n до t_{n+1} .

Полагая, что в интервале $t_n \leq t \leq t_{n+1}$ потоки массы через границы ячеек постоянны, решение уравнения (6) и новая плотность запишется в виде

$$m_{i+1/2}(t_{n+1}) = m_{i+1/2}(t_n) + (J_{i+1} - J_i)^n \Delta t, \quad \rho_{i+1/2}(t_{n+1}) = m_{i+1/2}(t_{n+1}) / \xi_{i+1/2}. \quad (9)$$

Чтобы получить систему дифференциальных уравнений для скорости, продифференцируем уравнение (7) по времени, полагая, что потоки массы, импульса и неравновесная добавка (5) постоянны в рассматриваемом временном интервале, то есть

$$\frac{\partial^2 m_i}{\partial t^2} = 0, \quad \frac{\partial I_{i+1/2}}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \delta P_{i+1/2}}{\partial t} = 0.$$

Выразим также частную производную от давления по времени через субстанциональную производную:

$$\frac{\partial P_{i+1/2}^0}{\partial t} = \dot{P}_{i+1/2}^0 - \left(v \frac{\partial P^0}{\partial x} \right)_{i+1/2}. \quad (10)$$

Полную производную по времени в (10) представим в виде

$$\dot{P}_{i+1/2}^0 = (c^2 \dot{\rho})_{i+1/2} = -Q_{i+1/2}(v_{i+1} - v_i), \quad (11)$$

где $Q_{i+1/2} = \rho_{i+1/2} c_{i+1/2}^2 / \xi_{i+1/2}$, $\xi_{i+1/2}$ – эффективный объем ячейки, который учитывает, что при ее сжатии возмущается лишь слой. Таким образом, следуя [1], эффективный объем ячейки будет определяться выражением

$$\xi_{i+1/2} = \begin{cases} c \Delta t, & v_{i+1} - v_i < 0 \\ \xi_{i+1/2}, & v_{i+1} - v_i \geq 0 \end{cases}$$

С учетом сделанных замечаний и выражений (10) и (11) получим

$$\frac{\partial^2 v_i}{\partial t^2} + 2\gamma_i \frac{\partial v_i}{\partial t} + \omega_i^2 v_i = L_i, \quad (12)$$

где

$$\gamma_i = \frac{1}{m_i} \frac{\partial m_i}{\partial t}, \quad \omega_i^2 = \frac{1}{m_i} (Q_{i+1/2} + Q_{i-1/2}), \quad L_i = \frac{1}{m_i} \left[(Q_{i+1/2} v_{i+1} + Q_{i-1/2} v_{i-1}) + \left(v \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{i+1/2} - \left(v \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{i-1/2} \right].$$

Для построения разностной схемы для вычисления входящих в последнее выражение производных удобно представить $v\partial P/\partial x = \partial(vP)/\partial x - P\partial v/\partial x$. Тогда имеем

$$\begin{aligned} \left(v \frac{\partial P}{\partial x}\right)_{i+1/2} &= \frac{1}{2\xi_{i+1/2}} \left[v_{i+1} (P_{i+3/2} - P_{i+1/2}) + v_i (P_{i+1/2} - P_{i-1/2}) \right], \\ \left(v \frac{\partial P}{\partial x}\right)_{i-1/2} &= \frac{1}{2\xi_{i-1/2}} \left[v_i (P_{i+1/2} - P_{i-1/2}) + v_{i-1} (P_{i-1/2} - P_{i-3/2}) \right]. \end{aligned}$$

Здесь также уместно привести разностную аппроксимацию для вычисления неравновесной добавки к давлению:

$$\delta P_{i+1/2} = \begin{cases} -(c\rho)_{i+1/2} (v_{i+1} - v_i), & v_{i+1} - v_i < 0 \\ 0, & v_{i+1} - v_i \geq 0 \end{cases}.$$

Таким образом, выражение (12) представляет собой систему дифференциальных уравнений, решение которой позволит найти поле скоростей во всех узлах эйлеровой сетки. Для решения (12) необходимо задать начальные условия: $v_i(t_n) = v_i^n$ и $(\partial v_i / \partial t)^n$, которое находится из уравнения (7), где все величины в момент времени t_n должны быть известны. Подставляя (6) в (7), можно записать второе начальное условие в виде

$$\left(\frac{\partial v_i}{\partial t}\right)^n = -\frac{1}{m_i(t_n)} \left\{ (P_{i+1/2} - P_{i-1/2}) + (\psi_{i+1/2} - \psi_{i-1/2}) \right\}^n,$$

где

$$\psi_{i+1/2} = \begin{cases} 0, & v_{i+1/2} \geq 0 \\ \rho_{i+1} (v_{i+1} - v_i) v_{i+1/2}, & v_{i+1/2} < 0 \end{cases}, \quad \psi_{i-1/2} = \begin{cases} \rho_{i-1} (v_{i-1} - v_i) v_{i-1/2}, & v_{i-1/2} > 0 \\ 0, & v_{i-1/2} \leq 0 \end{cases}.$$

Для малого временного шага можно получить простое аналитическое решение системы (12). Полагая в (12) найденные для момента t_n величины γ_i , ω_i^2 , L_i постоянными на шаге интегрирования, можно решение (12) записать в виде

$$v_i(t_{n+1}) = v_i^n + \left(\frac{\partial v_i}{\partial t}\right)^n e^{-\gamma\Delta t} \frac{S(\Omega\Delta t)}{\Omega} + \left(\frac{L}{\omega^2} - v^n\right) \left[1 - e^{-\gamma\Delta t} \left(C(\Omega\Delta t) + \gamma \frac{S(\Omega\Delta t)}{\Omega} \right) \right], \quad (13)$$

где

$$\Omega^2 = \omega^2 - \gamma^2, \quad \Omega = \sqrt{|\Omega^2|}, \quad C(\Omega\Delta t) = \begin{cases} \cos(\Omega\Delta t), & \Omega^2 \geq 0 \\ \text{ch}(\Omega\Delta t), & \Omega^2 < 0 \end{cases}, \quad S(\Omega\Delta t) = \begin{cases} \sin(\Omega\Delta t), & \Omega^2 \geq 0 \\ \text{sh}(\Omega\Delta t), & \Omega^2 < 0 \end{cases}.$$

Для решения уравнения (8) воспользуемся методом разделения по физическим процессам, для чего представим искомое решение в виде

$$U_{i+1/2}(t) = U_{i+1/2}^n + \delta U_{i+1/2}^P + \delta U_{i+1/2}^{conv}, \quad (14)$$

где $\delta U_{i+1/2}^P$ – приращение внутренней энергии за счёт работы сил давления, $\delta U_{i+1/2}^{conv}$ – приращение внутренней энергии за счёт конвекции.

Уравнение для $\delta U_{i+1/2}^P$ запишем в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta U_{i+1/2}^P = -\frac{1}{m_{i+1/2}^n} P_{i+1/2} \dot{V}_{i+1/2}, \quad (15)$$

Отметим, что в уравнении (15) не учитываются потоки массы и энергии, что соответствует описанию в переменных Лагранжа. Подставляя выражение (14) в уравнение (8) и учитывая (15), запишем уравнение для $\delta U_{i+1/2}^{conv}$ в виде

$$\frac{\partial (m \delta U_{i+1/2}^{conv})}{\partial t} = -(\mathfrak{F}_{i+1} - \mathfrak{F}_i) - \left(\frac{\partial m_{i+1/2}}{\partial t}\right) U_{i+1/2}^n. \quad (16)$$

Уравнение (16) записано в переменных Эйлера.

Начальные условия для уравнений (15), (16) имеют вид $\delta U_{i+1/2}^P(t_n) = \delta U_{i+1/2}^{conv}(t_n) = 0$.

Интегрируя по времени выражение (11) от t_n до $t \leq t_{n+1}$ и учитывая (4), запишем выражение

$$P_{i+1/2}(t) = P_{i+1/2}^0(t_n) + \delta P_{i+1/2} - Q_{i+1/2}(V(t) - V(t_n))_{i+1/2}. \quad (17)$$

Подставляя (17) в (15), получим после интегрирования выражение

$$\delta U_{i+1/2}^P = \frac{1}{m_{i+1/2}^n} \left[-P(t_n) \Delta V + Q \frac{\Delta V^2}{2} \right]_{i+1/2}, \quad (18)$$

где $\Delta V_{i+1/2} = \dot{V}_{i+1/2} \cdot \Delta t$.

Интегрирование уравнения (16) с учетом (6) приводит к выражению

$$\delta U_{i+1/2}^{conv} = \frac{\Delta t}{m_{i+1/2}^{n+1}} \left\{ \left[\rho_{i+3/2} (U_{i+3/2} - U_{i+1/2}) v_{i+1} \right]_{v_{i+1} < 0} - \left[\rho_{i-1/2} (U_{i-1/2} - U_{i+1/2}) v_i \right]_{v_i > 0} \right\}^n. \quad (19)$$

Таким образом, здесь приведен полный набор формул для описания динамики газа или жидкости в одномерной геометрии. Выражения (9) с приведенными в (6) потоками позволяют определить массы и плотности вещества в ячейках в новый момент времени. Выражение (13) позволяет вычислить новое поле скоростей, а выражения (14), (17) и (18) – внутренние энергии в ячейках. Новые равновесные давления и температура находятся с помощью уравнения состояния.

Основным приближением, которое было сделано при интегрировании системы (1)–(3), является постоянство $Q_{i+1/2}$ на шаге интегрирования Δt . Это приближение выполняется, если на шаге интегрирования относительное изменение объема мало, то есть

$$\Delta t \left| \frac{v_{i+1} - v_i}{\xi_{i+1/2}} \right| < \varepsilon_H,$$

где ε_H – некоторая малая величина. Данное условие позволяет найти величину шага интегрирования рассматриваемой системы. В случае состояний среды, близких к покою, или в случае гладких течений сформулированный выше критерий для выбора временного шага работать не будет. Поэтому для выбора временного шага при интегрировании уравнений применяется комплексный критерий, включая условие Куранта:

$$\Delta t = \min \left(\frac{\varepsilon_H \xi_{i+1/2}}{|v_{i+1} - v_i|}, \frac{\varepsilon_C \xi}{c} \right), \quad (20)$$

где $\varepsilon_C \sim 1/3$ – характерная константа в условии Куранта, $\varepsilon_H \sim 0,01$. Условие (20) проверяется для всех ячеек. Обычно оба условия дают близкие значения временных шагов, однако в области распространения ударных волн первое условие будет определяющим.

Точность интегрирования рассматриваемой системы можно повысить, решение (13) осуществить в два этапа. На первом этапе по формуле (13) для момента времени $t_{n+1/2} = t_n + \Delta t/2$ находится поле скоростей $v_i^{n+1/2}$, $L_i^{n+1/2}$, а также потоки массы и энергии через границы ячеек. На втором этапе по формуле (13), в которой вместо L_i^n подставлено $L_i^{n+1/2}$, находим v_i^n . По формулам (9) и (18) вычисляются новая масса, плотность и внутренняя энергия через потоки для момента $t_{n+1/2}$.

Тестовые расчеты

Для верификации полуаналитического метода в эйлеровых координатах были решены одномерные задачи о распаде произвольного разрыва, о распространении стационарных ударных волн различной интенсивности и проведено сравнение полученного решения с аналитическим и решением, полученным базовым методом крупных частиц.

Задача 1. Распад произвольного разрыва. В некоторой области, ограниченной отрезком $[0;1]$ (см), находится газ, в начальный момент времени ($t = 0$) разделенный контактной границей на две подобласти. Показатель адиабаты $\gamma = 5/3$. Геометрия сетки: $N = 800$ равномерно распределенных точек вдоль оси x .

Начальные распределения параметров газа вдоль пространственной координаты x равны

$$\rho_1 = 3,87 \text{ кг/м}^3; T_1 = 611,5 \text{ К}; U_1 = 0 \text{ м/с}; P_1 = 1,4 \cdot 10^6 \text{ Па}; x \leq 0,5 \text{ см};$$

$$\rho_0 = 2,58 \text{ кг/м}^3; T_0 = 91,7 \text{ К}; U_0 = 0 \text{ м/с}; P_0 = 1,4 \cdot 10^5 \text{ Па}; x > 0,5 \text{ см}.$$

На рис. 1 представлены распределения параметров на момент времени $t = 4,5$ мкс. Решение, полученное полуаналитическим методом (ПА метод), совпадает с аналитическим решением [6], что говорит о высокой точности метода. Исходя из графиков, видно, что в момент времени, отличный от нуля, влево начинает распространяться волна разрежения, вправо – ударная волна. Решение, полученное численными методами, имеет «размытие» в области контактного разрыва. Решение, полученное базовым МКЧ, дает небольшой скачок параметров на фронте ударной волны.

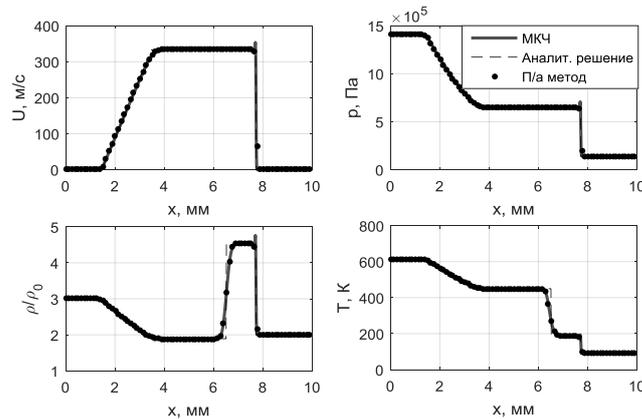


Рис. 1. Распад произвольного разрыва. Распределения скорости, давления, безразмерной плотности и температуры на момент времени $t = 4,5$ мкс

Задача 2. Распространение сильной ударной волны (УВ). В некоторой области, ограниченной отрезком $[0;1]$ (см), находится газ (показатель адиабаты $\gamma = 5/3$), начальные значения параметров которого равны:

$$\rho_0 = 1,29 \text{ кг/м}^3, T_0 = 300 \text{ К}, U_0 = 0 \text{ м/с}, P_0 = 2,29 \cdot 10^5 \text{ Па}; 0 < x \leq 1 \text{ см}.$$

Через границу ($x = 0$) в расчетную область втекает стационарный поток с параметрами:

$$P_1 = 10P_0, U_1, T_1, \rho_1.$$

Параметры U_1, T_1, ρ_1 рассчитываются из соотношений на разрыве (соотношения Ренкина–Гюгонио). Геометрия сетки: $N = 800$ равномерно распределенных точек вдоль оси x .

На рис. 2 представлены распределения параметров падающей сильной ударной волны на момент времени $t = 3$ с. На рис. 3 представлены распределения параметров отраженной ударной волны на момент времени $t = 9$ с. Полуаналитический метод дает хорошее совпадение с точным решением как для падающей, так и для отраженной ударных волн, в отличие от МКЧ. Решение, полученное базовым методом крупных частиц, имеет сильные осцилляции при отражении ударной волны от жесткой стенки. Это говорит о том, что МКЧ нуждается в введении дополнительных слагаемых, обеспечивающих устойчивость решения, не всегда имеющих физическую обоснованность. Одним из способов обеспечения устойчивости решения МКЧ является введение искусственной вязкости [7], в которую входят эмпирические константы. Использование таких слагаемых делает метод не универсальным. В то же время полуаналитический метод не требует введения никаких искусственных добавок.

Задача 3. Распространение слабой УВ. В некоторой области, ограниченной отрезком $[0;1]$ (см), находится газ (показатель адиабаты $\gamma = 5/3$), начальные значения параметров которого равны:

$$\rho_0 = 1,29 \text{ кг/м}^3, T_0 = 300 \text{ К}, U_0 = 0 \text{ м/с}, P_0 = 2,29 \cdot 10^5 \text{ Па}; 0 < x \leq 1 \text{ см}.$$

Через границу ($x = 0$) в расчетную область втекает стационарный поток с параметрами

$$P_1 = 1,5P_0, U_1, T_1, \rho_1.$$

Параметры U_1, T_1, ρ_1 рассчитываются из соотношений на разрыве. Геометрия сетки: $N = 800$ равномерно распределенных точек вдоль оси x .

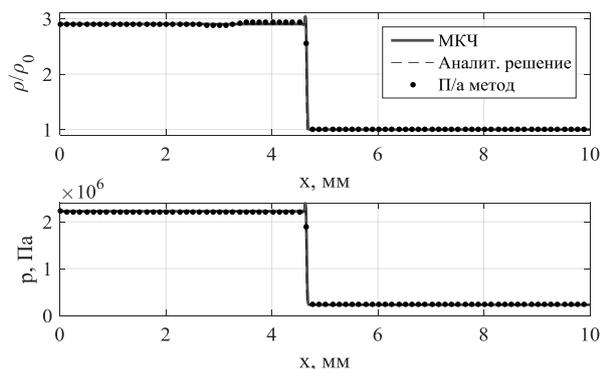


Рис. 2. Распространение сильной ударной волны. Распределения безразмерной плотности и давления на момент времени $t = 3$ мкс

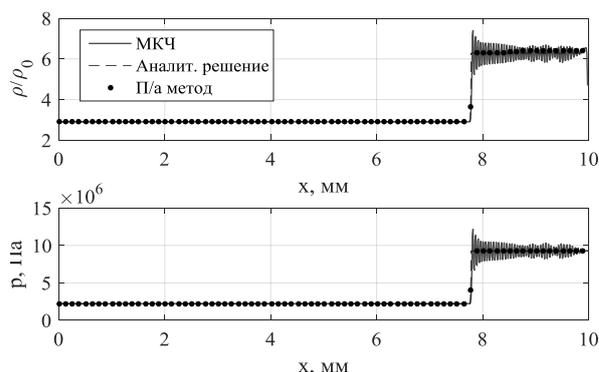


Рис. 3. Распространение сильной ударной волны. Распределения безразмерной плотности и давления на момент времени $t = 9$ мкс

На рис. 4 представлены распределения параметров падающей ударной волны на момент времени $t = 6$ мкс. На рис. 5 представлены распределения параметров отраженной ударной волны на момент времени $t = 24$ мкс.

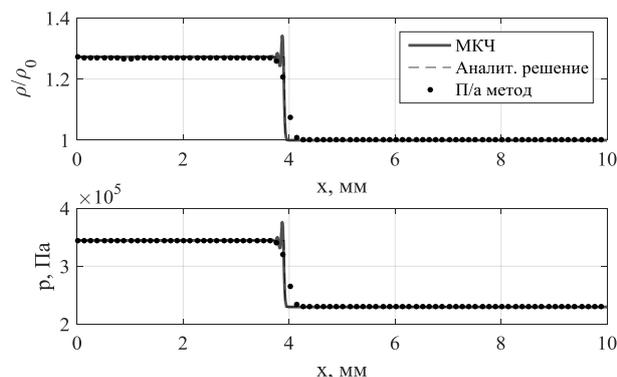


Рис. 4. Распространение слабой УВ. Распределения безразмерной плотности и давления на момент времени $t = 6$ мкс

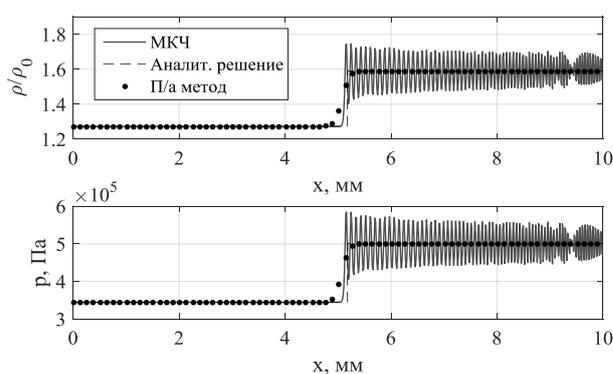


Рис. 5. Распространение слабой УВ. Распределения безразмерной плотности и давления на момент времени $t = 24$ мкс

Исходя из полученных графиков для слабой ударной волны, видно, что решение, полученное базовым методом крупных частиц, не совпадает с аналитикой и показывает сильные осцилляции, то есть метод не устойчив при описании распространения слабых ударных волн. В свою очередь решение, полученное рассматриваемым методом, полностью совпадает с аналитическим, что говорит об универсальной применимости данного метода для решения различных прикладных задач.

Заключение

В данной работе представлен полуаналитический метод в эйлеровых координатах для решения задач гидрогазодинамики. Представлены результаты верификации данного метода на одномерных задачах и сравнение с другим численным методом. Предложенный в данной работе метод показывает высокую точность для ударных волн различной интенсивности, что делает метод универсальным и применимым для различных прикладных задач.

Данный метод применим для расчетов в многомерном случае, поскольку в этом случае описанный здесь алгоритм решения задачи сохраняется полностью.

Литература

1. Яловец, А.П. Расчет течений среды при воздействии интенсивных потоков заряженных частиц / А.П. Яловец // Прикладная механика и техническая физика. – 1997. – Т. 38, № 1. – С. 151–166.

2. Белоцерковский, О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред / О.М. Белоцерковский. – М.: Физматлит, 1994. – С. 27–39.
3. Shestakovskaya, E.S. On one Method of Calculating Moving Boundaries in Euler Coordinates / E.S. Shestakovskaya, Ya.E. Starikov // Journal of Computational and Engineering Mathematics. – 2019. – Т. 6, № 4. – Р. 44–56.
4. Беляев, П.Е. Влияние экранирующего слоя газозвеси на силовое воздействие ударной волны на жёсткую стенку / П.Е. Беляев, Н.Л. Клиначева // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2016. – Т. 8, № 4. – С. 49–55.
5. Ландау, Л.Д. Гидродинамика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1988. – 733 с.
6. Куропатенко, В.Ф. Основы численных методов механики сплошной среды: монография / В.Ф. Куропатенко, Е.С. Шестаковская. – Челябинск: Издат. центр Южно-Уральского государственного университета, 2017. – 253 с.
7. Садин, Д.В. Модификация метода крупных частиц до схемы второго порядка точности по пространству и времени для ударно-волновых течений газозвеси / Д.В. Садин // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2019. – Т. 12, № 2. – С. 112–122.

Поступила в редакцию 27 марта 2023 г.

Сведения об авторах

Жарылканова Мадина Салимжановна – студент, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: zharylkanovams@susu.ru

Клиначева Наталия Леонидовна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра «Вычислительная механика», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: klinachevanl@susu.ru

Яловец Александр Павлович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра «Вычислительная механика», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: yalovetsap@susu.ru

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2023, vol. 15, no. 2, pp. 32–40

DOI: 10.14529/mmph230205

SEMIANALYTIC METHOD FOR SOLVING GAS DYNAMICS EQUATIONS IN EULER VARIABLES

M.S. Zharylkanova, N.L. Klinacheva, A.P. Yalovets
South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: klinachevanl@susu.ru

Abstract. This paper presents a semi-analytical method for solving a system of equations of gas dynamics in Eulerian coordinates. Since only spatial derivatives are replaced by finite differences, the system of gas dynamic equations is reduced to a system of ordinary differential equations on a spatial grid. An approximate analytical solution of this system of differential equations for a small time-interval is used to describe the dynamics of a gas in the entire required time interval. Verification was carried out on one-dimensional test problems on the decay of an arbitrary discontinuity and the propagation of stationary shock waves of various intensities. To compare one-dimensional problems, the solution of test problems is given by the simple-to-implement basic particle-in-cell method. It is shown that the semi-analytical method has high accuracy of calculations, and is also the most universal method for calculating applied problems.

Keywords: semi-analytical method; particle-in-cell method; shock wave; decay of an arbitrary discontinuity.

References

1. Yalovets A.P. Raschet techeniy sredy pri vozdeystvii intensivnykh potokov zaryazhennykh chastits (Calculation of Medium Flows under the Influence of Intense Flows of Charged Particles). *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika*, 1997, Vol. 38, no. 1, pp. 151–166. (in Russ.).
2. Belotserkovskiy O.M. *Chislennoe modelirovanie v mekhanike sploshnykh sred* (Numerical Modeling in Continuum Mechanics). Moscow, Fizmatlit Publ., 1994, pp. 27–39. (in Russ.).
3. Shestakovskaya E.S., Starikov Ya.E. On One Method of Calculating Moving Boundaries in Euler Coordinates. *Journal of Computational and Engineering Mathematics*, 2019, Vol. 6, no. 4, pp. 44–56. DOI: 10.14529/jcem190404
4. Belyaev P.E., Klinacheva N.L. Impact of Gas Suspension Shielding Layer on the Force Effect of Shock Waves on a Rigid Wall. *Bulletin of the South Ural State University. Series of “Mathematics. Mechanics. Physics”*, 2016, Vol. 8, no. 4, pp. 49–55. (in Russ.). DOI:10.14529/mmph160406
5. Landau L.D., Lifshits E.M. *Gidrodinamika* (Hydrodynamics), Moscow: Nauka Publ., 1988, 733 p. (in Russ.).
6. Kuropatenko V.F., Shestakovskaya E.S. *Osnovy chislennykh metodov mekhaniki sploshnoy sredy: monografiya* (Fundamentals of Numerical Methods of Continuum Mechanics: Monograph), Chelyabinsk, Izdat. tsentr Yuzhno-Ural'skogo gosudarstvennogo universiteta Publ., 2017, 253 p. (in Russ.).
7. Sadin D.V. A Modification of the Large-Particle Method to a Scheme Having the Second Order of Accuracy in Space and Time for Shockwave Flows in a Gas Suspension. *Bulletin of the South Ural State University. Series “Mathematical Modelling, Programming and Computer Software”*, 2019, Vol. 12, no. 2, pp. 112–122. DOI: 10.14529/mmmp190209

Received March 27, 2023

Information about the authors

Zharylkanova Madina Salimzhanovna is Student, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: zharylkanovams@susu.ru

Klinacheva Nataliya Leonidovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of “Computational Mechanics”, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: klinachevanl@susu.ru

Yalovets Aleksandr Pavlovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Department of “Computational Mechanics”, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: yalovetsap@susu.ru

СПЕКТРЫ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В КАЧЕСТВЕ КАТОДОВ АВТОЭМИССИОННЫХ ИСТОЧНИКОВ ИЗЛУЧЕНИЯ

К.Н. Белов¹, А.С. Бердников¹, В.Б. Куреев², Н.Д. Кундикова^{1,3},
Д.Н. Просеков¹, Фунг Дык Мань², Е.П. Шешин²

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

² Московский физико-технический институт, г. Москва, Российская Федерация

³ Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Российская Федерация

E-mail: kundikovand@susu.ru

Аннотация. Структурированные углеродные материалы находят широкое применение в технике и в научных исследованиях, в частности в качестве материалов для автоэмиссионного катода, используемого в катодолюминесцентных лампах. Для определения влияния работы в качестве катодов на мелкозернистый графит (МПГ-6), пиролитический графит и ПАН-волокно использован метод спектроскопии комбинационного рассеяния света. Зарегистрированы спектры комбинационного рассеяния всех трех материалов до работы и после работы в качестве катода в спектральном интервале от 1000 до 2000 см⁻¹. Кроме характерных для углеродных материалов линий G, D и D' обнаружена линия в интервале 1450-1460 см⁻¹, которая наблюдается в исходном материале пиролитического графита и остается после эксплуатации, а также появляется в образце МПГ-6 после работы в качестве катода. Наибольшее изменение претерпевает относительная интегральная интенсивность линии D в пиролитическом и МПГ-6, в пиролитическом графите наблюдается увеличение, а в МПГ-6 – уменьшение после работы в качестве катода, что может позволить использовать относительную интегральную интенсивность линии D для оценки работы катодолюминесцентных ламп.

Ключевые слова: спектры комбинационного рассеяния; углеродные материалы; структурированные материалы; автоэмиссионный катод.

Разработка и применение новых источников излучения на основе использования эффекта электронной автоэмиссии перспективны для разнообразных сфер деятельности, в частности, в качестве автоэмиссионных катодолюминесцентных источников света общего назначения [1], источников света для теплиц [2], источников УФ-света, в том числе для создания линейки систем для дезинфекции [3], а также для создания линейки эффективных рентгеновских трубок различного назначения [4]. Среди возможных применений таких автоэмиссионных источников излучения – создание как плоских, так и узконаправленных источников излучения высокой интенсивности с возможностью подбора и даже перестройки спектров излучения.

Углеродные материалы, такие как мелкозернистый плотный графит, пиролитический графит и углеродное ПАН-волокно, являются перспективными дешёвыми материалами для создания автоэмиссионных катодов со стабильными эмиссионными характеристиками для экономичных экологически чистых источников излучения (не содержащих ртути и другие редкие и токсичные химические элементы и их соединения). При работе материала в качестве катода в материале в условиях сильного электрического поля происходят изменения, которые могут являться причиной выхода источника излучения из строя или изменения их эмиссионных характеристик. Одним из неразрушающих методов контроля материалов является спектроскопия комбинационного рассеяния, которая позволяет получать информацию о колебательном спектре материала и об его изменении при внешних воздействиях [5].

Цель работы – выявление изменений параметров линий, а именно, частоты, ширины и относительной интегральной интенсивности, в спектрах комбинационного рассеяния после работы углеродного материала в качестве катода в автоэмиссионных катодоллюминесцентных источниках света.

Исследования проводились для трех материалов: пирографита [6], ПАН-волокна [7] и мелкозернистого графита (МПГ-6) [8], сравнение проводилось между результатами, полученными для исходного материала и материала, проработавшего в качестве катода в источнике света до его полного выхода из строя. Сравнение поверхности исследованных образцов показало, что поверхность МПГ-6 остается практически неизменной. Структура поверхности пирографита меняется и становится менее развитой (рис. 1, а, б), волокна ПАН-волокна увеличиваются в размерах (рис. 1, в, г).

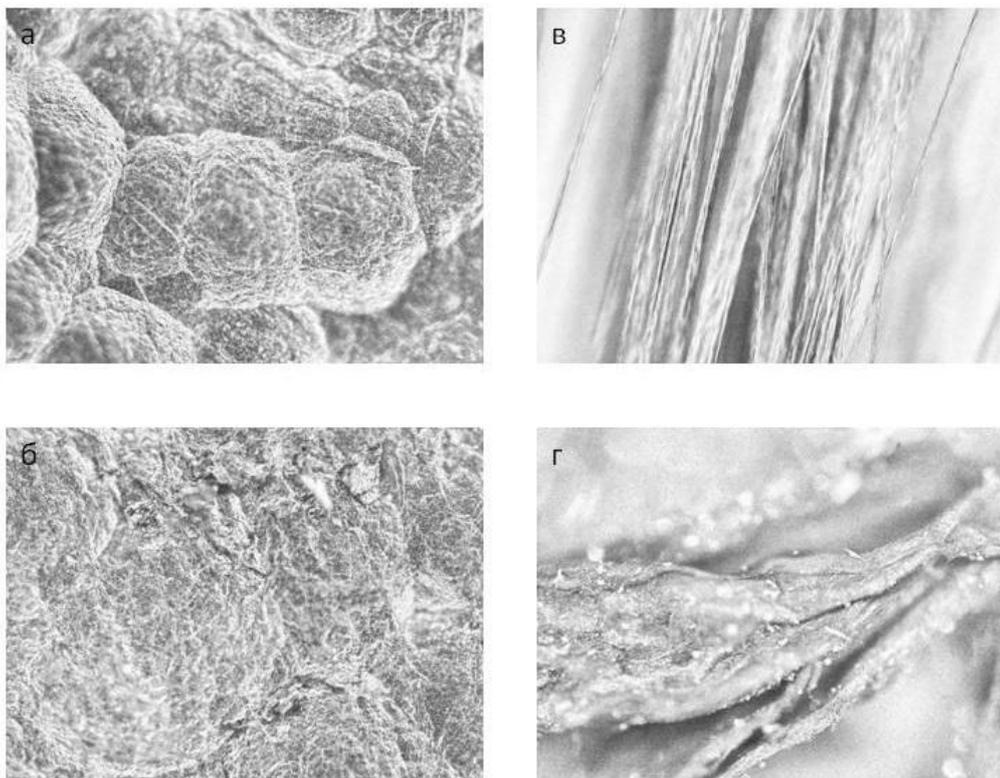


Рис. 1. Увеличенное изображение поверхности исследуемых образцов.

а, б, в – двадцатикратное увеличение, размер кадра 700 мкм на 520 мкм, г – десятикратное увеличение, размер кадра 1,4 мм на 1,1 мм. а – пирографит, б – пирографит катод, в – ПАН-волокно, г – ПАН-волокно катод

Спектры комбинационного рассеяния регистрировались на спектрометре комбинационного рассеяния ЗНЛ ИНТЕГРА СПЕКТРА при возбуждении лазерным излучением с длиной волны 473 нм на дифракционной решетке 1800 штр/мм в спектральном диапазоне от 1000 до 2000 см^{-1} . Разложение зарегистрированных спектров на отдельные линии и определение их основных параметров, а именно, частоты, ширины и относительной интегральной интенсивности, выполнялось в свободно распространяемой программе Fityk [9]. Каждая линия описывалась функцией Лоренца, параметры линий определялись трижды при разных уровнях фона, определялось среднее значение и максимальное отклонение. Точность определения параметров была выше для линий с большей интенсивностью. При определении всех параметров максимальное отклонение не превышало 10 %.

В углеродных материалах в данном спектральном диапазоне наблюдается линия с частотой 1582 см^{-1} , традиционно называемой линией G, колебания на этой частоте соответствуют колебаниям атомов углерода в сильно связанных гексагональных плоскостях, может появляться линия на частоте 1357 см^{-1} , которую традиционно называют D-линией. Происхождение этой линии связывают с нарушением трансляционной симметрии в материале. На плече линии с частотой 1582 см^{-1} наблюдается слабая линия с частотой 1620 см^{-1} , обозначаемая как D' и связанная с разупорядочением между слоями [8, 10].

В таблице представлены частоты линий, которые наблюдались в спектрах комбинационного рассеяния исследованных образцов. Значения частот получены как среднее в нескольких точках каждого образца, отклонение от среднего значения по всем точкам образца не превышало точности, определяемой характеристиками спектрометра, и составляет в рассматриваемом диапазоне при использовании дифракционной решетки 1800 штр/мм величину $0,5 \text{ см}^{-1}$.

Линии, которые наблюдались в спектрах комбинационного рассеяния исследованных образцов и значения их частот в обратных сантиметрах

Материал	D	X	G	D'
пирографит	1 364,9	1 458,1	1 581,7	отсутствует
пирографит катод	1 366,8	1 458,5	1 584,7	1 624,4
ПАН-волокно	1 370,1	отсутствует	1 592,6	отсутствует
ПАН-волокно катод	1 373,2	отсутствует	1 599,0	отсутствует
МПП-6	1 366,1	отсутствует	1 583,0	1 616,9
МПП-6 катод	1 366,8	1 454,8	1 583,5	1 625,3

Как видно из таблицы, линии D и G присутствуют в спектрах комбинационного рассеяния всех исследованных образцов. Линия D' отсутствует как в исходном ПАН-волокне, так и в ПАН-волокне после использования в качестве катода, отсутствует в исходном материале пирографита, но появляется после работы пирографита в качестве катода. В спектрах комбинационного рассеяния исследованных образцов также наблюдалась линия в области частот $1450\text{--}1460 \text{ см}^{-1}$, обозначенная в таблице как X, которую относят к колебаниям метиленовой группы, и которая наблюдалась, насколько известно из проведенного анализа литературы, только в ПАН-волокне [11]. Данная линия наблюдалась нами и в пирографите как до работы в качестве катода, так и после. В мелкозернистом графите эта линия появляется только после использования материала в качестве катода.

Из анализа результатов, приведенных в таблице, следует, что частоты основных линий в разных материалах отличаются в пределах нескольких обратных сантиметров, а частота всех линий после работы в качестве катодов либо остается практически неизменной, либо увеличивается, наибольшее изменение частоты зарегистрировано для линии D' в МПП-6.

Хотя частоты основных наиболее интенсивных линий незначительно отличаются в разных материалах, их относительная интенсивность различна для исследованных материалов. На спектрах, представленных на рис. 2, отчетливо видны основные наиболее интенсивные линии D и G, однако их относительная интенсивность варьируется в зависимости от типа материала. В пирографите линия D достаточно слабая, в МПП-6 ее интенсивность больше, а в ПАН-волокне сравнима с интенсивностью линии G.

Для получения количественной характеристики влияния работы в качестве катода на характеристики исследуемых материалов использовалась относительная интегральная интенсивность линии D. Интенсивность определялась как отношение интегральной интенсивности линии D к интегральной интенсивности линии G для спектров, записанных в тождественных условиях. На рис. 3 представлены значения относительной интегральной интенсивности линии D всех трех материалов до и после работы в качестве катода.

На рис. 3 видно, что относительная интегральная интенсивность линии D слабо возрастает в ПАН-волокне после работы в качестве катода, в пирографите увеличивается практически вдвое, а в МПП-6 уменьшается. В соответствии с результатами работы [8] относительная интегральная интенсивность линии D уменьшается при увеличении размеров кристаллитов, из которых состоит мелкозернистый графит. Значения относительной интегральной интенсивности 0,56 и 0,46 соответствуют размеру кристаллитов в мелкозернистом графите 79 нм и 96 нм до и после работы материала в качестве катода соответственно.

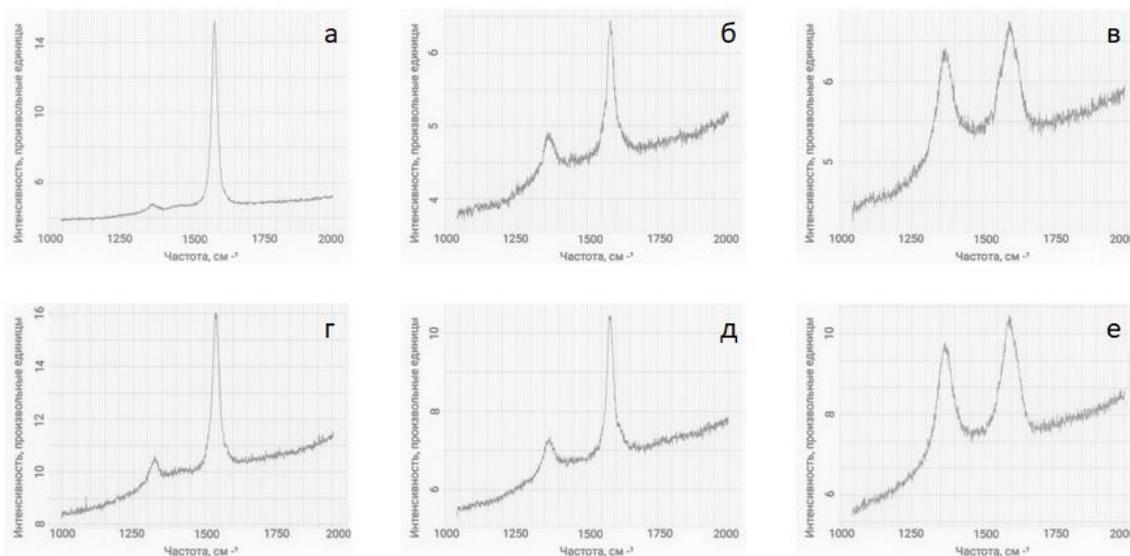


Рис. 2. Спектры комбинационного рассеяния исследуемых материалов в диапазоне от 1000 до 2000 см⁻¹, зарегистрированные при возбуждении лазерным излучением на длине волны 473 нм с использованием дифракционной решетки 1800 штр/мм.
 а – пирографит, б – МПГ-6, в – ПАН-волокно, г – пирографит катод, д – МПГ-6 катод, е – ПАН волокно катод

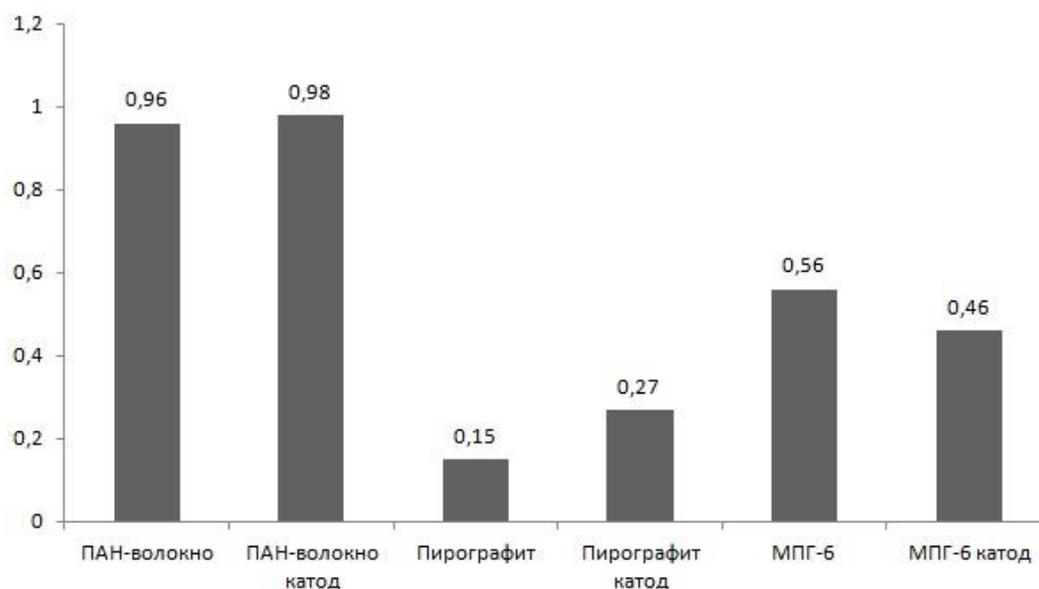


Рис. 3. Значения относительной интегральной интенсивности линии D во всех исследуемых образцах

Выводы

Зарегистрированы спектры комбинационного рассеяния всех трех материалов до работы и после работы в качестве катода в спектральном интервале от 1000 до 2000 см⁻¹. Кроме характерных для углеродных материалов линий G, D и D' обнаружена линия в интервале 1450–1460 см⁻¹, которая наблюдается в исходном материале пирографита и остается после эксплуатации, а также появляется в образце МПГ-6 после работы в качестве катода. Наибольшее изменение претерпевает относительная интегральная интенсивность линии D в пирографите и МПГ-6, в пирографите наблюдается увеличение, а в МПГ-6 – уменьшение после работы в качестве катода, что может позволить использовать относительную интегральную интенсивность линии D наряду с другими характеристиками для количественных оценок изменений свойств поверхности углеродных материалов в результате автоэмиссии электронов при использовании этих материалов в качестве автокатодов катодолуминесцентных ламп.

Литература

1. Бугаев, А.С. Катодолюминесцентные источники света (современное состояние и перспективы) / А.С. Бугаев, В.Б. Киреев, Е.П. Шешин, А.Ю. Колодяжный // Успехи физических наук. – 2015. – Т. 185, № 8. – С. 853–883.
2. Киреев, В.Б. Перспективы использования автоэмиссионных источников света для тепличных хозяйств / В.Б. Киреев, Е.П. Шешин // Одиннадцатая Международная конференция «Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология». Сборник тезисов докладов. – Москва, Троицк. – 2018. – С. 214–216.
3. Киреев В.Б. Наноматериалы для эффективных автоэмиссионных катодолюминесцентных источников света, предназначенных для обеззараживания / В.Б. Киреев, Е.П. Шешин // Научно-сфера. – 2022. – № 4(1). – С. 1–12.
4. Маломощные рентгеновские трубки (современное состояние) / А.С. Бугаев, П.А. Ерошкин, В.А. Романько, Е.П. Шешин // Успехи физических наук. – 2013. – Т. 183, № 7. – С. 727–740.
5. Горелик В. С. Комбинационное рассеяние света в кристаллах / В.С. Горелик, М.М. Сущинский // Успехи физических наук. – 1969. – Т. 98, № 2. – С. 237–294.
6. Пирографит. Получение, структура, свойства / А.С. Фиалков, А.И. Бавер, Н.М. Сидоров и др. // Успехи химии. – 1965. – Т. 34, № 1. – С. 132–153.
7. Sadrjehani M. Microstructure of Heat-Treated PAN Nanofibers / M. Sadrjehani, S.A. Hosseini Ravandi // Fibers Polym. – 2013. – Vol. 14, no. 8. – P. 1276–1282.
8. Jawhari, T. Raman Spectroscopic Characterization of some Commercially Available Carbon Black Materials / T. Jawhari, A. Roid, J. Casado // Carbon. – 1995. – Vol. 33, Iss. 11. – P. 1561–1565.
9. Wojdyr, M. Fityk: A General-Purpose Peak Fitting Program / M. Wojdyr // Journal of applied crystallography. – 2010. – Vol. 43, part 5. – P. 1126–1128.
10. Bokobza, L. Raman Spectroscopy as a Tool for the Analysis of Carbon-Based Materials (Highly oriented Pyrolytic Graphite, Multilayer Graphene and Multiwall Carbon Nanotubes) and of Some of Their Elastomeric Composites / L. Bokobza, J.L. Bruneel, M. Couzi // Vibrational Spectroscopy. – 2014. – Vol. 74. – P. 57–63.
11. Panapoy, M. Electrical Conductivity of PAN-Based Carbon Nanofibers Prepared by Electrospinning Method / M. Panapoy, A. Dankeaw, B. Ksapabutr // Thammasat Int. J. Sc. Tech. – 2008. – Vol. 13. – P. 11–17.

Поступила в редакцию 27 апреля 2023 г.

Сведения об авторах

Белов Кирилл Николаевич – ассистент, кафедра оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: belovkn@susu.ru

Бердников Алексей Сергеевич – студент, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: et1951bas35@susu.ru

Киреев Виктор Борисович – кандидат физико-математических наук, доцент, Московский физико-технический институт, г. Москва, Российская Федерация, e-mail: kireev.vb@mipt.ru

Кундикова Наталия Дмитриевна – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация; Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: kundikovand@susu.ru

Просеков Данила Николаевич – студент, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: prosekov97@mail.ru

Фунг Дык Мань – аспирант, Московский физико-технический институт, г. Москва, Российская Федерация, e-mail: phungducmanh@phystech.edu

Шешин Евгений Павлович – доктор физико-математических наук, профессор, Московский физико-технический институт, г. Москва, Российская Федерация, e-mail: sheshin@mail.mipt.ru

RAMAN SCATTERING SPECTRA OF CARBON MATERIALS
USED AS CATHODES OF AUTO-EMISSION RADIATION SOURCESK.N. Belov¹, A.S. Berdnikov¹, V.B. Kireev², N.D. Kundikova^{1,3}, D.N. Prosekov¹, Fung Duc Man², E.P. Sheshin²¹ South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation² Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russian Federation³ Institute of Electrophysics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation

e-mail: kundikovand@susu.ru

Abstract. Structured carbon materials are widely used in engineering and scientific research, in particular as materials for the auto-emission cathode of cathodoluminescent lamps. We apply Raman spectroscopy to determine the effect on fine-grained graphite (MPG-6), pyrolytic graphite, and PAN fibers when used as cathodes. Raman scattering spectra of all three materials were recorded before and after in the spectral range from 1000 to 2000 cm^{-1} . In addition to the main lines of G, D, and D' of carbon materials, we found a line in the range of (1450–1460) cm^{-1} in the initial pyrolytic graphite, in pyrolytic graphite after use as a cathode, and in the MPG-6 sample after use as a cathode. We observed the greatest change in the relative integral intensity of line D in pyrolytic graphite and MPG-6. This intensity increased in pyrolytic graphite and decreased in MPG-6 after use as a cathode. It will be possible to use the relative integral intensity of line D to evaluate the operation of a cathodoluminescent lamp.

Keywords: Raman scattering spectra; carbon materials; structured materials; auto-emission cathode.

References

1. Bugaev A.S., Kireev V.B., Sheshin E.P., Kolodyazhnyj A.Ju. Cathodoluminescent Light Sources: Status and Prospects. *Physics–Uspekhi*, 2015, Vol. 58, Iss. 8, pp. 792–818. DOI: 10.3367/UFNe.0185.201508e.0853
2. Kireev V.B., Sheshin E.P. Perspektivy ispol'zovaniya avtoemissionnykh istochnikov sveta dlya teplichnykh khozyaystv (Prospects of using Auto-Emission Light Sources for Greenhouses). *Odinnadtsataya Mezhdunarodnaya konferentsiya "Uglerod: fundamental'nye problemy nauki, materialovedenie, tekhnologiya"*. Sbornik tezisov dokladov (Proc. Eleventh International Conference "Carbon: fundamental problems of science, materials science, technology"), Moscow, Troitsk, 2018. pp. 214–216. (in Russ.).
3. Kireev V.B., Sheshin E.P. Nanomaterials for Effective Auto-Emission Cathodoluminescent Disinfecting Light Sources. *Naukosfera*, 2022, Iss. 4(1), pp. 1–12. DOI: 10.5281/zenodo.6390489
4. Bugaev A.S., Eroshkin P.A., Romanko V.A., Sheshin E.P. Low-power X-ray tubes: the current status. *Phys. Usp.*, 2013, Vol. 56, pp. 691–703. DOI: 10.3367/UFNe.0183.201307c.0727
5. Gorelik V.S., Sushchinskii M.M. Raman Scattering of Light in Crystals. *Physics–Uspekhi*, 1969, Vol. 12, Iss. 3, pp. 399–429. DOI: 10.1070/PU1969v012n03ABEH003897
6. Fialkov A.S., Baver A.I., Sidorov N.M., Chaikun M.I., Rabinovich S.M. Pyrographite (Preparation, Structure, Properties). *Russian Chemical Reviews*, 1965, Vol. 34, Iss. 1, pp. 46–58. DOI: 10.1070/RC1965v034n01ABEH001405
7. Sadrjahani M., Hosseini Ravandi S.A. Microstructure of Heat-Treated PAN nanofibers. *Fibers Polym.*, 2013, Vol. 14, no. 8, pp. 1276–1282. DOI: 10.1007/s12221-013-1276-z
8. Jawhari T., Roid A., Casado J. Raman spectroscopic characterization of some commercially available carbon black materials. *Carbon*, 1995, Vol. 33, Iss. 11, pp. 1561–1565. DOI: 10.1016/0008-6223(95)00117-V

9. Wojdyr M. Fityk: A General-Purpose Peak Fitting Program. *Journal of applied crystallography*, 2010, Vol. 43, part 5, pp. 1126–1128. DOI: 10.1107/S0021889810030499

10. Bokobza L., Bruneel J.L., Couzi M. Raman Spectroscopy as a Tool for the Analysis of Carbon-Based Materials (Highly Oriented Pyrolytic Graphite, Multilayer Graphene and Multiwall Carbon Nanotubes) and of Some of their Elastomeric Composites. *Vib. Spectrosc.*, 2014, Vol. 74, pp. 57–63. DOI: 10.1016/j.vibspec.2014.07.009

11. Panapoy M., Dankeaw A., Ksapabutr B. Electrical Conductivity of PAN-based Carbon Nanofibers Prepared by Electrospinning Method. *Thammasat Int. J. Sc. Tech.*, 2008, Vol. 13, pp. 11–17.

Received April 27, 2023

Information about the authors

Belov Kirill Nikolaevich is Assistant Professor, Optoinformatics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: belovkn@susu.ru

Berdnikov Alexey Sergeevich is student, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: et1951bas35@susu.ru

Kireev Viktor Borisovich is Cand. Sc. (Physical and Mathematics), Associate Professor, Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russian Federation, e-mail: kireev.vb@mipt.ru

Kundikova Nataliya Dmitrievna is Dr. Sc. (Physical and Mathematics), Professor, Optoinformatics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation; Institute of Electrophysics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation, e-mail: kundikovand@susu.ru

Prosekov Danila Nikolaevich is student, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: prosekov97@mail.ru

Fung Duc Man is PhD student, Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russian Federation, e-mail: phungducmanh@phystech.edu

Sheshin Evgeny Pavlovich is Dr. Sc. (Physical and Mathematics), Professor, Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russian Federation, e-mail: sheshin@mail.mipt.ru

ОСОБЕННОСТИ НАНОДВОЙНИКОВЫХ СТРУКТУР В СПЛАВАХ ГЕЙСЛЕРА $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,5}\text{In}_{0,5}$ И $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,75}\text{In}_{0,25}$

К.Р. Ерагер, Д.Р. Байгутлин, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: eragerk@rambler.ru

Аннотация. Представлены результаты расчетов фазовой стабильности и структурных свойств двойниковых структур сплавов Гейслера $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,5}\text{In}_{0,5}$ и $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,75}\text{In}_{0,25}$. Рассмотрены структуры со случайным и периодичным расположением избыточных атомов Mn в подрешетке In. Показано, что композиции $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,5}\text{In}_{0,5}$ и $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,75}\text{In}_{0,25}$ с периодами модуляции 2-5 и 3-3 соответственно являются стабильными относительно всех двойниковых структур. Распределение избыточных атомов Mn не влияет на структурные характеристики рассматриваемых концентраций. Нанодвойниковые структуры сплавов $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,5}\text{In}_{0,5}$ и $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,75}\text{In}_{0,25}$ обладают схожими параметрами кристаллической решетки. С увеличением концентрации Mn наблюдается повышение стабильности исследуемых структур по отношению к распаду на составляющие стабильные компоненты.

Ключевые слова: первопринципные вычисления; двойниковые структуры; фазовая стабильность; сплавы Гейслера.

Введение

Сплавы Гейслера на основе Ni-Mn демонстрируют бездиффузионные фазовые превращения из кубического высокотемпературного аустенита в низкотемпературную мартенситную фазу, что дает возможность для более энергоэффективного магнитокалорического охлаждения [1]. Сплавы проявляют различные эффекты, такие как магнитный эффект памяти формы [2], магнитная сверхупругость [3–7], магнитокалорический эффект [8, 9], гигантское магнитосопротивление [10], обменное смещение [11], кинетическая задержка [12, 13] и т. д. Бинарный сплав NiMn в мартенситном состоянии ниже 973 К имеет тетрагональную структуру $L1_0$ с антиферромагнитным порядком [14]. Легирование сплава NiMn Z-элементом ($Z = \text{In}, \text{Sn}, \text{Sb}$) приводит к сплавам Гейслера серии $\text{Ni}_2\text{Mn}_{2-y}\text{Z}_y$, в которых наблюдаются модулированные и тетрагональная ($L1_0$) мартенситные фазы, а также мартенситное превращение между фазами $L1_0$ и $L2_1$ (кубическая аустенитная структура). Постепенное увеличение концентрации элемента Z приводит к смене основного магнитного состояния с антиферромагнитного на ферромагнитное, а также к снижению температуры мартенситного перехода с последующим его исчезновением при критической концентрации, близкой к стехиометрии в зависимости от типа атома Z (In, Sn или Sb) [3, 15–18]. При промежуточном легировании сплавы $\text{Ni}_2\text{Mn}_{2-y}\text{Z}_y$ имеют модулированную моноклинную структуру в концентрации $\text{Ni}_{1,95}\text{Mn}_{1,19}\text{Ga}_{0,86}$, описываемую как несоизмерные 5M или 7M в мартенситном состоянии и смесь ферро- и антиферромагнитных взаимодействий [19, 20]. Наличие модулированных структур в сплавах приводит к образованию деформаций, которые и представляют особый интерес в современных технологиях. Происхождение модуляционных структур остается под вопросом, и на данный момент выдвинуто два конкурирующих объяснения [21–24].

Первое объяснение касается электронной нестабильности аустенитной фазы. Вложение поверхности Ферми в кубическую элементарную ячейку приводит к смягчению фононной моды. В результате мода колебаний решетки с определенным волновым вектором может быть возбуждена при очень низкой энергии, что приводит к легкому смещению атомных плоскостей решетки [25–27]. Поэтому модуляции интерпретируются как большие сдвиговые движения атомных слоев, застывших в равновесной мартенситной фазе.

Второе объяснение рассматривает фазовую границу между кубическим аустенитом и тетрагональным мартенситом, которая должна образоваться при переходе первого рода. Для минимизации энергии упругой деформации на границе раздела фаз необходимо переориентировать тетрагональные элементарные ячейки зеркально друг другу, которые чередуются вдоль границы раздела фаз (процесс двойникования). Различная ориентация элементарных мартенситных ячеек

связана двойниковыми границами. Если упругая энергия преобладает над энергией границы двойника, выгодно уменьшить расстояние между границами двойника до наноразмера.

В адаптивной концепции [28] модулированный мартенсит представляет собой самую короткую периодичность двойникового, определяемую параметрами решетки. Например, в сплаве Ni-Mn-Ga модулированная структура считается метастабильной, поскольку микроструктурные дефекты, такие как границы двойников, имеют избыточную энергию, которая может привести к переходу в тетрагональное основное состояние [27, 29–31]. Недавние первопринципные расчеты модулированных структур авторами [32] также показали, что самой выгодной по энергии в сплаве Ni_2MnGa является структура 4O. Ее глобальный энергетический минимум располагается около $c/a_{NM} = 1,25$, что на 5 мэВ/ф.е. ниже полностью оптимизированного немодулированного мартенсита. Наиболее важным является то, что структура 4O представляется неадаптивной, т. е. она не может образовываться напрямую, а только в результате сложного процесса перестройки дальнего порядка. Другими словами, сдерживающими факторами образования структуры 4O являются кинетические процессы, приводящие к тепловому гистерезису. Отметим, что двойникование значительно влияет на механические свойства конечных сплавов: прочность, пластичность, хрупкость, а также на электрические, магнитные и оптические свойства. В связи с этим интересным представляются исследования двойниковых структур на атомарном уровне с целью выявления их особенностей и роли в формировании наноструктурных состояний.

В настоящей работе представлены результаты первопринципных исследований структурных и магнитных свойств нанодвойниковых структур сплавов Гейслера на основе $Ni_2Mn_{1,5}In_{0,5}$ и $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$.

1. Детали вычислений

Первопринципные вычисления свойств нанодвойниковых структур типа pn и nm (pn – симметричные, nm – несимметричные) для сплавов $Ni_2Mn_{1,5}In_{0,5}$ и $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$ (табл. 1) были выполнены с помощью теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [33, 34], используя приближение GGA-PBE [35]. Геометрическая оптимизация проведена в рамках ионной релаксации для всех рассматриваемых структур с учетом ферро- (FM) и ферримагнитного (FIM) упорядочения магнитных моментов атомов Mn в «шахматном» (staggered – FIM_s) и «послойном» расположении (layered – FIM_l) (рис. 1). Для формирования составов $Ni_2Mn_{1,5}In_{0,5}$ и $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$ рассмотрены структуры с последовательным расположением избыточных атомов Mn на узлах In (Tw FIM_s) и сгенерированные методом построения специальной квазислучайной структуры с распределением Mn в подрешетке In (Tw sqs FIM_s), рассчитанной в программном пакете ATAT [36] (рис. 2), с помощью которого также нивелировалось образование «бесконечной плоскости» Mn вследствие увеличения его концентрации (рис. 3). Плотность k сетки составляла ~15 000 точек на атом обратной решетки. Энергия обрезки плоских волн составляла 460 эВ, а порог сходимости по энергии равнялся 10^{-8} эВ/атом.

Таблица 1

Период двойникового рассматриваемых структур (Т) и количество атомов в суперячейках (N ат.)

Т	2-1	2-3	2-4	2-5	2-6	2-7	1-8	1-1	2-2	3-3	4-4	5-5	6-6	7-7	8-8
N ат.	48	80	96	112	128	144	144	32	65	96	128	160	192	224	256

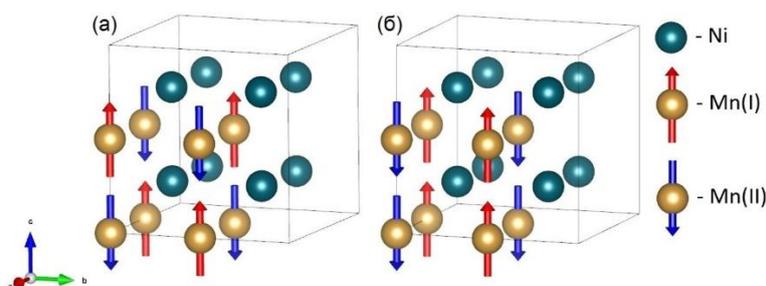


Рис. 1. Распределение магнитных моментов в 16-атомной суперячейке сплава Ni_8Mn_8 :
а – FIM_s, б – FIM_l упорядочения

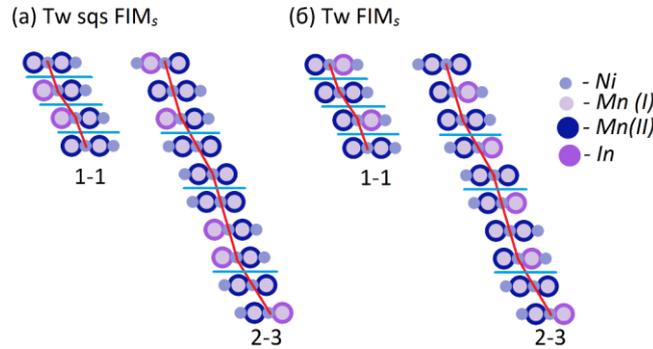


Рис. 2. Примеры двойниковых структур для сплава $Ni_2Mn_{1.75}In_{0.25}$: а – расположение избыточных атомов согласно расчетам в программном пакете ATAT (Tw sqs FIM_s), б – последовательное расположение избыточных атомов Mn в подрешетке In (Tw FIM_s) Красной ломаной линией обозначен период двойничивания, а синей – двойниковые границы

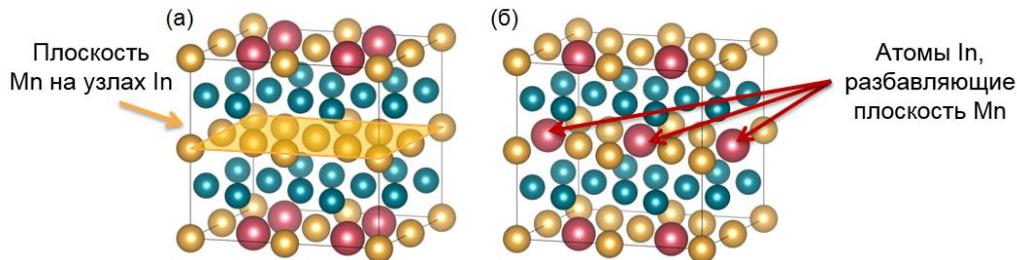


Рис. 3. а – образование марганцевой плоскости в 32-х атомной суперячейке сплава $Ni_2Mn_{1.5}In_{0.5}$ FIM_s вследствие расположения избыточных атомов Mn в узлах In, б – энергетически выгодная структура с атомами In (sqs FIM), расположенными в плоскости, позволяющими нивелировать дефект «бесконечной плоскости» атомов Mn

2. Результаты вычислений

Для исследования вопросов устойчивости кубической структуры по отношению к тетрагональному искажению нами были выполнены расчеты полной энергии кристалла как функции тетрагонального искажения c/a для систем с ферро- и ферримагнитным упорядочением магнитных моментов. Данные зависимости представлены на рис. 4 и 5. Графики построены нормировано на тетрагональную фазу основного состояния рассматриваемых сплавов. По данным расчетов геометрической оптимизации кристаллических структур двойниковые структуры с последовательным расположением избыточных атомов Mn демонстрируют большую энергию основного состояния, что говорит о фазовой нестабильности. Это связано с образованием марганцевой «бесконечной плоскости» в слое кристалла, которая является дефектом (рис. 3). Термин «бесконечная плоскость» вытекает из теоремы Блоха. В связи с этим на следующем этапе использовался программный пакет ATAT, который позволяет предсказать наиболее вероятное и энергетически выгодное расположение нужных атомов в структуре.

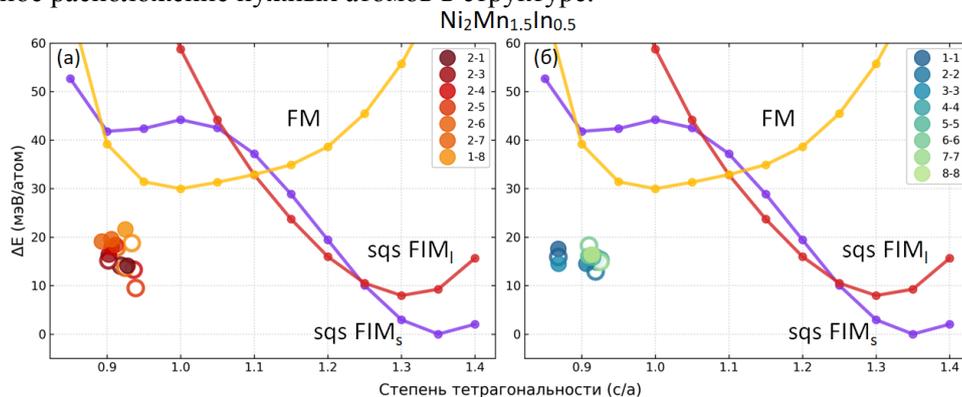


Рис. 4. Зависимость полной энергии ΔE от тетрагонального искажения c/a для сплава $Ni_2Mn_{1.5}In_{0.5}$ с FM, FIM_s-и FIM_l: а – pm двойниковые структуры, б – pp двойниковые структуры. Открытыми символами обозначены двойниковые структуры Tw sqs FIM_s, а закрашенными – Tw FIM_s

Можно видеть, что в случае сплава $Ni_2Mn_{1.5}In_{0.5}$ возможен переход из ферромагнитной аустенитной фазы в ферримагнитную мартенситную sqs FIM_s фазу с энергией кристалла $E = -6,52$ эВ/атом. Самой стабильной из всех рассматриваемых двойниковых структур сплава $Ni_2Mn_{1.5}In_{0.5}$

является структура 2-5 со степенью тетрагональности $c/a \sim 0,94$ и энергией основного состояния $E = -6,51$ эВ/атом. Разница с тетрагональной FIM_s фазой составляет $\sim 9,5$ мэВ/атом.

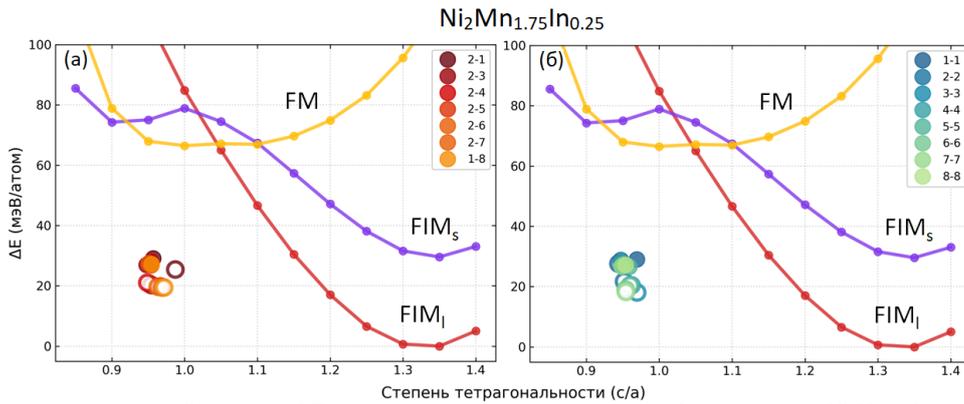


Рис. 5. Зависимость полной энергии ΔE от тетрагонального искажения c/a для сплава $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$ с FM, FIM_s и FIM_l : а – nm , б – pn двойниковые структуры. Открытыми символами обозначены двойниковые структуры Tw sqs FIM_s , а закрашенными – Tw FIM_s

В сплаве $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$ наблюдается переход из ферромагнитной аустенитной фазы в ферри-магнитную мартенситную FIM_l фазу с энергией основного состояния $E = -6,94$ эВ/атом. Самой стабильной из всех рассматриваемых двойниковых структур сплава $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$ является симметричная структура 3-3 со степенью тетрагональности $c/a \sim 0,97$ и энергией основного состояния $E = -6,925$ эВ/атом. Разница с тетрагональной FIM_l фазой составляет $\sim 18,1$ мэВ/атом.

На рис. 6 представлена рассчитанная разница энергий между рассматриваемыми двойниковыми структурами Tw FIM_s и Tw sqs FIM_s , наглядно демонстрирующая стабильность композиций, сгенерированных программным пакетом АТАТ. Для сплава $Ni_2Mn_{1,5}In_{0,5}$ разница между самой выгодной структурой двойника 2-5 Tw sqs FIM_s и 2-5 Tw FIM_s составляет $\sim 8,97$ мэВ/атом, тогда как для сплава $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$ разница в энергии между структурами 3-3 Tw sqs FIM_s и 3-3 Tw FIM_s близка к $\sim 8,59$ мэВ/атом. Нанодвойниковые структуры 2-1, 3-3, 4-4 и 5-5 сплава $Ni_2Mn_{1,5}In_{0,5}$ характеризуются близкими по значениям энергиями с разницей $< 0,5$ мэВ/атом между Tw FIM_s и Tw sqs FIM_s типами двойников.

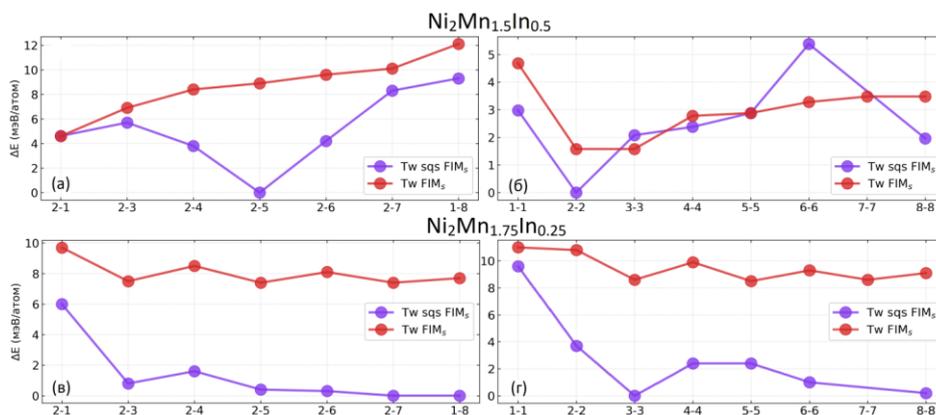


Рис. 6. Зависимость полной энергии ΔE от модуляции сплавов: а, б – $Ni_2Mn_{1,5}In_{0,5}$ и в, г – $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$ для nm (а, в) и pn (б, г) двойниковых структур Tw FIM_s и Tw sqs FIM_s

Перейдем к обсуждению значений параметров решеток всех нанодвойников, прошедших геометрическую оптимизацию, в рамках оценки сходимости структурных характеристик Tw FIM_s и Tw sqs FIM_s .

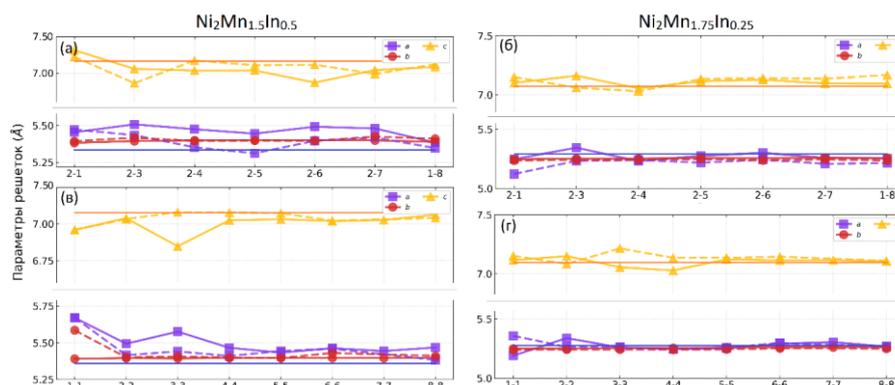


Рис. 7. Зависимость параметров решетки от модуляции сплавов: а, б – $Ni_2Mn_{1.5}In_{0.5}$ и в, г – $Ni_2Mn_{1.75}In_{0.25}$ для nm (а, б) и ll (в, г) двойниковых структур $Tw FIM_s$ – непрерывная линия и $Tw sqs FIM_s$ – пунктирная линия; синей и оранжевой линией обозначены параметры решеток для минимумов FIM_s и FIM_l в немодулированных мартенситных фазах в соответствии с рассматриваемыми композициями

По данным расчетов параметров решеток для всех исследованных структур наблюдается согласованность между $Tw FIM_s$ и $Tw sqs FIM_s$, что говорит об отсутствии влияния распределения избыточных атомов Mn в подрешетке In на структурные характеристики сплавов, прошедших полную геометрическую оптимизацию.

Рассмотрим далее вопрос фазовой стабильности исследуемых соединений по отношению к их сегрегации на составляющие стабильные компоненты. Для сплавов $Ni_2Mn_{1.5}In_{0.5}$ и $Ni_2Mn_{1.75}In_{0.25}$ были сгенерированы все возможные комбинации реакций вероятного распада на стабильные компоненты с соответствующими стехиометрическими коэффициентами:

Таблица 2

Реакции вероятного распада на стабильные компоненты сплавов $Ni_2Mn_{1.5}In_{0.5}$ и $Ni_2Mn_{1.75}In_{0.25}$

№	Реактант	Продукты распада
$Ni_2Mn_{1.5}In_{0.5}$		
1	$261 Ni_8Mn_6In_2 \rightarrow$	$58 In_9 + 27 Mn_{58} + 522 Ni_4$
2	$406 Ni_8Mn_6In_2 \rightarrow$	$29 In_{28}Ni_{12} + 42 Mn_{58} + 725 Ni_4$
3	$174 Ni_8Mn_6In_2 \rightarrow$	$116 In_3Ni_3 + 18 Mn_{58} + 261 Ni_4$
4	$261 Ni_8Mn_6In_2 \rightarrow$	$58 In_9 + 15 Mn_{58} + 696 MnNi_3$
5	$1218 Ni_8Mn_6In_2 \rightarrow$	$87 In_{28}Ni_{12} + 76 Mn_{58} + 2900 MnNi_3$
6	$87 Ni_8Mn_6In_2 \rightarrow$	$58 In_3Ni_3 + 6 Mn_{58} + 174 MnNi_3$
7	$36 Ni_8Mn_6In_2 \rightarrow$	$8 In_9 + 18 Ni_4 + 27 Ni_8Mn_8$
8	$72 Ni_8Mn_6In_2 \rightarrow$	$16 In_9 + 72 MnNi_3 + 45 Ni_8Mn_8$
9	$28 Ni_8Mn_6In_2 \rightarrow$	$2 In_{28}Ni_{12} + 8 Ni_4 + 21 Ni_8Mn_8$
10	$28 Ni_8Mn_6In_2 \rightarrow$	$2 In_{28}Ni_{12} + 16 MnNi_3 + 19 Ni_8Mn_8$
11	$12 Ni_8Mn_6In_2 \rightarrow$	$8 In_3Ni_3 + 9 Ni_8Mn_8$
$Ni_2Mn_{1.75}In_{0.25}$		
1	$522 Ni_8Mn_7In_1 \rightarrow$	$58 In_9 + 63 Mn_{58} + 1044 Ni_4$
2	$812 Ni_8Mn_7In_1 \rightarrow$	$29 In_{28}Ni_{12} + 98 Mn_{58} + 1537 Ni_4$
3	$348 Ni_8Mn_7In_1 \rightarrow$	$116 In_3Ni_3 + 42 Mn_{58} + 609 Ni_4$
4	$522 Ni_8Mn_7In_1 \rightarrow$	$58 In_9 + 39 Mn_{58} + 1392 MnNi_3$
5	$2436 Ni_8Mn_7In_1 \rightarrow$	$87 In_{28}Ni_{12} + 188 Mn_{58} + 6148 MnNi_3$
6	$87 Ni_8Mn_7In_1 \rightarrow$	$29 In_3Ni_3 + 7 Mn_{58} + 203 MnNi_3$
7	$72 Ni_8Mn_7In_1 \rightarrow$	$8 In_9 + 18 Ni_4 + 63 Ni_8Mn_8$
8	$144 Ni_8Mn_7In_1 \rightarrow$	$16 In_9 + 72 MnNi_3 + 117 Ni_8Mn_8$
9	$56 Ni_8Mn_7In_1 \rightarrow$	$2 In_{28}Ni_{12} + 8 Ni_4 + 49 Ni_8Mn_8$
10	$56 Ni_8Mn_7In_1 \rightarrow$	$2 In_{28}Ni_{12} + 16 MnNi_3 + 47 Ni_8Mn_8$
11	$24 Ni_8Mn_7In_1 \rightarrow$	$8 In_3Ni_3 + 21 Ni_8Mn_8$

Список стабильных бинарных соединений был взят из базы данных Materials project [37]. В результате была рассчитана энергия формирования E_{form} как разница E_{tot} и сумма E_i возможных бинарных соединений:

$$E_{form} = E_{tot} - \sum_i^N E_i^{Stable},$$

где E_{tot} – полная энергия, E_i – энергия каждого компонента в его кристаллической структуре, N – различное количество компонентов распада. Отрицательное значение E_{form} указывает на то, что данное соединение будет устойчивым к сегрегации на смесь бинарных соединений и чистых элементов и наоборот. Это означает, что данное соединение может быть синтезировано в равновесных физических условиях.

В обогащенных сплавах $Ni_2Mn_{1+x}In_{1-x}$, с увеличением концентрации Mn за счет уменьшения содержания In по отношению к стехиометрии ($x = 0$) можно говорить о постепенном увеличении вероятной стабильности композиций вплоть до критического насыщения Mn (рис. 8), близкого к концентрации композиции Ni_2Mn_2 . Для самой энергетически «выгодной» структуры nm 2-5 Tw sqs FIM_s сплава $Ni_2Mn_{1,5}In_{0,5}$ характерно наличие лишь трех реакций распада, гарантирующих отрицательную энергию формирования, обеспечивающую стабильность композиций. С увеличением концентрации Mn до $x = 0,75$ наблюдается 5 стабильных реакций для структуры nn 3-3 Tw sqs FIM_s и 4 устойчивые реакции для структуры nm 3-3 Tw FIM_s. Данное наблюдение позволяет сделать предположение о существовании наиболее устойчивых к распаду двойниковых структур в бинарном сплаве Ni_2Mn_2 .

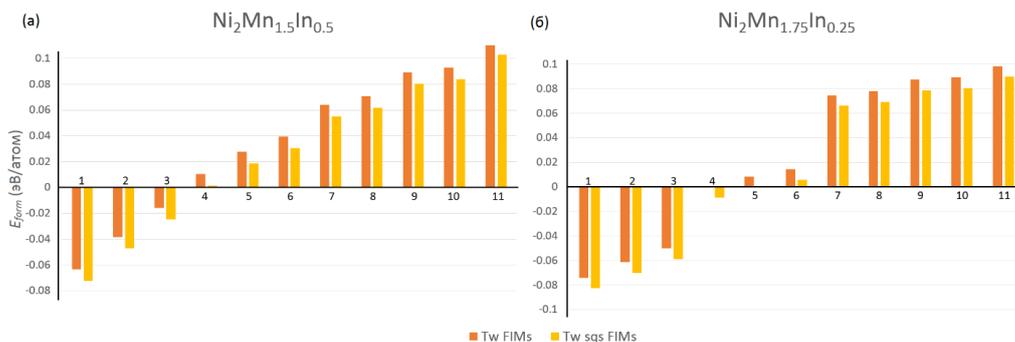


Рис. 8. Энергия формирования двойниковых структур nm 2-5 и nn 3-3 Tw FIM_s и Tw sqs FIM_s сплавов а – $Ni_2Mn_{1,5}In_{0,5}$ и б – $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$ соответственно, где 1 ... 11 – рассмотренные реакции распада, представленные в табл. 2

Заключение

По данным проведенных исследований показана возможность мартенситного перехода из FM аустенитной фазы $L2_1$ в FIM_s и FIM_l для сплавов $Ni_2Mn_{1,5}In_{0,5}$ и $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$ соответственно. Дефект структуры, связанный с образованием марганцевой «бесконечной плоскости» в слое кристалла, возможно нивелировать путем генерирования ячейки методом построения специальной квазислучайной структуры с распределением Mn в подрешетке In. Нанодвойниковые структуры с периодом модуляции 2-5 Tw sqs FIM_s и 3-3 Tw sqs FIM_s для $Ni_2Mn_{1,5}In_{0,5}$ и для $Ni_2Mn_{1,75}In_{0,25}$, соответственно, являются самыми стабильными относительно всех двойниковых структур с разницей относительно тетрагональной фазы на ~ 9,5 мэВ/атом и ~ 18,1 мэВ/атом соответственно. Распределение избыточных атомов Mn не влияет на структурные характеристики конечных рассматриваемых сплавов. С увеличением концентрации Mn наблюдается увеличение количества стабильных реакций распада, что говорит о наиболее вероятной стабильности нанодвойниковых структур в сплаве Ni_2Mn_2 .

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзадания № 075-01493-23-00. К.Р. Ерагер выражает благодарность фонду поддержки молодых ученых ФГБОУ ВО «ЧелГУ».

Литература

1. Inverse Magnetocaloric Effect in Ferromagnetic Ni–Mn–Sn Alloys / Т. Krenke, Е. Duman, М. Acet *et al.* // Nat. Mater. – 2005. – Vol. 4. – 450 p.

2. Magnetic Order and Phase Transformation in Ni₂MnGa / P.J. Webster, K.R.A. Ziebeck, S.L. Town, M.S. Peak // *Philosophical Magazine B*. – 1984. – Vol. 49, Iss. 3. – P. 295–310.
3. Magnetic and Martensitic Transformations of NiMnX(X=In,Sn,Sb) Ferromagnetic Shape Memory Alloys / Y. Sutou, Y. Imano, N. Koeda *et al.* // *Appl. Phys. Lett.* – 2004. – Vol. 85, Iss. 19. – P. 4358.
4. Martensitic Transitions and the Nature of Ferromagnetism in the Austenitic and Martensitic States of Ni–Mn–Sn Alloys / T. Krenke, M. Acet, E.F. Wassermann *et al.* // *Phys. Rev. B*. – 2005. – Vol. 72, Iss. 1. – p. 014412.
5. Ferromagnetism in the Austenitic and Martensitic States of Ni–Mn–In alloys / T. Krenke, M. Acet, E.F. Wassermann *et al.* // *Phys. Rev. B*. – 2006. – Vol. 73, Iss. 17. – P. 174413.
6. Magnetic superelasticity and inverse magnetocaloric effect in Ni–Mn–In / T. Krenke, E. Duman, M. Acet *et al.* // *Phys. Rev. B*. – 2007. – Vol. 75, Iss. 10. – P. 104414.
7. Magnetic-Field-Induced Shape Recovery by Reverse Phase Transformation / R. Kainuma, Y. Imano, W. Ito *et al.* // *Nature*. – 2006. – Vol. 439. – P. 957–960.
8. Inverse magnetocaloric effect in ferromagnetic Ni–Mn–Sn alloys / T. Krenke, E. Duman, M. Acet // *Nat. Mater.* – 2005. – Vol. 4. – 450 p. DOI: 10.1038/nmat1395
9. Cooling and heating by adiabatic magnetization in the Ni₅₀Mn₃₄In₁₆ magnetic shape-memory alloy / X. Moya, L. Mañosa, A. Planes *et al.* // *Phys. Rev. B*. – 2007. – Vol. 75, Iss. 18. – P. 184412.
10. Giant magnetoresistance and large inverse magnetocaloric effect in Ni₂Mn_{1.36}Sn_{0.64} alloy / S. Chatterjee, S. Giri, S. Majumdar, S.K. De // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2009. – Vol. 42. – P. 065001.
11. Exchange Bias Behavior in Ni–Mn–Sb Heusler Alloys / M. Khan, I. Dubenko, S. Stadler, N. Ali // *Appl. Phys. Lett.* – 2007. – Vol. 91, Iss. 7. – P. 072510.
12. Kinetic Arrest of Martensitic Transformation in the NiCoMnIn Metamagnetic Shape Memory Alloy / W. Ito, K. Ito, R.Y. Umetsu *et al.* // *Appl. Phys. Lett.* – 2008. – Vol. 92, Iss. 2. – P. 021908.
13. Sharma, V.K. Kinetic Arrest of the First Order Austenite to Martensite Phase Transition in Ni₅₀Mn₃₄In₁₆: dc Magnetization Studies B / V.K. Sharma, M.K. Chattopadhyay, S. Roy // *Phys. Rev. B*. – 2007. – Vol. 76, Iss. 14. – P. 140401(R).
14. Structures and Phase Transformations in the Mn–Ni System Near Equiatomic Concentration / E. Kren, E. Nagy, L. Pal, P. Szabo // *J. Phys. Chem. Sol.* – 1968. – Vol. 29. – P. 101–108.
15. Planes, A. Magnetocaloric effect and its relation to shape-memory properties in ferromagnetic Heusler alloys / A. Planes, L. Mañosa, M. Acet // *J. Phys.: Condens Matter*. – 2009. – Vol. 21, no. 23. – P. 233201.
16. Tailoring Magnetic and Magnetocaloric Properties of Martensitic Transitions in Ferromagnetic Heusler Alloys / S. Aksoy, T. Krenke, M. Acet *et al.* // *Appl. Phys. Lett.* – 2007. – Vol. 91, Iss. 24. – P. 241916.
17. A First-Principles Investigation of the Compositional Dependent Properties of Magnetic Shape Memory Heusler Alloys / M. Siewert, M.E. Gruner, A. Hucht *et al.* // *Adv. Eng. Mater.* – 2012. – Vol. 14, Iss. 8. – 530 p.
18. Interaction of Phase Transformation and Magnetic Properties of Heusler Alloys: A Density Functional Theory Study / P. Entel, M.E. Gruner, D. Comtesse, M. Wuttig // *JOM*. – 2013. – Vol. 65. – P. 1540.
19. Commensurate and incommensurate “5M” modulated crystal structures in Ni–Mn–Ga martensitic phases / L. Righi, F. Albertini, L. Pareti *et al.* // *Acta Mater.* – 2007. – Vol. 55, Iss. 15. – P. 5237.
20. Crystal structure of 7M modulated Ni–Mn–Ga martensitic phase / L. Righi, F. Albertini, E. Villa *et al.* // *Acta Mater.* – 2008. – Vol. 56, Iss. 16. – p. 4529.
21. Collective Modes and Structural Modulation in Ni–Mn–Ga(Co) Martensite Thin Films Probed by Femtosecond Spectroscopy and Scanning Tunneling Microscopy / M. Schubert, H. Schaefer, J. Mayer *et al.* // *Phys. Rev. Lett.* – 2015. – Vol. 115, Iss. 7. – P. 076402.
22. Ab initio Prediction of Martensitic and Intermartensitic Phase Boundaries in Ni–Mn–Ga / B. Dutta, A. Çakır, C. Giacobbe *et al.* // *Phys. Rev. Lett.* – 2016. – Vol. 116, Iss. 2. – P. 025503.
23. Adaptive Modulation in Ni₂Mn_{1.4}In_{0.6} Magnetic Shape Memory Heusler Alloy / P. Devi, S. Singh, B. Dutta *et al.* // *Phys. Rev. B*. – 2018. – Vol. 97, Iss. 22. – P. 224102.

24. Structure and Microstructure of Ni-Mn-Ga Single Crystal Exhibiting Magnetic Shape Memory Effect Analysed by High Resolution X-ray Diffraction / O. Heczko, P. Cejpek, J. Drahokoupil, V. Holy // *Acta Mater.* – 2016. – Vol. 115. – P. 250–258.
25. Lee, Y. Generalized susceptibility of the magnetic shape-memory alloy Ni_2MnGa / Y. Lee, J.Y. Rhee, B.N. Harmon // *Phys. Rev. B.* – 2002. – Vol. 66, Iss. 5. – P. 054424.
26. Bungaro C., Rabe K.M., Dal Corso A. First-Principles Study of Lattice Instabilities in Ferromagnetic Ni_2MnGa / C. Bungaro, K.M. Rabe, A. Dal Corso // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol. 68, Iss. 13. – P. 134104.
27. The Role of Adaptive Martensite in Magnetic Shape Memory Alloys / R. Niemann, U.K. Röbner, M.E. Gruner *et al.* // *Adv. Eng. Mater.* – 2012. – Vol. 14, Iss. 8. – P. 562–581.
28. Khachaturyan, A.G. Adaptive phase formation in martensitic transformation / A.G. Khachaturyan, S.M. Shapiro, S. Semenovskaya // *Phys. Rev. B.* – 1991. – Vol. 43, Iss. 13. – P. 10832.
29. Modulated Martensite: Why it Forms and Why it Deforms Easily / S. Kaufmann, R. Niemann, T. Thersleff *et al.* // *New J. of Phys.* – 2011. – Vol. 13. – P. 053029.
30. Müllner, P. Deformation of Hierarchically Twinned Martensite / P. Müllner, A.H. King // *Acta Mater.* – 2010. – Vol. 58, Iss. 16. – P. 5242.
31. Adaptive Modulations of Martensites / S. Kaufmann, U.K. Röbner, O. Heczko *et al.* // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – Vol. 104, Iss. 14. – P. 145702.
32. Modulations in Martensitic Heusler Alloys Originate from Nanotwin Ordering / M.E. Gruner, R. Niemann, P. Entel *et al.* // *Sci. rep.* – 2018. – Vol. 8. – pp. 1–12.
33. Kresse, G. Efficient Iterative Schemes for *ab initio* Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Phys. Rev. B.* – 1996. – Vol. 54, Iss. 16. – P. 11169.
34. Kresse, G. From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method / G. Kresse, D. Joubert // *Phys. Rev. B.* – 1999. – Vol. 59. – P. 1758.
35. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Phys. Rev. B.* – 1996. – Vol. 77, Iss. 18. – P. 3865.
36. van de Walle, A. The Alloy-Theoretic Automated Toolkit: A User Guide / A. van de Walle, M. Asta, G. Ceder // *Brown University, Providence, RI, Tech. Rep.* – 2019. <https://www.brown.edu/Departments/Engineering/Labs/avdw/atat/manual.pdf>
37. Commentary: The Materials Project: A Materials Genome Approach to Accelerating Materials Innovation / A. Jain, S.P. Ong, G. Hautier *et al.* // *APL Mater.* 2013. – Vol. 1, Iss. 1. – P. 011002.

Поступила в редакцию 26 апреля 2023 г.

Сведения об авторах

Ерагер Ксения Романовна – аспирант, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: eragerk@rambler.ru

Байгутлин Данил Расулович – аспирант, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

Соколовский Владимир Владимирович – доктор физико-математических наук, доцент, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: vsokolovsky84@mail.ru

Бучельников Василий Дмитриевич – доктор физико-математических наук, профессор, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: buche@csu.ru

PECULIARITIES OF NANOTWIN STRUCTURES IN $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,5}\text{In}_{0,5}$
AND $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,75}\text{In}_{0,25}$ HEUSLER ALLOYS

K.R. Erager, D.R. Baigutlin, V.V. Sokolovskiy, V.D. Buchelnikov
Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: eragerk@rambler.ru

Abstract. This article presents the results of calculating the phase stability and structural properties of the twin structures of $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,5}\text{In}_{0,5}$ and $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,75}\text{In}_{0,25}$ Heusler alloys. The structures with a random and periodic arrangement of Mn-excess atoms in the In sublattice were considered. It is shown that the compositions of $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,5}\text{In}_{0,5}$ and $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,75}\text{In}_{0,25}$, with modulation periods of 2–5 and 3–3, respectively, are stable relative to all twin structures. The distribution of Mn-excess atoms does not affect the structural characteristics of the systems. The nanotwin structures of $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,5}\text{In}_{0,5}$ and $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,75}\text{In}_{0,25}$ alloys possess similar crystal lattice parameters. An increase in the stability of the structures with respect to the decomposition into constituent stable components is observed with an increase in the concentration of Mn.

Keywords: *ab initio* calculations; twin structures; phase stability; Heusler alloys.

References

1. Krenke T., Duman E., Acet M., Wassermann E. F., Moya X., Mañosa L, Planes A. Inverse Magnetocaloric Effect in Ferromagnetic Ni–Mn–Sn Alloys. *Nat. Mater.*, 2005, Vol. 4, pp. 450–454. DOI: 10.1038/nmat1395.
2. Webster P.J., Ziebeck K.R.A., Town S.L., Peak M.S. Magnetic Order and Phase Transformation in Ni_2MnGa . *Philos. Mag.*, 1984, Vol. 49, Iss. 3, pp. 295–310. DOI: DOI: 10.1080/13642817408246515
3. Sutou Y., Imano Y., Koeda N., Omori T., Kainuma R., Ishida K., Oikawa K. Magnetic and Martensitic Transformations of NiMnX ($X=\text{In, Sn, Sb}$) Ferromagnetic Shape Memory Alloys. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, Vol. 85, Iss. 19, pp. 4358. DOI: 10.1063/1.1808879
4. Krenke T., Acet M., Wassermann E.F., Moya X., Mañosa L, Planes A. Martensitic Transitions and the Nature of Ferromagnetism in the Austenitic and Martensitic States of Ni–Mn–Sn Alloys. *Phys. Rev. B*. 2005, Vol. 72, Iss. 1, pp. 014412. DOI: 10.1103/PhysRevB.72.014412
5. Krenke T., Acet M., Wassermann E. F., Moya X., Mañosa L, Planes A. Ferromagnetism in the Austenitic and Martensitic States of Ni–Mn–In Alloys. *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 73, Iss. 17. pp. 174413. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.174413
6. Krenke T., Duman E., Acet M., Wassermann E. F., Moya X., Mañosa L, Planes A. Suard E., Ouladdiaf B. Magnetic Superelasticity and Inverse Magnetocaloric Effect in Ni–Mn–In. *Phys. Rev. B.*, 2007, Vol. 75, Iss. 10, p. 104414. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.104414
7. Kainuma R., Imano Y., Ito W., Sutou Y., Morito H., Okamoto S., Kitakami O., Oikawa K., Fujita A., Kanomata T., Ishida K. Magnetic-Field-Induced Shape Recovery by Reverse Phase Transformation. *Nature*, 2006, Vol. 439, pp. 957–960. DOI: 10.1038/nature04493
8. Krenke T., Duman E., Acet M., Wassermann E. F., Moya X., Mañosa L, Planes A. Inverse Magnetocaloric Effect in Ferromagnetic Ni–Mn–Sn alloys. *Nat. Mater.*, 2005, Vol. 4, 450 p. DOI: 10.1038/nmat1395
9. Moya X., Mañosa L, Planes A., Aksoy S., M. Acet, Wassermann E. F., and Krenke T. Cooling and heating by adiabatic magnetization in the $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{In}_{16}$ magnetic shape-memory alloy. *Phys. Rev. B.*, 2007, Vol. 75, Iss. 18, pp. 184412. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.184412.
10. Chatterjee S., Giri S., Majumdar S., De S. K. Giant magnetoresistance and large inverse magnetocaloric effect in $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1,36}\text{Sn}_{0,64}$ alloy. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2009, Vol. 42, pp. 065001. DOI: 10.1088/0022-3727/42/6/065001

11. Khan M., Dubenko I., Stadler S., Ali N. Exchange Bias Behavior in Ni-Mn-Sb Heusler Alloys. *Appl. Phys. Lett.* 2007. Vol. 91, Iss. 7. pp. 072510. DOI: 10.1063/1.2772233
12. Ito W., Ito K., Umetsu R. Y., Kainuma R., Koyama K., Watanabe K., Fujita A., Oikawa K., Ishida K., Kanomata T. Kinetic Arrest of Martensitic Transformation in the NiCoMnIn Metamagnetic Shape Memory Alloy. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, Vol. 92, Iss. 2, pp. 021908. DOI: 10.1063/1.2833699
13. Sharma V. K., Chattopadhyay M. K., Roy S. Kinetic Arrest of the First Order Austenite to Martensite Phase Transition in $Ni_{50}Mn_{34}In_{16}$: dc Magnetization Studies B. *Phys. Rev. B.*, 2007, Vol. 76, Iss. 14, pp. 140401(R). DOI: 10.1103/PhysRevB.76.140401
14. Kren E., Nagy E., Pal L., Szabo P. Structures and Phase Transformations in the Mn-Ni System Near Equiatomic Concentration. *J. Phys. Chem. Sol.*, 1968, Vol. 29, pp. 101–108. DOI: 10.1016/0022-3697(68)90259-X
15. Planes A., Mañosa L., Acet M. Magnetocaloric Effect and its Relation to Shape-Memory Properties in Ferromagnetic Heusler Alloys. *J. Phys.: Condens Matter.*, 2009, Vol. 21, no. 23, pp. 233201. DOI: 10.1088/0953-8984/21/23/233201
16. Aksoy S., Krenke T., Acet M., Wassermann E. F., Moya X., Mañosa L., Planes A. Tailoring Magnetic and Magnetocaloric Properties of Martensitic Transitions in Ferromagnetic Heusler Alloys. *Appl. Phys. Lett.* 2007, Vol. 91, Iss. 24, p. 241916. DOI: 10.1063/1.2825283
17. Siewert M., Gruner M.E., Hucht A., Herper H.C., Dannenberg A., Chakrabarti A., Singh N., Arróyave R., Entel P. A First-Principles Investigation of the Compositional Dependent Properties of Magnetic Shape Memory Heusler Alloys. *Adv. Eng. Mater.*, 2012, Vol. 14, Iss. 8, 530 p. DOI: 10.1002/adem.201200063
18. Entel P., Gruner M.E., Comtesse D., Wuttig M. Interaction of Phase Transformation and Magnetic Properties of Heusler Alloys: A Density Functional Theory Study. *JOM*, 2013, Vol. 65, P. 1540. DOI:10.1007/s11837-013-0757-2
19. Righi L., Albertini F., Pareti L., Paoluzi A., Calestani G. Commensurate and incommensurate “5M” modulated crystal structures in Ni–Mn–Ga martensitic phases. *Acta Mater.*, 2007, Vol. 55, Iss. 15, P. 5237. DOI: 10.1016/j.actamat.2007.05.040
20. Righi L., Albertini F., Villa E., Paoluzi A., Calestani G., Chernenko V., Besseghini S., Ritter C., Passaratti F. Crystal structure of 7M modulated Ni–Mn–Ga martensitic phase. *Acta Mater.*, 2008, Vol. 56, Iss. 16, pp. 4529. DOI: 10.1016/j.actamat.2008.05.010
21. Schubert M., Schaefer H., Mayer J., Laptev A., Hettich M., Merklein M., He C., Rummel C., Ristow O., Großmann M., Luo Y., Gusev V., Samwer K., Fonin M., Dekorsy T., Demsar J. Collective Modes and Structural Modulation in Ni-Mn-Ga(Co) Martensite Thin Films Probed by Femtosecond Spectroscopy and Scanning Tunneling Microscopy. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115, Iss. 7. pp. 076402. DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.076402
22. Dutta B., Çakır A., Giacobbe C., Al-Zubi A., Hickel T., Acet M., Neugebauer J. Ab initio Prediction of Martensitic and Intermartensitic Phase Boundaries in Ni-Mn-Ga. *Phys. Rev. Lett.*, 2016, Vol. 116, Iss. 2. pp. 025503. DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.025503
23. Devi P., Singh S., Dutta B., Manna K., D'Souza S.W., Ikeda Y., Suard E., Petricek V., Simon P., Werner P., Chadov S., Parkin S.S.P., Felser C., Pandey D. Adaptive Modulation in $Ni_2Mn_{1,4}In_{0,6}$ Magnetic Shape Memory Heusler Alloy. *Phys. Rev. B.*, 2018, Vol. 97, Iss. 22, p. 224102. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.224102
24. Heczko O., Cejpek P., Drahokoupil J., Holy V. Structure and Microstructure of Ni-Mn-Ga Single Crystal Exhibiting Magnetic Shape Memory Effect Analysed by High Resolution X-ray Diffraction. *Acta Mater.*, 2016, Vol. 115, pp. 250–258. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.05.047
25. Lee Y., Rhee J.Y., Harmon B.N. Generalized Susceptibility of the Magnetic Shape-Memory Alloy Ni_2MnGa . *Phys. Rev. B.*, 2002, Vol. 66, Iss. 5, p. 054424. DOI: 10.1103/PhysRevB.66.054424
26. Bungaro C., Rabe K.M., Dal Corso A. First-Principles Study of Lattice Instabilities in Ferromagnetic Ni_2MnGa . *Phys. Rev. B.*, 2003, Vol. 68, p. 134104. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.134104
27. Niemann R., Röbner U. K., Gruner M. E., Heczko O., Schultz L., Fähler S. The Role of Adaptive Martensite in Magnetic Shape Memory Alloys. *Adv. Eng. Mater.*, 2012, Vol. 14, Iss. 8, pp. 562–581. DOI: 10.1002/adem.201200058

28. Khachaturyan A. G., Shapiro S. M., Semenovskaya S. Adaptive Phase Formation in Martensitic Transformation. *Phys. Rev. B*, 1991, Vol. 43, Iss. 13, p. 10832. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.10832>

29. Kaufmann S., Niemann R., Thersleff T., Rößler U. K., Heczko O., Buschbeck J., Holzapfel B., Schultz L., Fähler S. Modulated Martensite: Why it Forms and Why it Deforms Easily. *New J. of Phys.*, 2011, Vol. 13, P. 053029. DOI: 10.1088/1367-2630/13/5/053029

30. Müllner P., King A. H. Deformation of hierarchically twinned martensite. *Acta Mater.*, 2010, Vol. 58, Iss. 16, p. 5242. DOI: 10.1016/j.actamat.2010.05.048

31. Kaufmann S., Rößler U.K., Heczko O., Wuttig M., Buschbeck J., Schultz L., Fähler S. Adaptive Modulations of Martensites. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, Vol. 104, pp. 145702. DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.145702

32. Gruner M. E., Niemann R., Entel P., Pentcheva R., Rößler U. K., Nielsch K., Fähler S. Modulations in Martensitic Heusler Alloys Originate from Nanotwin Ordering. *Sci. rep.*, 2018, Vol. 8, pp. 1–12. DOI: 10.1038/s41598-018-26652-6

33. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 1996, Vol. 54, Iss. 16, p. 11169. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169

34. Kresse G., Joubert D. From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method. *Phys. Rev. B*, 1999, Vol. 59, Iss. 3, p. 1758. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.1758

35. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. B*, 1996, Vol. 77, Iss. 18, p. 3865. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865

36. van de Walle A., Asta M., and Ceder G. The Alloy-Theoretic Automated Toolkit: A User Guide. *Brown University, Providence, RI, Tech. Rep.* 2019. <https://www.brown.edu/Departments/Engineering/Labs/avdw/atat/manual.pdf>

37. Jain A., Ong S.P., Hautier G., Chen W., Richards W.D., Dacek S., Cholia S., Gunter D., Skinner D., Ceder G., and Persson K.A. Commentary: The Materials Project: A Materials Genome Approach to Accelerating Materials Innovation. *APL Mater.* 2013. Vol. 1, Iss. 1. p. 011002. DOI: 10.1063/1.4812323

Received April 26, 2021

Information about the authors

Erager Kseniya Romanovna is Post-graduate Student, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: eragerk@rambler.ru

Baygutlin Danil Rasulovich is Post-graduate Student, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

Sokolovskiy Vladimir Vladimirovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: vsokolovsky84@mail.ru

Buchelnikov Vasiliy Dmitrievich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: buche@csu.ru

МАГНИТОДИНАМИКА РАЗБАВЛЕННОГО ФЕРРОКОЛЛОИДА В СДВИГОВОМ ПОТОКЕ

А.А. Кузнецов

Венский университет, г. Вена, Австрия

E-mail: andrey.kuznetsov@univie.ac.at

Аннотация. Работа посвящена теоретическому исследованию разбавленной суспензии магнитных наночастиц при совместном действии на неё простого сдвигового течения и постоянного магнитного поля. Основное внимание уделено динамике вектора намагниченности системы. В первую очередь рассмотрен предельный случай, при котором влиянием вращательной броуновской диффузии на поведение частиц можно пренебречь. Показано, что в зависимости от соотношения гидродинамического и магнитного вращательных моментов атермальная магнитодинамика наночастиц может иметь периодический либо аperiodический характер. Дополнительный учёт влияния тепловых флуктуаций произведен в рамках теории эффективного поля Марцениюка–Райхера–Шлиомиса. Показано, что при любой ненулевой температуре намагниченность ферроколлоида за конечное время принимает некоторую стационарную ориентацию. Направление намагниченности в общем случае не совпадает с направлением поля. Равновесная (параллельная внешнему магнитному полю) и неравновесная (перпендикулярная внешнему полю) компоненты намагниченности рассчитаны как функции двух безразмерных параметров – числа Мейсона (т. е. отношения гидродинамического вращательного момента к магнитному) и числа Пекле (т. е. отношения гидродинамического момента к тепловому). Продемонстрировано, что неравновесная компонента всегда является немонотонной функцией числа Мейсона, но при этом всегда увеличивается с ростом числом Пекле.

Ключевые слова: магнитные наночастицы; ферроколлоид; сдвиговое течение; неравновесная магнитодинамика.

Введение

Ферроколлоиды, или магнитные жидкости, – это коллоидные растворы однодоменных наночастиц в немагнитной жидкости-носителе [1]. Сочетание высокой магнитной восприимчивости со способностью сохранять текучесть в широком диапазоне внешних воздействий обуславливают активное применение этой искусственно синтезируемой субстанции в различных отраслях промышленности и медицине. Примеры применения включают адаптивные демпферы и уплотнители [2], системы магнитожидкостного охлаждения [3], магнитные смазки [4], системы адресной доставки лекарств [5], магнитную гипертермию опухолевых заболеваний [6] и magnetic particle imaging [7].

Известно, что теоретическое понимание магнитных, транспортных и реологических свойств реальных ферроколлоидов требует корректного учёта многих факторов, включая межчастичные взаимодействия, полидисперсность и броуновское движение [8]. Особую сложность для исследователей представляет поведение магнитных наноансамблей в неравновесных условиях, примером которых может являться сильное сдвиговое течение. До сих пор теоретический анализ ферроколлоидов в потоке ограничивался лишь изменением *реологических* свойств системы во внешнем поле [9, 10]. В этой работе мы попытаемся детально изучить, как комбинация течения и внешнего поля влияют на *магнитные* свойства суспензии, а именно на динамику её намагниченности.

Постановка задачи и метод решения

Рассмотрим суспензию идентичных сферических частиц диаметром d . Каждая частица обладает постоянным по величине магнитным моментом μ . Частицы погружены в ньютоновскую жидкость с динамической вязкостью η . В системе создано простое сдвиговое течение со скоростью сдвига $\dot{\gamma}$. На систему дополнительно действует однородное магнитное поле \mathbf{H} . Вектор поля лежит в плоскости сдвига и перпендикулярен вектору скорости потока. Система термостатирована

на и поддерживается при постоянной температуре T . Выберем лабораторную систему координат так, чтобы поле было направлено вдоль оси Z , т. е. $\mathbf{H} = \{0, 0, H\}$, а скорость потока – вдоль оси X , $\mathbf{U} = \{\dot{\gamma}z, 0, 0\}$.

Целью работы является анализ поведения вектора намагниченности системы \mathbf{M} при совместном воздействии магнитного поля и сдвигового течения. Задача будет рассматриваться в следующих предположениях:

- система сильно разбавлена, и взаимодействием между частицами можно пренебречь;
- внутренняя магнитная анизотропия частиц достаточно велика, чтобы магнитные моменты были «вморожены» в частицы (т. е. ориентация магнитных моментов может меняться только вследствие механического вращения частиц);
- взаимодействие частиц с потоком можно рассматривать в рамках приближения Стокса (т. е. в приближении малых чисел Рейнольдса).

Уравнение вращательного движения для одиночной частицы в вязкой жидкости можно записать следующим образом [11]:

$$J \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = \mu_0 [\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{H}] + \Gamma (\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\omega}), \quad (1)$$

где J – момент инерции частицы, $\boldsymbol{\omega}$ – её угловая скорость. Поскольку магнитный момент «вморожен» в частицу, справедливо соотношение

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = [\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\mu}]. \quad (2)$$

Первое слагаемое в правой части уравнения (1) представляет магнитный вращательный момент, создаваемый полем. Второе слагаемое – гидродинамический вращательный момент, $\boldsymbol{\Omega} = (1/2)[\nabla \times \mathbf{U}] = \{0, \dot{\gamma}/2, 0\}$ – завихренность потока, $\Gamma = \eta\pi d^3$ – коэффициент трения. Инерционным слагаемым в левой части уравнения (1) традиционно можно пренебречь благодаря допущению о малых числах Рейнольдса [12].

Введем безразмерный вектор намагниченности $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M_s$, M_s – намагниченность насыщения. Будем рассматривать динамику вектора \mathbf{m} в плоскости сдвига, т. е. будем искать решение в форме $\mathbf{m} = \{m_x, 0, m_z\}$. В отсутствие тепловых флуктуаций уравнения для вектора намагниченности будут идентичны уравнениям (1)–(2), запишем их в форме

$$\frac{dm_x}{d\tau} = m_z - \frac{m_z m_x}{Ma}, \quad (3)$$

$$\frac{dm_z}{d\tau} = -m_x + \frac{m_x^2}{Ma}, \quad (4)$$

где $\tau = \Omega t$ – безразмерное время, $Ma = \Gamma\Omega/\mu_0\mu H$ – вращательное число Мейсона, отношение гидродинамического вращающего момента к магнитному [13].

Влияние броуновского движения на динамику намагниченности учтем в рамках теории эффективного поля Марценюка–Райхера–Шлиомиса [14–15]. В общем виде уравнение для намагниченности разбавленного ферроколлоида в рамках этой теории можно записать в форме

$$\frac{d\mathbf{m}}{d\tau} = [\mathbf{o} \times \mathbf{m}] - \frac{1}{Ma} \frac{\zeta - m}{\zeta m^2} [\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{h}]] - \frac{1}{Pe} \frac{\zeta^2 - \xi \cdot \zeta}{\zeta^2} \mathbf{m}, \quad (5)$$

где $\mathbf{o} = \boldsymbol{\Omega}/\Omega$, $\mathbf{h} = \mathbf{H}/H$, $Pe = \Gamma\Omega/2k_B T$ – вращательное число Пекле, k_B – постоянная Больцмана, $\xi = \mu_0\mu\mathbf{H}/k_B T$ – т. н. параметр Ланжевена. В термодинамическом равновесии (при $\Omega = 0$) намагниченность зависит от параметра Ланжевена как $\mathbf{m} = L(\xi)\mathbf{h}$, $L(\xi) = \coth \xi - 1/\xi$ – функция Ланжевена. ζ – эффективное поле, основной параметр описываемой теории. В произвольном неравновесном состоянии этот параметр связан с мгновенным значением намагниченности $\zeta = L^{-1}(m)\mathbf{m}/m$. В термодинамическом равновесии $\zeta = \xi$. В нашей предыдущей работе [16] уравнение (5) было детально протестировано на примере задачи о динамике намагниченности ферроколлоида в переменном поле произвольной амплитуды и частоты. Прямое сравнение с ре-

результатами численного моделирования методом Ланжевеновской динамики показало высокую точность уравнения (5) вдали от термодинамического равновесия. Получим из (5) уравнения для компонент намагниченности по аналогии с (3)–(4):

$$\frac{dm_x}{d\tau} = m_z - \frac{m_z m_x}{Ma} \frac{\zeta - 3m}{\zeta m^2} - \frac{m_x}{Pe}, \quad (6)$$

$$\frac{dm_z}{d\tau} = -m_x + \frac{m_x^2}{Ma} \frac{\zeta - 3m}{\zeta m^2} + \frac{2}{Ma} \frac{m}{\zeta} - \frac{m_z}{Pe}. \quad (7)$$

Уравнения (3)–(4) и (6)–(7) в этой работе решались численно с помощью функции `odeint` библиотеки `scipy` [17].

Результаты

В первую очередь рассмотрим частный случай атермальной динамики, описываемый уравнениями (3) и (4). Формально этот случай соответствует пределу $Pe \rightarrow \infty$. Для определенности предположим, что в начальный момент суспензия находилась в состоянии насыщения, т. е. $\mathbf{m}(\tau=0) = \{0, 0, 1\}$. Расчётные зависимости компонент намагниченности от времени при различных числах Мейсона показаны на рис. 1. Можно видеть, что при $Ma \gg 1$ влияние внешнего поля слабо и вектор намагниченности равномерно вращается, увлекаемый вихрем скорости потока. Угловая скорость вращения близка к Ω . По мере уменьшения числа Мейсона скорость вращения замедляется, а само вращение становится нелинейным – временные зависимости m_x и m_z пере-

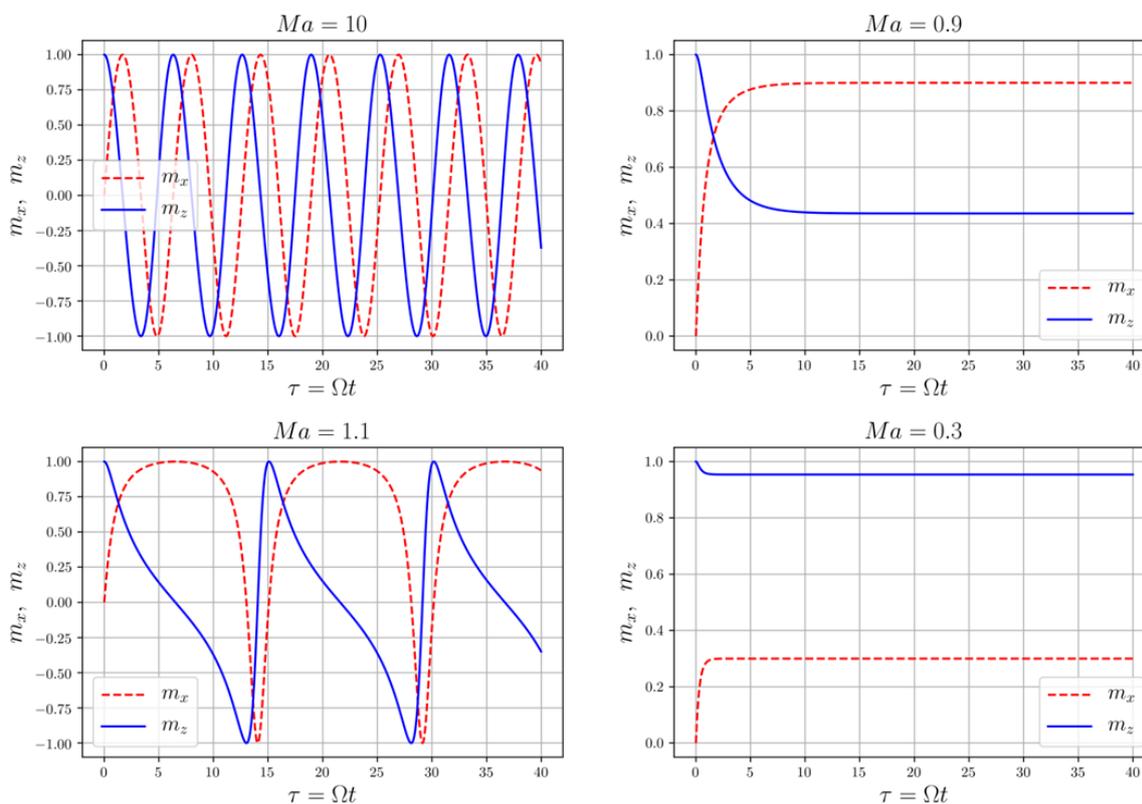


Рис. 1. Динамика компонент намагниченности в атермальном приближении.

Численное решение уравнений (3) и (4). Разные панели отвечают разным значениям числа Мейсона

стают следовать гармоническому закону. Наконец, когда число Мейсона становится меньше критического значения $Ma = 1$ (т. е. когда воздействия магнитного поля на частицу становится сильнее влияния сдвигового течения), картина качественно меняется. Динамика намагниченности становится аперриодической – со временем она принимает некоторую постоянную ориентацию по отношению к вектору поля. Чем ниже число Мейсона, тем ближе система к состоянию насыщения.

Рис. 2 показывает, как меняется динамика намагниченности под влиянием тепловых флуктуаций. Ключевой результат в том, что теперь вектор намагниченности всегда принимает неко-

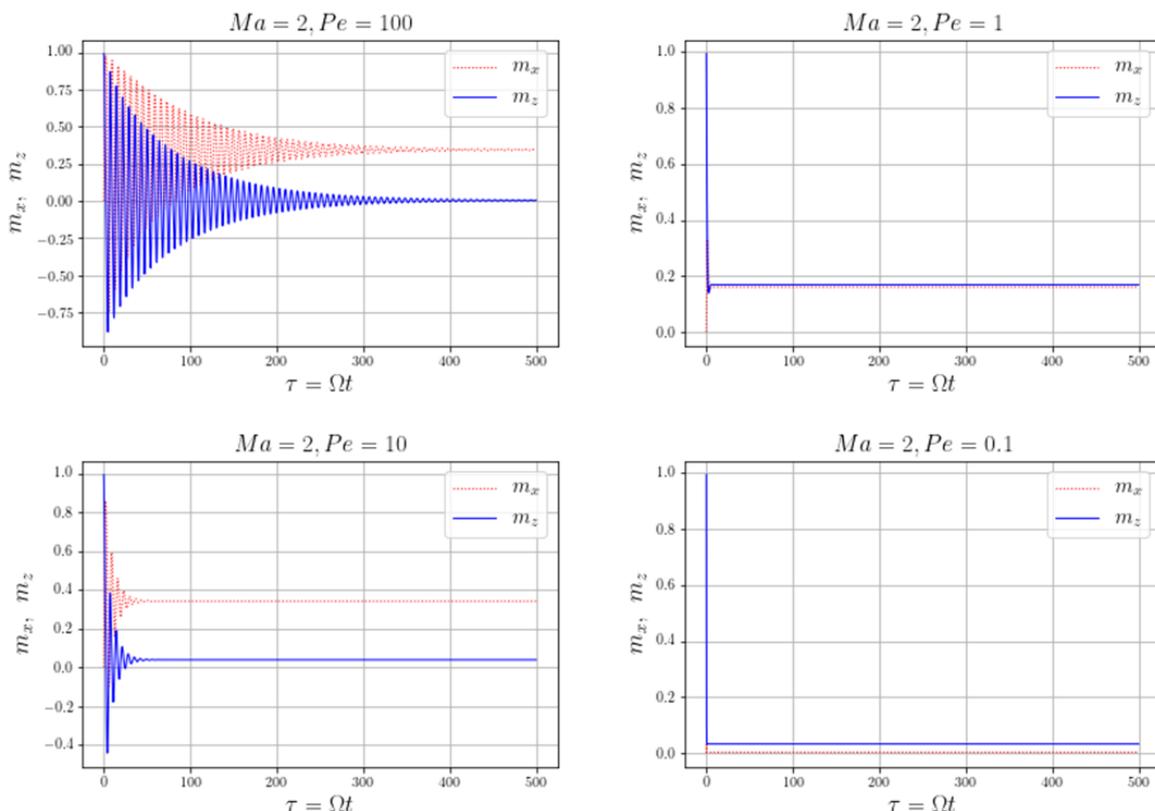


Рис. 2. Динамика компонент намагниченности с учетом тепловых флуктуаций. Численное решение уравнений (6) и (7). Разные панели отвечают разным значениям числа Пекле (число Мейсона всюду $Ma = 2$)

торую стационарную ориентацию, независимо от значения числа Мейсона. Теперь при $Ma > 1$ колебания намагниченности носят затухающий характер. Амплитуда колебаний экспоненциально падает со временем. Чем ниже число Пекле, тем быстрее происходит затухание. Ещё одна особенность – уравнения (6)–(7) не сохраняют длину вектора (в отличие от (3)–(4)). Чем ниже Pe , тем меньше m – присутствие тепловых флуктуаций разупорядочивает магнитные моменты частиц и ведет к ослаблению полного магнитного отклика.

Рис. 3 показывает, как зависит величина и ориентация намагниченности в стационарном состоянии от двух управляющих параметров, Pe и Ma . Видно, что компонента m_x (т. е. компонента намагниченности, перпендикулярная к полю, её можно назвать «неравновесной») всегда немонотонно зависит от числа Мейсона. В пределе $Ma = 0$ система стремится к магнитному насыщению, т. е. $\mathbf{m} = \{0, 0, 1\}$. В противоположном случае, при $Ma \gg 1$, влияние течения столь велико, что усредненный по всем частицам суспензии полный магнитный момент стремится к нулю. С уменьшением числа Пекле компонента m_x монотонно падает при любом Ma . «Равновесная» компонента намагниченности m_z всегда монотонно уменьшается с числом Мейсона. Зависимость m_z от числа Пекле имеет различный характер в областях $Ma < 1$ и $Ma > 1$. В первом случае имеет место монотонный рост m_z с Pe . Предельное стационарное решение для $Pe \gg 1$ можно найти из (3)–(4), потребовав равенства нулю производных по времени: $m_z(Ma < 1, Pe \gg 1) = \sqrt{1 - Ma^2}$, $m_x(Ma < 1, Pe \gg 1) = Ma$. В области $Ma > 1$ зависимость равновесной компоненты намагниченности от числа Пекле носит немонотонный характер, максимальное значение m_z здесь достигается при $Pe \sim 1$.

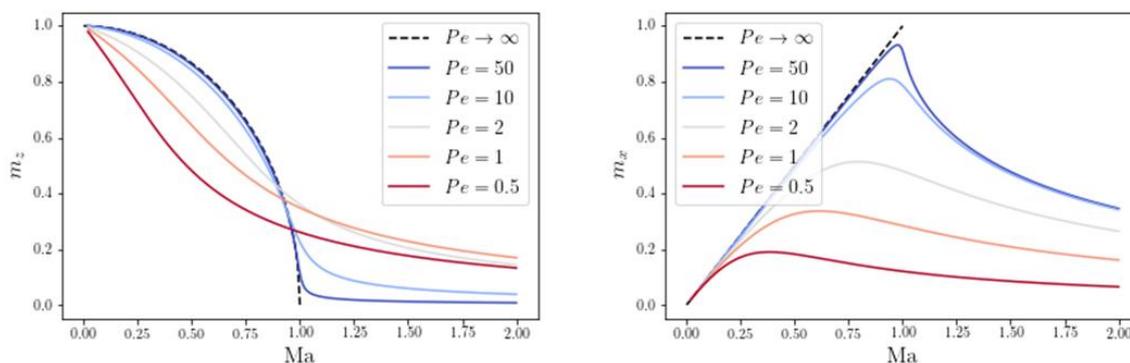


Рис. 3. Стационарные значения «равновесной» (m_z) и «неравновесной» (m_x) компонент намагниченности в зависимости от числа Мейсона Ma при различных значениях числа Пекле Pe

Заключение

В работе теоретически исследована динамика намагниченности разбавленного монодисперсного ферроколлоида при одновременном действии на него простого сдвигового течения и однородного стационарного магнитного поля. Основным инструментом исследования являлась теория эффективного поля Марценюка–Райхера–Шлиомиса [14]. Было обнаружено, что в зависимости от соотношения магнитного и гидродинамического вращающих моментов, действующих на частицы, атермальная динамика намагниченности может иметь периодический либо аперриодический характер. Это, однако, не справедливо при дополнительном учёте тепловых флуктуаций вращения частиц. При любой ненулевой температуре (иными словами, при любом конечном вращательном числе Пекле) вектор намагниченности системы принимает некоторую фиксированную ориентацию. В общем случае намагниченность направлена под углом к внешнему полю.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 19-31-60036).

Литература

1. Шлиомис М.И. Магнитные жидкости / М.И. Шлиомис // Успехи физических наук. – 1974. – Т. 112, № 3. – С. 427–458.
2. Novel Highly Elastic Magnetic Materials for Dampers and Seals: Part II. Material Behavior in a Magnetic Field / S. Abramchuk, E. Kramarenko, D. Grishin *et al.* // Polymers for Advanced Technologies. – 2007. – Vol. 18, no. 7. – P. 513–518.
3. Affecting Forced Convection Enhancement in Ferrofluid Cooling Systems / W. Cherief, Y. Avenas, S. Ferrouillat *et al.* // Applied Thermal Engineering. – 2017. – Vol. 123. – P. 156–166.
4. Study on the Ferrofluid Lubrication with an External Magnetic Field / W. Huang, C. Shen, S. Liao, X. Wang // Tribology Letters. – 2011. – Vol. 41, no. 1. – P. 145–151.
5. Efficient Drug-Delivery using Magnetic Nanoparticles–Biodistribution and Therapeutic Effects in Tumour Bearing Rabbits / R. Tietze, S. Lyer, S. Dürr *et al.* // Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine. – 2013. – Vol. 9, no. 7. – P. 961–971.
6. Fundamentals and Advances in Magnetic Hyperthermia / E.A. Périgo, G. Hemery, O. Sandre *et al.* // Applied Physics Reviews. – 2015. – Vol. 2, no 4. – P. 041302.
7. Magnetic Particle Imaging-Guided Heating in vivo Using Gradient Fields for Arbitrary Localization of Magnetic Hyperthermia Therapy / Z.W. Tay, P. Chandrasekharan, A. Chiu-Lam *et al.* // ACS nano. – 2018. – Vol. 12, no. 4. – P. 3699–3713.
8. Magnetic Properties of Polydisperse Ferrofluids: A Critical Comparison between Experiment, Theory, and Computer Simulation / Ivanov A.O., Kantorovich S.S., Reznikov E.N. *et al.* // Physical Review E. – 2007. – Vol. 75, Iss. 6. – P. 061405.
9. Soto-Aquino, D. Magnetoviscosity in dilute ferrofluids from rotational Brownian dynamics simulations / D. Soto-Aquino, C. Rinaldi // Physical Review E. – 2010. – Vol. 82, Iss. 4. – P. 046310.

10. Zubarev, A.Y. Rheological Properties of Dense Ferrofluids. Effect of Chain-Like Aggregates / A.Y. Zubarev, S. Odenbach, J. Fleischer // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2002. – Vol. 252. – P. 241–243.
11. Raikher, Y.L. The Effective Field Method in the Orientational Kinetics of Magnetic Fluids and Liquid Crystals / Y.L. Raikher, M.I. Shliomis // *Advances in Chemical Physics*. – 1994. – Vol. 87. – P. 595–752.
12. Brenner, H. Rheology of a Dilute Suspension of Dipolar Spherical Particles in an External Field / H. Brenner // *Journal of Colloid and Interface Science*. – 1970. – Vol. 32, Iss. 1. – P. 141–158.
13. Klingenberg, D.J. Mason Numbers for Magnetorheology / D.J. Klingenberg, J.C. Ulicny, M.A. Golden // *Journal of Rheology*. – 2007. – Vol. 51, no. 5. – P. 883–893.
14. Martsenyuk, M.A. On the Kinetics of Magnetization of Suspension of Ferromagnetic Particles / M.A. Martsenyuk, Y.L. Raikher, M.I. Shliomis // *Soviet Physics-JETP*. – 1974. – Vol. 38, no. 2. – P. 413–416.
15. Shliomis, M.I. Ferrohydrodynamics: Testing a Third Magnetization Equation / M.I. Shliomis // *Physical Review E*. – 2001. – Vol. 64, Iss. 6. – P. 060501.
16. Kuznetsov, A.A. Nonlinear response of a dilute ferrofluid to an alternating magnetic field / A.A. Kuznetsov, A.F. Pshenichnikov // *Journal of Molecular Liquids*. – 2022. – Vol. 346. – P. 117449.
17. <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.odeint.html>

Поступила в редакцию 1 декабря 2022 г.

Сведения об авторах

Кузнецов Андрей Аркадьевич – кандидат физико-математических наук, постдок, Венский университет, г. Вена, Австрия, e-mail: andrey.kuznetsov@univie.ac.at

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2023, vol. 15, no. 2, pp. 59–65*

DOI: 10.14529/mmph230208

MAGNETODYNAMICS OF A DILUTE FERROCOLLOID IN A SHEAR FLOW

A.A. Kuznetsov

*University of Vienna, Vienna, Austria
E-mail: andrey.kuznetsov@univie.ac.at*

Abstract. The work is devoted to a theoretical study of a dilute suspension of magnetic nanoparticles under the combined action of a simple shear flow and a constant magnetic field. The main attention is paid to the dynamics of the magnetization vector of the system. It is shown that at any nonzero temperature the magnetization takes a stationary orientation in a finite time. The direction of magnetization generally does not coincide with the direction of the field. Equilibrium and non-equilibrium magnetization components are calculated as functions of two dimensionless parameters – Mason number (i.e., ratio of hydrodynamic torque to magnetic) and Peclet number (i. e., ratio of hydrodynamic moment to thermal).

Keywords: magnetic nanoparticles; ferrocolloid; shear flow; nonequilibrium magnetodynamics.

References

1. Shliomis M.I. Magnetic fluids. *Physics–Uspekhi*, 1974, Vol. 17, Iss. 2, pp. 153–169. DOI: 10.1070/PU1974v017n02ABEH004332
2. Abramchuk S., Kramarenko E., Grishin D., Stepanov G., Nikitin L.V., Filipcsei G., Khokhlov A.R., Zrínyi M. Novel Highly Elastic Magnetic Materials for Dampers and Seals: Part II. Material Behavior in a Magnetic Field. *Polymers for Advanced Technologies*, 2007, Vol. 18, no. 7, pp. 513–518. DOI: 10.1002/pat.923

3. Cherief W., Avenas Y., Ferrouillat S., Kedous-Lebouc A., Jossic L., Petit M. Parameters Affecting Forced Convection Enhancement in Ferrofluid Cooling Systems. *Applied Thermal Engineering*, 2017, Vol. 123, pp. 156–166. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2017.05.057
4. Huang W., Shen C., Liao S., Wang X. Study on the Ferrofluid Lubrication with an External Magnetic Field. *Tribology Letters*, 2011, Vol. 41, no. 1, pp. 145–151. DOI: 10.1007/s11249-010-9693-2
5. Tietze R., Lyer S., Dürr S., Struffert T., Engelhorn T., Schwarz M., Eckert E., Göen T., Vasylyev S., Peukert W., Wiekhorst F., Trahms L., Dörfler A., Alexiou C. Efficient Drug-Delivery using Magnetic Nanoparticles—Biodistribution and Therapeutic Effects in Tumour Bearing Rabbits. *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine*, 2013, Vol. 9, no. 7, pp. 961–971. DOI: 10.1016/j.nano.2013.05.001
6. Périgo E.A., Hemery G., Sandre O., Ortega D., Garaio E., Plazaola F., Teran F.J. Fundamentals and Advances in Magnetic Hyperthermia. *Applied Physics Reviews*, 2015, Vol. 2, no. 4, pp. 041302. DOI: 10.1063/1.4935688
7. Tay Z.W., Chandrasekharan P., Chiu-Lam A., Hensley D.W., Dhavalikar R., Zhou X.Y., Yu E.Y., Goodwill P.W., Zheng B., Rinaldi C., Conolly S.M. Magnetic Particle Imaging-Guided Heating *in vivo* Using Gradient Fields for Arbitrary Localization of Magnetic Hyperthermia Therapy. *ACS nano*, 2018, Vol. 12, no. 4, pp. 3699–3713. DOI: 10.1021/acsnano.8b00893
8. Ivanov A.O., Kantorovich S.S., Reznikov E.N., Holm C., Pshenichnikov A.F., Lebedev A.V., Chremos A., Camp P.J. Magnetic Properties of Polydisperse Ferrofluids: A Critical Comparison between Experiment, Theory, and Computer Simulation. *Physical Review E*, 2007, Vol. 75, Iss. 6, p. 061405. DOI: 10.1103/PhysRevE.75.061405
9. Soto-Aquino D., Rinaldi C. Magnetoviscosity in Dilute Ferrofluids from Rotational Brownian Dynamics Simulations. *Physical Review E*, 2010, Vol. 82, no. 4, pp. 046310. DOI: 10.1103/PhysRevE.82.046310
10. Zubarev A.Y., Odenbach S., Fleischer J. Rheological Properties of Dense Ferrofluids. Effect of chain-like aggregates. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2002, Vol. 252, pp. 241–243. DOI: 10.1016/S0304-8853(02)00674-1
11. Raikher Y.L., Shliomis M.I. The Effective Field Method in the Orientational Kinetics of Magnetic Fluids and Liquid Crystals. *Advances in Chemical Physics*, 1994, Vol. 87, pp. 595–752. DOI: 10.1002/9780470141465.ch8
12. Brenner H. Rheology of a Dilute Suspension of Dipolar Spherical Particles in an External Field. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1970, Vol. 32, Iss. 1, pp. 141–158. DOI: 10.1016/0021-9797(70)90110-4
13. Klingenberg D.J., Ulicny J.C., Golden M.A. Mason Numbers for Magnetorheology. *Journal of Rheology*, 2007, Vol. 51, no. 5, pp. 883–893. DOI: 10.1122/1.2764089
14. Martsenyuk M.A., Raikher Y.L., Shliomis M.I. On the Kinetics of Magnetization of Suspension of Ferromagnetic Particles. *Soviet Physics-JETP*, 1974, Vol. 38, Iss. 2, pp. 413–416.
15. Shliomis M.I. Ferrohydrodynamics: Testing a Third Magnetization Equation. *Physical Review E*, 2001, Vol. 64, Iss. 6, p. 060501. DOI: 10.1103/PhysRevE.64.060501
16. Kuznetsov A.A., Pshenichnikov A.F. Nonlinear Response of a Dilute Ferrofluid to an Alternating Magnetic Field. *Journal of Molecular Liquids*, 2022, Vol. 346, p. 117449.
17. <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.odeint.html>

Received December 1, 2022

Information about the authors

Kuznetsov Andrey Arkadievich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), PhD, University of Vienna, Vienna, Austria, e-mail: andrey.kuznetsov@univie.ac.at

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ ОТРАЖЕНИИ СВЕТА ОТ ГРАНИЦЫ ОДНООСНОГО КРИСТАЛЛА

Ю.В. Мухин^{1,2}, Ю.Р. Гамауллина¹, Н.Д. Кундикова^{1,2}

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

²Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Российская Федерация

e-mail: mukhin@susu.ru

Аннотация. Получены и исследованы граничные условия для плоских электромагнитных волн на границе раздела изотропной среды с одноосным кристаллом. Получены элементы матрицы отражения, связывающей компоненты электрического поля в отраженной волне с компонентами электрического поля в падающей волне. Показана возможность сохранения поляризации при отражении от границы с анизотропной средой. Получены условия сохранения векторов Джонса при отражении от поверхности одноосного кристалла. Исследована возможность существования эффекта Брюстера на границе с такой анизотропной средой. Брюстеровские поляризации оказываются близкими к p -поляризациям с небольшой примесью s -поляризации.

Ключевые слова: граница раздела с анизотропной средой; вектор Джонса; угол Брюстера.

Введение

Отражение электромагнитных волн от границы с анизотропной средой рассматривалось неоднократно (см. например [1]). Тем не менее детальные исследования поляризационных эффектов при отражении света от таких границ не проводились. Данная работа восполняет частично этот пробел. При отражении от границы двух изотропных сред поляризация волны никогда не сохраняется (за исключением двух тривиальных случаев s - или p -поляризованной падающей волны). Плоскость поляризации после отражения всегда прижимается ближе к границе раздела сред [2]. В случае анизотропных сред в отраженной волне всегда присутствуют обе s - и p -поляризации, что допускает возможность сохранения векторов Джонса при отражении. Чтобы определить, при каких условиях это выполняется, были получены и исследованы граничные условия для плоских электромагнитных волн в случае одноосного кристалла с осью, параллельной границе раздела кристалла и изотропной среды.

Граничные условия

Пусть электромагнитная волна падает под углом падения θ на границу раздела изотропной среды и одноосного кристалла, как показано на рис. 1. На рис. 2 показаны направления волновых векторов в плоскости падения OXZ для волн в изотропной среде (обозначены как E) и для обыкновенной и необыкновенной волн в анизотропной среде (обозначены как D). Для волн, распространяющихся «сверху вниз», используется индекс «+», а для бегущих «снизу вверх» используется индекс «-».

Запишем проекции векторов напряженности электрического поля E и напряженности магнитного H на границу раздела в изотропной среде. Направления векторов для разных поляризаций выбираются так, как показано на рис. 3 и 4, таким образом, чтобы при нормальном падении направления напряженностей электрических полей в падающей и отраженной волнах совпадали.

Суммарные проекции полей записываются отдельно для каждой составляющей: для падающей p -поляризованной волны (см. рис. 3) и s -поляризованной волны (см. рис. 4).

$$\begin{array}{llll} E_{px} = \cos \theta (E_p^+ + E_p^-) & H_{px} = 0 & E_{sx} = 0 & H_{sx} = n \cos \theta (E_s^+ - E_s^-) \\ E_{py} = 0 & H_{py} = -n(E_p^+ - E_p^-) & E_{sy} = (E_s^+ - E_s^-) & H_{sy} = 0 \\ E_{pz} = \sin \theta (E_p^+ - E_p^-) & H_{pz} = 0 & E_{sz} = 0 & H_{sz} = n \sin \theta (E_s^+ + E_s^-) \end{array}$$

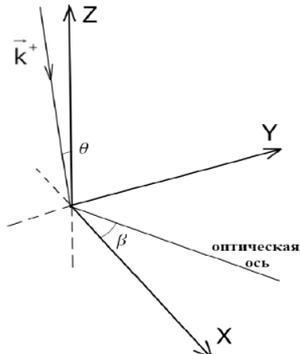


Рис. 1. Граница раздела OXY содержит оптическую ось кристалла, расположенную под углом β к оси OX

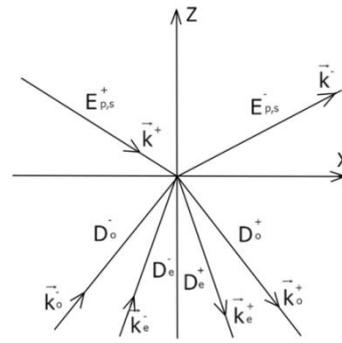


Рис. 2. Расположение направлений волновых векторов в плоскости падения OXZ

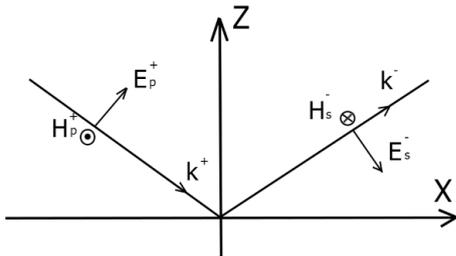


Рис. 3. Падающая р-поляризация

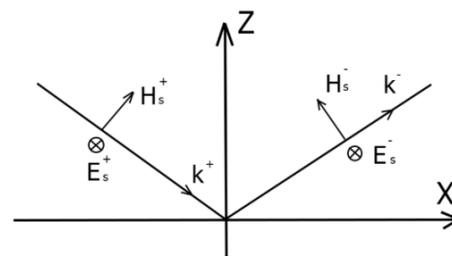


Рис. 4. Падающая s-поляризация

Для записи проекций полей в одноосном кристалле удобно пользоваться индукцией электрического поля вместо напряженности. Это обусловлено поперечностью поля D по отношению к волновому вектору. Введём также обозначения углов, связанных с ориентацией полей и волновых векторов, упрощающие вид формул:

$$\begin{aligned} \sin \theta_e &= n \sin \theta / n_e & \cos \gamma_e &= \cos \beta \sin \theta_e & \cos \alpha_e &= \sin \beta \sin \theta_e \\ \sin \theta_o &= n \sin \theta / \sqrt{\epsilon_{\perp}} & \cos \gamma_o &= \cos \beta \sin \theta_o & \cos \alpha_o &= \sin \beta \sin \theta_o \end{aligned}$$

Перпендикулярные и параллельные оптической оси составляющие электрического E и магнитного H полей необыкновенной и обыкновенной волн выражаются тогда через индукцию электрического поля D следующим образом.

Для необыкновенной волны:

$$\begin{aligned} E_{e\parallel} &= \frac{\sin \gamma_e}{\epsilon_{\parallel}} D_e^+ & E_{e\perp} &= \frac{\cos \gamma_e}{\epsilon_{\perp}} D_e^+ & E_{e\parallel} &= \frac{\sin \gamma_e}{\epsilon_{\parallel}} D_e^- & E_{e\perp} &= \frac{-\cos \gamma_e}{\epsilon_{\perp}} D_e^- \\ H_{e\parallel} &= 0 & H_{e\perp} &= -\frac{D_e^+}{n_e} & H_{e\parallel} &= 0 & H_{e\perp} &= \frac{D_e^-}{n_e} \end{aligned}$$

Для обыкновенной волны:

$$\begin{aligned} E_{o\parallel} &= 0 & E_{o\perp} &= \frac{D_o^+}{\epsilon_{\perp}} & E_{o\parallel} &= 0 & E_{o\perp} &= \frac{D_o^-}{\epsilon_{\perp}} \\ H_{o\parallel} &= \sin \gamma_o \frac{D_o^+}{\sqrt{\epsilon_{\perp}}} & H_{o\perp} &= \cos \gamma_o \frac{D_o^+}{\sqrt{\epsilon_{\perp}}} & H_{o\parallel} &= -\sin \gamma_o \frac{D_o^-}{\sqrt{\epsilon_{\perp}}} & H_{o\perp} &= \cos \gamma_o \frac{D_o^-}{\sqrt{\epsilon_{\perp}}} \end{aligned}$$

Индексы «e» и «o» обозначают компоненты необыкновенной и обыкновенной волн, которые

имеют показатели преломления $n_e = \sqrt{\epsilon_{\parallel} \left(1 - n^2 \left(\frac{\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}}{\epsilon_{\parallel} \epsilon_{\perp}} \right) \sin^2 \theta \cos^2 \beta \right)}$ и $n_o = \sqrt{\epsilon_{\perp}}$. Здесь n – показатель преломления изотропной среды.

Граничные условия заключаются в непрерывности тангенциальных составляющих электрического и магнитного полей на границе раздела. Остается только «сшить» все полученные выражения в четыре граничных условия:

Для электрического поля, параллельного оптической оси:

$$\cos \beta \cos \theta (E_p^+ + E_p^-) + \sin \beta (E_s^+ + E_s^-) = \frac{\sin \gamma_e}{\varepsilon_{\parallel}} (D_e^+ + D_e^-) \quad (1)$$

Для магнитного поля, параллельного оптической оси:

$$-n \sin \beta (E_p^+ - E_p^-) + n \cos \beta \cos \theta (E_s^+ - E_s^-) = \frac{\sin \gamma_o}{\sqrt{\varepsilon_{\perp}}} (D_o^+ + D_o^-) \quad (2)$$

Для электрического поля, перпендикулярного оптической оси:

$$-\sin \beta \cos \theta (E_p^+ + E_p^-) + \cos \beta (E_s^+ + E_s^-) = \frac{\cos \gamma_e \sin \alpha_e}{\varepsilon_{\perp}} (D_e^+ + D_e^-) + \frac{\cos \alpha_o}{\varepsilon_{\perp}} (D_o^+ + D_o^-) \quad (3)$$

Для магнитного поля, перпендикулярного оптической оси:

$$n \cos \beta (E_p^+ - E_p^-) + n \sin \beta \cos \theta (E_s^+ - E_s^-) = \frac{\cos \alpha_e}{n_e} (D_e^+ - D_e^-) - \frac{\cos \gamma_o \sin \alpha_o}{\sqrt{\varepsilon_{\perp}}} (D_o^+ - D_o^-) \quad (4)$$

Матрица отражения

Полученная выше алгебраическая система уравнений позволяет вычислить различные амплитудные коэффициенты отражения для разных поляризаций. В уравнениях (1)–(4) можно избавиться от компонент индукции электрического поля D и получить элементы матрицы отражения M , связывающей компоненты электрического поля в отраженной волне с компонентами электрического поля в падающей:

$$\begin{pmatrix} E_p^- \\ E_s^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{pp} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_p^+ \\ E_s^+ \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} E_p^+ \\ E_s^+ \end{pmatrix}.$$

Здесь элементы матрицы отражения M даются выражениями:

$$r_{pp} = \frac{E_p^-}{E_p^+} = \frac{A_{1p}C_2 - A_{2p}C_1}{B_{2p}C_1 - B_{1p}C_2}, \text{ при } E_s^+ = 0; \quad r_{sp} = \frac{E_p^-}{E_s^+} = \frac{B_{2s}C_1 - B_{1s}C_2}{A_{1s}C_2 - A_{2s}C_1}, \text{ при } E_p^+ = 0;$$

$$r_{ps} = \frac{E_s^-}{E_p^+} = \frac{A_{1p}B_{2p} - A_{2p}B_{1p}}{B_{1p}C_2 - B_{2p}C_1}, \text{ при } E_s^+ = 0; \quad r_{ss} = \frac{E_s^-}{E_s^+} = \frac{B_{1s}A_{2s} - B_{2s}A_{1s}}{A_{1s}C_2 - A_{2s}C_1}, \text{ при } E_p^+ = 0.$$

Где введены следующие обозначения:

$$A_{1p,s} = a_{3p,s}d_1e_2 - a_{1p,s}d_3e_2 - a_{2p,s}d_1e_3 \quad B_{1p,s} = b_{3p,s}d_1e_2 - b_{1p,s}d_3e_2 - b_{2p,s}d_1e_3$$

$$A_{2p,s} = a_{4p,s}d_1e_2 - a_{1p,s}d_4e_2 - a_{2p,s}d_1e_4 \quad B_{1p,s} = b_{3p,s}d_1e_2 - b_{1p,s}d_3e_2 - b_{2p,s}d_1e_3$$

$$C_1 = c_3d_1e_2 - c_1d_3e_2 - c_2d_1e_3 \quad C_2 = c_4d_1e_2 - c_1d_4e_2 - c_2d_1e_4$$

$$a_1 = \cos \theta \cos \beta; a_{2p} = -n \sin \beta; a_{2s} = n \sin \beta; a_3 = -a_1; a_{4p} = -n \cos \beta; a_{4s} = -a_{4p};$$

$$b_{1p} = a_1; b_{1s} = \frac{a_{2s}}{n}; b_{2p} = a_{2s}; b_{2s} = -na_1; b_{3p} = -a_1; b_{3s} = \frac{a_{4s}}{n}; b_{4p} = a_{4s};$$

$$b_{4s} = -na_1; c_1 = \sin \beta; c_2 = -na_1; c_3 = \cos \beta; c_4 = na_1; d_1 = \frac{\sin \gamma_e}{\varepsilon_{\parallel}}; e_2 = \frac{\sin \gamma_o}{\sqrt{\varepsilon_{\perp}}};$$

$$d_3 = \frac{\sin \alpha_e \cos \gamma_e}{\varepsilon_{\perp}}; e_3 = \frac{\cos \alpha_o}{\varepsilon_{\perp}}; d_4 = \frac{-\cos \alpha_e}{n_e}; e_4 = \frac{\sin \alpha_o \cos \gamma_o}{\sqrt{\varepsilon_{\perp}}}.$$

В отсутствие поглощения и полного внутреннего отражения матрица M должна обладать определёнными свойствами. Во-первых, она должна быть вещественной матрицей. Помимо этого, по аналогии с линейными эрмитовыми операторами квантовой механики, она обязана быть симметричной. Симметричность M подтверждалась прямыми выкладками и вычислениями.

Эффект сохранения поляризации

В изотропных средах поляризация света никогда не сохраняется при отражении от их границ раздела. На границе с анизотропной средой ситуация совсем иная. Представим отраженную в изотропной среде волну в виде

$$\begin{pmatrix} E_p^- \\ E_s^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{pp} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_p^+ \\ E_s^+ \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} E_p^+ \\ E_s^+ \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Алгебраическая система уравнений (5) может иметь нетривиальное решение только в случае равенства нулю детерминанта:

$$\det \begin{pmatrix} r_{pp} - r & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{ss} - r \end{pmatrix} = 0$$

Решение системы уравнений (5) и нахождение коэффициентов r аналогично решению задачи о расщеплении двукратно вырожденного уровня, разобранный в [3].

$$r_{1,2} = 0,5(r_{pp} + r_{ss} \pm w), \quad w = \sqrt{(r_{pp} - r_{ss})^2 + 4|r_{ps}|^2}$$

Выражения для векторов Джонса J падающей волны имеют при этом следующий вид:

$$J = \begin{pmatrix} E_p^+ \\ E_s^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{0,5 \left(1 \pm \frac{r_{pp} - r_{ss}}{w} \right)} \\ \pm \frac{r_{ps}}{|r_{sp}|} \sqrt{0,5 \left(1 \mp \frac{r_{pp} - r_{ss}}{w} \right)} \end{pmatrix}.$$

Наглядно представить поляризацию электрического поля удобно с помощью годографов нормированных векторов Джонса: точек или линий на поверхности сферы единичного радиуса в используемой системе координат. Волновые векторы при этом будут лежать в плоскости падения перпендикулярно векторам Джонса. В зависимости от угла падения θ годограф вектора Джонса для одной из поляризаций прочерчивает на поверхности сферы линию от экватора (нормальное падение) и до полюса, где угол падения света $\theta = 90^\circ$. Для различных положений оптической оси, разных углов β , получаются разные линии на сфере. На рис. 5 и 6 приведены годографы векторов Джонса J для сохраняющихся поляризаций: рис. 5 – для углов $\beta < 45^\circ$, рис. 6 – для углов $45^\circ < \beta < 90^\circ$.

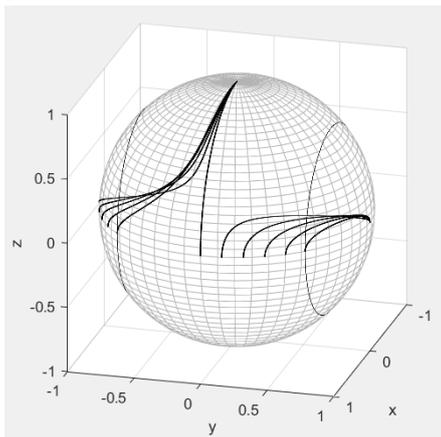


Рис. 5. Годографы вектора Джонса для углов β от 0° до 45° с шагом 9° . $\sqrt{\varepsilon_{\parallel}} = 1,7; \sqrt{\varepsilon_{\perp}} = 1,55$

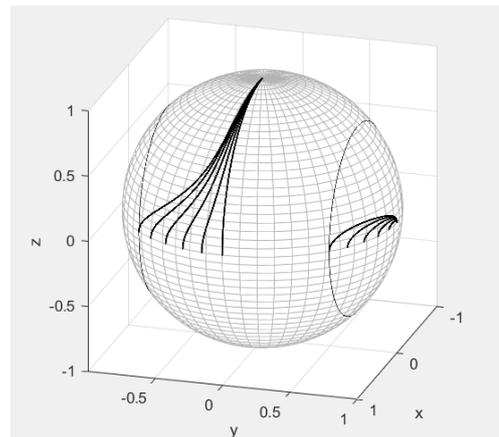


Рис. 6. Годографы вектора Джонса для углов β от 45° до 90° с шагом 9° . $\sqrt{\varepsilon_{\parallel}} = 1,7; \sqrt{\varepsilon_{\perp}} = 1,55$

На рис. 6 видно, что для $45^\circ < \beta < 90^\circ$ плоскости сохраняющихся поляризаций могут принимать лишь ограниченные положения: ни одна из линий годографов на рис. 6 не пересекает вертикальные окружности на сфере, параллельные плоскости падения, в то время как для углов $\beta < 45^\circ$ каждая из линий пересекает эти окружности. Вертикальные окружности на рис. 5 и 6 соответствуют плоскостям поляризаций, составляющим угол в 45° с плоскостью падения. Данное

свойство не зависит от оптических параметров кристалла, но может быть пояснено с помощью рис. 7, на котором показаны графики зависимости от угла падения θ двух коэффициентов матрицы отражения при $\beta = 10^\circ$.

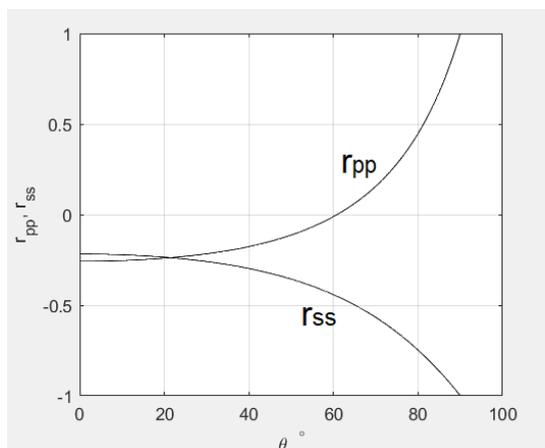


Рис. 7. Графики $r_{pp}(\theta)$ и $r_{ss}(\theta)$ при $\beta = 10^\circ$.

$$\sqrt{\varepsilon_{\parallel}} = 1,7, \sqrt{\varepsilon_{\perp}} = 1,55$$

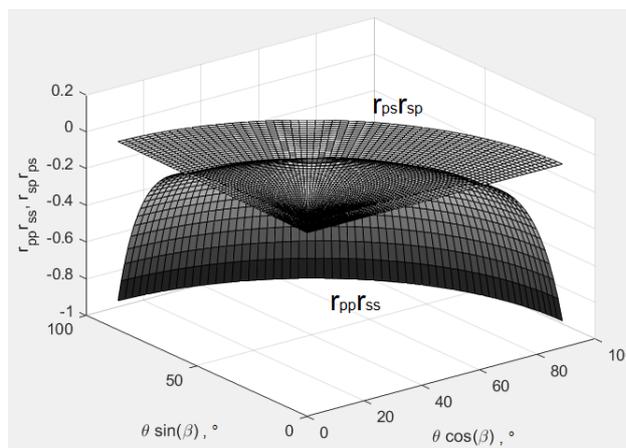


Рис. 8. График зависимости $r_{pp}r_{ss}$ и $r_{ps}r_{sp}$ в координа-

тах $\theta \sin \beta$ и $\theta \cos \beta$. $\sqrt{\varepsilon_{\parallel}} = 1,7, \sqrt{\varepsilon_{\perp}} = 1,55$

Кривые на графике имеют точку пересечения, которая присутствует для всех углов $\beta < 45^\circ$. Это пересечение соответствует равенству модулей компонент векторов Джонса для сохраняющихся поляризаций, и значит, расположению плоскости поляризации под углом 45° к плоскости падения. Для углов $45^\circ < \beta < 90^\circ$ такое пересечение кривых отсутствует, именно поэтому положение плоскостей сохраняющихся поляризаций в этом случае ограничено областями, показанными на рис. 6.

Угол Брюстера

Для границы двух изотропных сред угол Брюстера соответствует нулевому отражению р-поляризованного света. На границе с анизотропной средой р-поляризованный свет всегда будет давать s-поляризованную составляющую в отраженной волне. Поэтому сам термин и условия «Брюстера» следует относить здесь уже к другой поляризации, которая, очевидно, будет определяться углом β оптической оси к плоскости падения. Если условия Брюстера выполнены для одной поляризации, то ортогональная ей поляризация должна сохраняться.

Таким образом, условия Брюстера являются частным случаем сохраняющихся поляризаций с нулевым коэффициентом r в системе уравнений (5). Чтобы это было возможным, необходимо равенство нулю детерминанта матрицы отражения в (5): $r_{pp}r_{ss} - r_{ps}r_{sp} = 0$.

На рис. 8 показаны зависимости $r_{pp}r_{ss}$ и $r_{ps}r_{sp}$ от угла падения θ и угла β , взятых в полярных для этих переменных координатах: $\theta \sin \beta$ и $\theta \cos \beta$. Пересечение двух поверхностей как раз и соответствует выполнению условий Брюстера. При выполнении условия вектор Джонса падающей волны приобретает вид

$$J \sim \begin{pmatrix} 1 \\ -r_{ps}/r_{ss} \end{pmatrix}.$$

Условия Брюстера являются частным случаем сохранения поляризации при отражении. Другими словами, на линиях, изображенных на рис. 5 и 6, должны быть точки, соответствующие Брюстеровским поляризациям.

На рис. 9 показана макушка сферы единичного радиуса со следами годографов сохраняющихся векторов Джонса, на которых отмечены точки, соответствующие условиям Брюстера. Оказывается, что эти условия реализуются между углами Брюстера для

коэффициентов преломления $n_e(\beta=0) = \sqrt{\varepsilon_{\parallel} \left(1 - n^2 \left(\frac{\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\parallel} \varepsilon_{\perp}} \right) \sin^2 \theta \right)}$ и $n_o = \sqrt{\varepsilon_{\perp}}$. Брюстеровская

поляризация оказывается при этом близкой к p -поляризации с небольшой примесью s -поляризации на уровне нескольких процентов, но которая зависит уже от параметров кристалла.

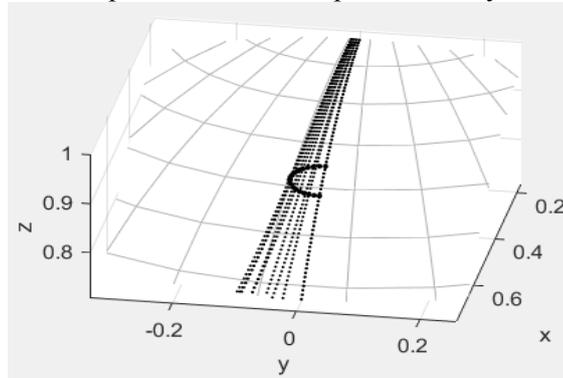


Рис. 9. Годограф векторов Джонса для углов Брюстера. $\sqrt{\varepsilon_{\parallel}} = 1,7, \sqrt{\varepsilon_{\perp}} = 1,55$

Заключение

В настоящей работе были получены и исследованы граничные условия для плоских электромагнитных волн на границе раздела изотропной среды с одноосным кристаллом. Получены элементы матрицы отражения связывающей компоненты электрического поля в отраженной волне с компонентами электрического поля в падающей волне. Показана возможность сохранения поляризации при отражении от границы с анизотропной средой и получены условия для реализации этого эффекта. Исследована возможность существования эффекта Брюстера на границе с такой анизотропной средой. Брюстеровские поляризации оказываются близкими к p -поляризациям с небольшой примесью s -поляризаций.

Литература

1. Игнатович, Ф.В. Оптика анизотропных сред / Ф.В. Игнатович, В.К. Игнатович // Успехи физических наук. – 2012. – Т. 182, № 7. – С. 759–771.
2. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика: учебное пособие для студентов физических специальностей университетов. В 10 т. Том VIII. Электродинамика сплошных сред / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – Москва: Физматлит: МАИК Наука, 2005. – 651 с.
3. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика: учебное пособие для студентов физических специальностей университетов. В 10 т. Том 3: Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – Москва: Физматлит: МАИК Наука, 2001. – 803 с.

Поступила в редакцию 25 апреля 2023 г.

Сведения об авторах

Мухин Юрий Викторович – кандидат физико-математических наук, Ph.D., доцент, кафедра оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация; Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: mukhinvy@susu.ru

Гатауллина Юлия Рауфовна – студент, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: gataullinaju@gmail.com

Кундикова Наталия Дмитриевна – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация; Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: kundikovand@susu.ru

THE POLARISATION EFFECTS OF LIGHT REFLECTION FROM THE INTERFACE WITH A UNIAXIAL CRYSTAL

Y.V. Mukhin^{1,2}, Y.R. Gataullina¹, N.D. Kundikova^{1,2}

¹ South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

² Institute of Electrophysics, Ural Division of the RAS, Ekaterinburg, Russian Federation
e-mail: mukhinyv@susu.ru

Abstract. In this paper, the boundary conditions for plane electromagnetic waves at the interface between an isotropic medium and a uniaxial crystal have been obtained and analyzed. Elements of the reflection matrix that relates components of the electric field of the reflected wave back to those of the incident electromagnetic wave have been determined. Using the elements of the reflection matrix, we show that the possibility exists for polarization of light to be preserved upon reflection at the interface with anisotropic media. The conditions for the Jones vectors conservation upon reflection from the surface of a uniaxial crystal are obtained. The existence of the Brewster effect at the interface with such an anisotropic medium has been studied and verified. The Brewster's polarizations have been shown to be almost p -polarizations with just little admixture of s -polarization.

Keywords: interface with anisotropic media, Jones vector, Brewster angle.

References

1. Ignatovich F.V, Ignatovich V.K. *Optics of anisotropic media*. Physics–Uspekhi, 2012, Vol. 55, Iss. 7, pp. 709–720. DOI: 10.3367/UFNe.0182.201207f.0759
2. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoreticheskaya fizika: uchebnoe posobie dlya studentov fizicheskikh spetsial'nostey universitetov. V 10 t. Tom VIII. Elektrodinamika sploshnykh sred* (Theoretical physics: a textbook for students of physical specialties of universities. In 10 vols. Vol. VIII. Electrodynamics of continuous media), 2005, Moscow, Fizmatlit Publ., MAIK Nauka Publ., 651 p. (in Russ.).
3. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoreticheskaya fizika: uchebnoe posobie dlya studentov fizicheskikh spetsial'nostey universitetov. V 10 t. Tom 3: Kvantovaya mekhanika. Nerelyativistskaya teoriya* (Theoretical physics: a textbook for students of physical specialties of universities. In 10 vols. Vol. III: Quantum Mechanics. Non-relativistic theory, 2001, Moscow, Fizmatlit Publ., MAIK Nauka Publ., 803 p. (in Russ.).

Received April 25, 2023

Information about the authors

Mukhin Yuriy Viktorovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Ph.D., Associate Professor, Optoinformatics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation; Institute of Electrophysics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation, e-mail: mukhinyv@susu.ru

Gataullina Julia Raufovna is student, Optoinformatics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: gataullinaju@gmail.com

Kundikova Nataliya Dmitrievna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Optoinformatics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation; Institute of Electrophysics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation, e-mail: kundikovand@susu.ru

Информация

При подготовке материалов к изданию в научном журнале «Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика», 2023, т.15, вып. 1 авторами была допущена неточность.

В статье Гуревич С.Ю., Голубев Е.В. «Замечание о вычислении скорости волны Рэлея и производной определителя Рэлея в упругих средах» (с. 69–75) на с. 70 следует читать:

Это выражение – известная формула П.Г. Малишевского (Malischewsky P.G. A note on Rayleigh-wave velocities as a function of the material parameters. Geofisica Internacional, 2004, Vol. 43, no. 3, pp. 507–509, см. (10) и (6)), которая позволяет решить поставленную задачу.

Авторы работы и редакционная коллегия журнала «Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика» приносят профессору П.Г. Малишевскому свои извинения за допущенную неточность.

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, Институт естественных и точных наук, 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 науки и высшего образования 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: 1.1.1. Вещественный, комплексный и функциональный анализ (физико-математические науки); 1.1.2. Дифференциальные уравнения и математическая физика (физико-математические науки); 1.1.6. Вычислительная математика (физико-математические науки); 1.1.7. Теоретическая механика, динамика машин (технические науки); 1.1.7. Теоретическая механика, динамика машин (физико-математические науки); 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы (физико-математические науки); 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (физико-математические науки); 1.3.6. Оптика (физико-математические науки); 1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки); 2.3.1. Системный анализ, управление и обработка информации, статистика (физико-математические науки).

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства науки и высшего образования 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 15, № 2
2023

16+

Редактор *С.И. Уварова*
Техн. редактор *А.В. Миних*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 29.04.2023. Дата выхода в свет 10.05.2023.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 8,83.

Тираж 500 экз. Заказ 101/189. Цена свободная.

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