

Основан в 1995 г.
Журнал входит
в Перечень ведущих рецензируемых
научных журналов и изданий, выпус-
каемых в Российской Федерации, в
которых рекомендуется публикация
основных результатов диссертаций на
соискание ученых степеней доктора и
кандидата наук

Учредитель:

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего
профессионального образования
«Белгородский государственный
национальный исследовательский университет»

Издатель:

НИУ «БелГУ»
Издательский дом «Белгород»
Адрес редакции, издателя, типографии:
308015 г. Белгород, ул. Победы, 85

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе
по надзору в сфере связи,
информационных технологий
и массовых коммуникаций (Роскомнадзор)

Свидетельство о регистрации средства
массовой информации ПИ № ФС 77-63055
от 10 сентября 2015 г.
Выходит 4 раза в год.

**РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ
ЖУРНАЛА**

Главный редактор

О.Н. Полухин,
ректор НИУ «БелГУ», доктор
политических наук, профессор

Зам. главного редактора

И.С. Константинов,
проректор по научной
и инновационной работе НИУ «БелГУ»,
доктор технических наук, профессор

Научный редактор

В.М. Москолкин,
профессор кафедры мировой экономики
НИУ «БелГУ», доктор географических наук

Ответственный секретарь:

О.В. Шевченко,
зам. начальника УНИИ НИУ «БелГУ»,
кандидат исторических наук

**РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ
СЕРИИ ЖУРНАЛА**

Главный редактор серии

А.В. Носков
(доктор физико-математических наук,
профессор НИУ «БелГУ»)

Заместитель главного редактора

Н.В. Малай
(доктор физико-математических наук,
профессор НИУ «БелГУ»)

Ответственный секретарь

Р.А. Загороднюк
(аспирант НИУ БелГУ)

НАУЧНЫЕ ВЕДОМОСТИ

Белгородского государственного университета

Математика. Физика

Belgorod State University Scientific Bulletin Mathematics & Physics

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

С.В. Марвин

Начально-краевая задача для системы уравнений
Максвелла в случае неограниченной немагнитной
проводящей среды под диэлектрическим слоем 5

В.С. Закарян, Р.В. Даллакян

О граничных значениях частного произведений
Джрбашяна и Бляшке 15

А.В. Глушак, Т.Г. Романченко

О разрешимости вырождающихся линейных
дифференциальных уравнений дробного порядка 24

Л.Н. Куртова, Н.Н. Мотькина

Исследование особого ряда в проблеме Клоостермана 28

С.М. Рацеев, О.И. Череватенко

Об оптимальных кодах аутентификации на основе
конечных полей 38

Н.Н. Рябцева, Е.В. Кормош

Об аналогах уравнения Эйлера и условия Лежандра
для одной вариационной задачи на графе 42

И.В. Рахмелевич

О псевдополиномиальных решениях двумерного
уравнения, содержащего произведение частных
производных 45

Т.Ю. Леонтьева

Об одном обобщении точных критериев существования
подвижных особых точек одного класса нелинейных
обыкновенных дифференциальных уравнений
в комплексной области 51

М.М. Бухурова

Задача синтеза терминальной сети на графе 58

ФИЗИКА

Ю.П. Вирченко, Л.П. Данилова

Разложение по длинному радиусу взаимодействия
в равновесной статистической механике одноатомных
газов 62

Члены редколлегии:

С.В. Блажевич

(доктор физико-математических наук,
профессор НИУ «БелГУ»)

А.Н. Беляков

(доктор физико-математических наук,
профессор НИУ «БелГУ»)

И.П. Борисовский

(кандидат физико-математических наук,
доцент НИУ «БелГУ»)

А.Г. Брусенцев

(доктор физико-математических наук,
профессор БГТУ им. В.Г. Шухова)

И.Е. Внук

(доктор физико-математических наук,
профессор НИУ «БелГУ»)

А.В. Глушаков

(доктор физико-математических наук,
профессор НИУ «БелГУ»)

Р. Кавалла

(профессор, Технический университет,
Фрайберг, Германия)

В.В. Красильников

(доктор физико-математических наук,
профессор НИУ «БелГУ»)

А.П. Солдатов

(доктор физико-математических наук,
профессор НИУ «БелГУ»)

В.В. Сыщенко

(доктор физико-математических наук,
профессор НИУ «БелГУ»)

**Г.В. Аверин, А.В. Звягинцева, М.В. Шевцова,
А.С. Хоруженко**

О краевых задачах описания опытных данных
в пространствах состояний сложных систем 72

**В.С. Захвалинский, Ле Тхай Шон,
Т.Б. Никуличева, Е.А. Пилюк**

Получение и исследование электропроводности
 $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ и свойств гетероструктуры на его основе 79

**С.И. Кучеев, Н.Н. Межаков, В.С. Захвалинский,
Е.А. Пилюк**

Обеднение кремния индуцированное пленками нитрида
кремния в структуре Si/Si₃N₄/Нематик/ITO 85

С.И. Кучеев, Е.И. Омельченко, В.В. Ченцова

Детектирование дефектов пленок SiO₂ холестерическими
жидкими кристаллами 92

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

О.А. Гальцева, О.В. Гальцев

Особенности решения математических моделей
взаимодействия жидкости и деформируемых твердых тел ... 99

Б.Ю. Кудрявцев

Флаттер пластины переменной толщины, составляющей
часть поверхности тонкого клина 112

**А.О. Боев, Д.А. Аксенов, В.Н. Максименко,
И.В. Неласов, А.И. Картамышев, А.Г. Липницкий**

Взаимодействие атомов титана и хрома с точечными
дефектами в ОЦК ванадии 116

Ю.П. Вирченко, А.В. Субботин

О матрицах, порождающих симплектические структуры 125

Сведения об авторах 128

Статьи представлены в авторской редакции

Выпускающий редактор *Л.П. Котенко*
Корректура, компьютерная
верстка *Ю.В. Иващенко*

Оригинал-макет *А.В. Носков*

Подписано в печать 29.06.2017

Формат 60×84/8

Гарнитура Georgia, Impact

Усл. п. л. 16,3

Заказ 149

Цена свободная

Тираж 1000 экз.

Дата выхода 30.06.2017

Подписной индекс в Объединённом каталоге
«Пресса России» – 81631

Оригинал-макет подготовлен и тиражирован
в Издательском доме «Белгород»
Адрес: 308015 г. Белгород, ул. Победы, 85

№ 13 (262), Issue 47
June 2017

SCIENTIFIC PEER-REVIEWED
JOURNAL

Founded in 1995

The Journal is included into the list of the leading peer-reviewed journals and publications coming out in the Russian Federation that are recommended for publishing key results of the theses for Doktor and Kandidat degree-seekers.

Founder:

Federal state autonomous educational establishment of higher professional education «Belgorod State National Research University»

Publisher:

Belgorod State National Research University
Belgorod Publishing House

Address of editorial office, publisher, letterpress plant: 85 Pobeda St., Belgorod, 308015, Russia

The journal has been registered at the Federal service for supervision of communications information technology and mass media (Roskomnadzor)

Mass media registration certificate
ПН № ФС 77-63055 September 10, 2015 r.

Publication frequency: 4 /year

EDITORIAL BOARD OF JOURNAL

Editor-in-chief

O.N. Poluchin,

Rector of Belgorod State National Research University, Doctor of political sciences, Professor

Deputy editor-in-chief

I.S. Konstantinov,

Vice-Rector on Scientific and Innovative Work of Belgorod State National Research University, Doctor of technical sciences, Professor

Scientific Editor

V.M. Moskovkin,

Professor of World Economy Department of Belgorod State National Research University, Doctor of Geographical Sciences

O.V. Shevchenko,

Deputy Head of Scientific and Innovative Activity Department of Belgorod State National Research University, Candidate of Historical Sciences

**EDITORIAL BOARD
OF JOURNAL SERIES**

Chief editor:

A. V. Noskov,

Professor (Belgorod State National Research University)

Deputies of chief editor:

N.V. Malay,

Professor (Belgorod State National Research University)

Editorial assistant:

R.A. Zagorodnyuk,

graduate student (Belgorod State National Research University)

**Belgorod State University
Scientific Bulletin
Mathematics & Physics**

**НАУЧНЫЕ ВЕДОМОСТИ
Белгородского
государственного университета
Математика. Физика**

CONTENTS

MATHEMATICS

S.V. Marvin

An initial –boundary value problem for the system of Maxwell's equations in the case of an unlimited nonmagnetic conductive medium under dielectric layer 5

V.S. Zakaryan, R.V. Dallakyan

On Boundary Properties of Partial Products of Djrbashyan and Blaschke 15

A.V. Glushak, T.G. Romanchenko

On the solvability of degenerate linear differential equations of fractional order 24

L.N. Kurtova, N.N. Mot'kina

Research of a special row in Kloosterman's problem 28

S.M. Ratseev, O.I. Cherevatenko

On authentication codes based on finite fields 38

N.N. Ryabtseva, E.V. Kormosh

On the analogs of Euler equation and Legendre conditions for one variational problem on a graph 42

I.V. Rakhmelevich

On the pseudo-polynomial solutions of two-dimensional equation containing the production of partial derivatives 45

T.Yu. Leont'eva

The exact criteria for the existence of movable singular points of solutions of a class of nonlinear ordinary differential equations of second order in the complex region 51

M.M. Bukhurova

Terminal network synthesis problem on a graph 58

PHYSICS

Yu.P. Virchenko, L.P. Danilova

Expansion on long radius of interaction in the equilibrium statistical mechanics of monatomic gases 62

Members of editorial board:

S.V. Blazhevich,

Professor (Belgorod State National Research University)

A.N. Belyakov,

Professor (Belgorod State National Research University)

I.P. Borisovsky,

Associated Professor (Belgorod State National Research University)

A.G. Brusentsev

Professor (Belgorod State Technological University named after V.G. Shukhov)

I.E. Vnukov,

Professor (Belgorod State National Research University)

A.V. Glushak,

Professor (Belgorod State National Research University)

R. Kawalla,

Professor of Technische Universität Bergakademie Freiberg

V.V. Krasilnikov,

Professor (Belgorod State National Research University)

A.P. Soldatov,

Professor (Belgorod State National Research University)

V.V. Syshchenko,

Professor (Belgorod State National Research University)

G.V. Averin, A.V. Zviagintseva, M.V. Shevtsova, A.S. Khoruzhenko

On boundary value problems of database description in spaces of difficult systems conditions 72

V.S. Zakhvalinskii, Le Thai Son, T.B. Nikulicheva, E.A. Piliuk

Obtaining and investigation of electroconductivity of $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ and properties of heterostructure on its basis 79

S.I. Kucheev, N.N. Mezhaev, V.S. Zakhvalinskii, E.A. Piliuk

Depletion of silicon induced by nano-dimensional films of silicon nitride in $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Nematic}/\text{ITO}$ structure 85

S.I. Kucheev, E.I. Omelchenko, V.V. Chenzova

Detection of defects of SiO_2 films by cholesteric liquid crystals 92

MATHEMATICAL PHYSICS. MATHEMATICAL MODELING

O.A. Galtseva, O.V. Galtsev

Features of the solution for fluid-structure interaction mathematical models 99

B.U. Kudryavtsev

Flutter of rectangular plate with variable thinness, as a part of thin wedge surface 112

A.O. Boev, D.A. Aksyonov, V.N. Maksimenko, I.V. Nelasov, A.I. Kartamyshev, A.G. Lipnitskii

Ti, Cr interaction with BCC vanadium point defects 116

Yu.P. Virchenko, A.V. Subbotin

About matrices connected with symplectic structures 125

Information about Authors 128

The articles are given in authors' editing

Commissioning Editor *L.P. Kotenko*

Proofreading, computer

imposition *Y.V. Ivakhnenko*

Dummy layout by *A.V. Noskov*

Passed for printing 29.06.2017

Format 60×84/8

Typeface Georgia, Impact

Printer's sheets 16,3

Order 149

Circulation 1000 copies

Date of publishing: 30.06.2017

Subscription reference in The Russian Press common catalogue – 81631

Dummy layout is replicated at Publishing House "Belgorod", Belgorod State National Research University

Address: 85 Pobeda St., Belgorod, 308015, Russia



МАТЕМАТИКА MATHEMATICS

УДК 620.192.45+517.955.4

НАЧАЛЬНО-КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА В СЛУЧАЕ НЕОГРАНИЧЕННОЙ НЕМАГНИТНОЙ ПРОВОДЯЩЕЙ СРЕДЫ ПОД ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ СЛОЕМ

AN INITIAL-BOUNDARY VALUE PROBLEM FOR THE SYSTEM OF MAXWELL'S EQUATIONS IN THE CASE OF AN UNLIMITED NONMAGNETIC CONDUCTIVE MEDIUM UNDER DIELECTRIC LAYER

С.В. Марвин
S.V. Marvin

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Россия, 620002,
Екатеринбург, ул. Мира, 19

Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, 19 Mira St,
Yekateriburg, 620002, Russia

E-mail: s.v.marvin@yandex.ru

Аннотация

Рассмотрена начально-краевая задача электродинамики для неограниченной немагнитной проводящей среды, находящейся под слоем диэлектрика. Предполагается, что у среды есть внутренний дефект (полость). В постановке задачи задействован класс векторных полей, квадратично суммируемых вместе со своими обобщенными роторами во всем трехмерном пространстве. Показано, что в выбранной постановке начально-краевая задача имеет единственное решение.

Abstract

An initial-boundary value problem of electrodynamics for an unlimited nonmagnetic conductive medium, located under a layer of dielectric, is considered. It is assumed, that the medium has an internal defect-cavity. In the formulation of the initial-boundary value problem involved a class of vector fields, square integrable together with their generalized rotors around all third-dimension space. It is shown, that in the selected formulation a solution of the considered initial-boundary value problem is exist and unique.

Ключевые слова: начально-краевая задача, уравнения Максвелла, теорема существования, замкнутый оператор, интегро-дифференциальные уравнения

Keywords: initial-boundary value problem, Maxwell's equations, existence theorem, closed operator, integro-differential equations

Введение

Начально-краевые задачи для системы уравнений Максвелла, не предполагающие сокращающуюся гармоническую зависимость электромагнитного поля от времени, необходимы для описания нестационарных волновых процессов электродинамики. С этим обстоятельством связан не только теоретический интерес, но и существенный прикладной смысл таких задач: например, в неразрушающем электромагнитном контроле металлических изделий нестационарные методы получили очень широкое распространение [1]. Поэтому актуально исследование начально-краевых задач электродинамики при различных постановках, соответствующих конкретным ситуациям неразрушающего контроля, причем немалую теоретическую и прикладную значимость имеет доказательство общих теорем для таких задач.

Ранее широко исследовались внутренние начально-краевые задачи для ограниченных областей; существенные результаты были получены для областей с границами класса $C^{(2)}$ [2, 3]. Однако для неразрушающего контроля наибольший интерес представляют не внутренние начально-краевые задачи, а задачи сопряжения, при постановке которых граничные условия связывают по-



ле внутри контролируемого объекта с внешним полем. Именно эта связь делает неразрушающий контроль возможным: так по внешнему полю можно судить о внутренней структуре контролируемого изделия.

Начально-краевые задачи с граничными условиями сопряжения исследовались, в частности, применительно к ограниченному немагнитному проводящему телу; предполагалось, что граница тела должна быть поверхностью Ляпунова, электропроводность тела должна быть бесконечно гладкой функцией пространственных координат, а сторонний ток должен включаться достаточно медленно [4, 5]. При таких предположениях были доказаны существование и единственность классического решения начально-краевой задачи электродинамики. Однако наиболее реалистичные модели дефектов предполагают разрывный характер зависимости электропроводности от пространственных координат, и, кроме того, всевозможные неровности и шероховатости границ проводящих тел невозможно описать только гладкими поверхностями.

Начально-краевые задачи для ограниченных неферромагнитных и ферромагнитных металлических тел с кусочно-гладкими границами и различными нарушениями внутренней структуры также были исследованы, но не в классической, а в некоторой обобщенной постановке; в качестве нестационарного поля рассматривалось затухающее поле мгновенно выключенного стороннего тока [6-8]. Был найден функциональный класс, в котором гарантировались существование и единственность решения этих начально-краевых задач. Однако полученные результаты имели то существенное ограничение, что в рассмотренных моделях проводники не находились под слоем диэлектрика и занимали ограниченные области пространства, в то время как в условиях неразрушающего контроля проверяемое металлическое изделие нередко оказывается покрыто защитным диэлектрическим слоем, причем в конкретных задачах дефектоскопии, структуроскопии и особенно толщинометрии широко используются модели неограниченных проводников. Поэтому актуально доказательство общей теоремы существования и единственности решения применительно к модели неограниченного дефектного проводника под слоем диэлектрика.

2. Постановка начально-краевой задачи

Начально-краевая задача будет поставлена для неограниченных областей, и необходимо определиться с требованиями, касающимися гладкости границ этих областей. Для ограниченных тел наиболее общее и естественное требование заключается в том, чтобы их граница была кусочно-гладкой. По определению, кусочно-гладкая поверхность состоит из конечного числа гладких поверхностей, края которых являются кривыми (то есть непрерывными образами некоторых отрезков), и гладкие части поверхности по своим краям «склеиваются» с «соседними» гладкими поверхностями с выполнением определенных требований [9]. Однако для неограниченной поверхности раздела сред требование, чтобы она состояла из конечного числа гладких частей, является чрезмерным (например, допустима модель шероховатой поверхности, шероховатость которой задается периодической функцией).

Множество вещественных чисел будем обозначать R ; соответственно, R^3 – трехмерное геометрическое пространство; $\mathbf{r} \in R^3$ – упорядоченный набор трех пространственных координат. Обозначим как O_R прямоугольную R -окрестность начала координат (то есть открытый куб с центром в начале координат и сторонами длиной $2R$, параллельными осям координат). Будем говорить, что последовательность кубов O_{R_n} монотонно исчерпывает R^3 , если величины R_n образуют неограниченно возрастающую последовательность.

Определение 1. Область $\Lambda \subseteq R^3$ будем называть допустимой, если существует такая последовательность кубов O_{R_n} , монотонно исчерпывающая R^3 , что пересечения $O_{R_n} \cap \Lambda$ являются областями с кусочно-гладкими границами.

Предположим, что проводящая среда с внутренним дефектом и внешним слоем диэлектрика занимает допустимую неограниченную объемно односвязную область Ω_{full} ; проводник без диэлектрического слоя занимает допустимую неограниченную объемно односвязную область Ω ; дефект типа полости занимает ограниченную объемно односвязную область Ω_c с кусочно-гладкой границей. Относительно взаимного расположения областей и их замыканий предполагается, что $\overline{\Omega}_c \subset \Omega$ и $\overline{\Omega} \subset \Omega_{\text{full}}$.

Электропроводность σ не зависит от времени, равна нулю в $R^3 \setminus \overline{\Omega}$ и в Ω_c . В области $\Omega \setminus \overline{\Omega}_c$ функция $\sigma(\mathbf{r})$ положительна, непрерывна, причем может быть непрерывным образом продолжена на границу Ω изнутри и на границу Ω_c снаружи. Кроме того, функция $\sigma(\mathbf{r})$ ограничена в $\Omega \setminus \overline{\Omega}_c$, и ее точная нижняя грань $\sigma_{\text{inf}} > 0$.



Диэлектрическая проницаемость ε не зависит от времени, равна 1 в $R^3 \setminus \overline{\Omega}_{\text{full}}$ и в области Ω . В $\Omega_{\text{full}} \setminus \overline{\Omega}$ функция $\varepsilon(\mathbf{r}) > 1$, непрерывна и может быть непрерывным образом продолжена на границу Ω_{full} изнутри и на границу Ω снаружи. Также предполагается, что функция $\varepsilon(\mathbf{r})$ ограничена в $\Omega_{\text{full}} \setminus \overline{\Omega}$ и ее точная нижняя грань $\varepsilon_{\text{inf}} > 1$. Магнитная проницаемость равна 1 во всем пространстве.

Ненулевой сторонний ток протекает в области T ; замыкания областей T и Ω_{full} не пересекаются: $\overline{T} \cap \overline{\Omega}_{\text{full}} = \emptyset$. Будем предполагать, что плотность стороннего тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ в начальный момент времени $t = 0$ равна нулевому вектору (то есть, сторонний ток в начальный момент времени выключен), и в любой момент времени $t > 0$ $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \in L_2(T)$ (символом L_2 обозначается пространство векторных полей, квадратично суммируемых на множестве, указанном в скобках после L_2). Чтобы изложить предположения, касающиеся зависимости $\mathbf{j}$ от t , необходимо воспользоваться определениями непрерывности и дифференцируемости функции со значениями в произвольном нормированном пространстве.

Определение 2. Функция $\mathbf{w}(t)$ со значениями в нормированном пространстве L называется непрерывной при $t = a$ в L или по норме L , если относительно нормы L $\lim_{t \rightarrow a} \|\mathbf{w}(t) - \mathbf{w}(a)\| = 0$.

Определение 3. Функция $\mathbf{w}(t)$ со значениями в нормированном пространстве L называется дифференцируемой при $t = a$ в L или по норме L , если существует такой элемент $\mathbf{w}'(a) \in L$, для которого относительно нормы L $\lim_{t \rightarrow a} \left\| \frac{\mathbf{w}(t) - \mathbf{w}(a)}{t - a} - \mathbf{w}'(a) \right\| = 0$; в этом случае $\mathbf{w}'(a)$ называется производной функции $\mathbf{w}(t)$ при $t = a$.

Через односторонние пределы в определениях 2 и 3 можно ввести понятие односторонней непрерывности, односторонней производной и, как следствие, определить непрерывность и дифференцируемость на полуинтервале и отрезке.

Будем предполагать, что плотность стороннего тока на полуинтервале $t \geq 0$ имеет вторую непрерывную производную по норме $L_2(R^3)$: $\|\mathbf{w}\|_2 = \sqrt{\int_{R^3} |\mathbf{w}(\mathbf{r})|^2 dV}$ (dV – элемент объема в тройном интеграле).

В каждой отдельной среде, то есть в Ω_c , $\Omega \setminus \overline{\Omega}_c$, $\Omega_{\text{full}} \setminus \overline{\Omega}$ и $R^3 \setminus \overline{\Omega}_{\text{full}}$ выполняются уравнения Максвелла:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r})} \text{rot} \mathbf{H} - \frac{\sigma(\mathbf{r})}{\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E} - \frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \\ \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \text{rot} \mathbf{E} \end{cases}, \quad (1)$$

где $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ – соответственно, напряженности электрического и магнитного поля; ε_0 и μ_0 – диэлектрическая и магнитная постоянные; в первом уравнении системы (1) учтено, что в токовой области T $\varepsilon(\mathbf{r}) \equiv 1$, а снаружи токовой области $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \equiv \mathbf{0}$ ($\mathbf{0}$ – нулевой вектор).

В точках гладкости границ Ω_c , Ω и Ω_{full} выполняются условия сопряжения:

$$\begin{cases} \mathbf{E}_{\tau, \text{int}} = \mathbf{E}_{\tau, \text{ext}} \\ \mathbf{H}_{\tau, \text{int}} = \mathbf{H}_{\tau, \text{ext}} \end{cases}, \quad (2)$$

где τ – обозначение касательной составляющей вектора на границе области, int – обозначение предела изнутри области, ext – обозначение предела снаружи области.

Начальное распределение электромагнитного поля в пространстве определяется начальными условиями:

$$\begin{cases} \mathbf{E}(\mathbf{r}, 0) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, 0) = \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) \end{cases}. \quad (3)$$

Введем следующие обозначения: $L_{\text{loc}}(R^3)$ – пространство векторных полей, локально суммируемых в R^3 ; D – пространство финитных бесконечно дифференцируемых векторных полей.

Определение 4. Поле $\mathbf{v} \in L_{\text{loc}}(R^3)$ называется обобщенным ротором поля $\mathbf{u} \in L_{\text{loc}}(R^3)$, если для любого поля $\mathbf{q} \in D$ выполняется равенство $\int_{R^3} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{q}(\mathbf{r}) dV = \int_{R^3} \mathbf{v}(\mathbf{r}) \mathbf{q}(\mathbf{r}) dV$.



Обозначается обобщенный ротор, как и обычный, символом rot . Обобщенный ротор определен однозначно с точностью до замены векторного поля на эквивалентное. Если у векторного поля есть обобщенные производные по Соболеву первого порядка, то обобщенный ротор можно найти по формуле для обычного ротора [3]. Однако это не является необходимым условием существования обобщенного ротора: например, если у локально суммируемой функции $\psi(\mathbf{r})$ есть обобщенные производные по Соболеву первого порядка, но нет обобщенных производных по Соболеву второго порядка, то обобщенный $\text{rotgrad} \psi(\mathbf{r})$ все равно определен, причем равен $\mathbf{0}$ [6,7].

Пространство квадратично суммируемых в $\mathbb{R}^3$ векторных полей, имеющих квадратично суммируемые в $\mathbb{R}^3$ обобщенные роторы, обозначается $\mathbf{H}(\text{rot}, \mathbb{R}^3)$. Будем предполагать, что в начальных условиях (3) $\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0 \in \mathbf{H}(\text{rot}, \mathbb{R}^3)$ и, кроме того, поле $\mathbf{H}_0$ удовлетворяет условию соленоидальности: $\text{div} \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) \equiv 0$ (в общем случае частные производные, фигурирующие в $\text{div} \mathbf{H}_0(\mathbf{r})$, следует понимать как производные в классе обобщенных функций-распределений). Из выполнения условия соленоидальности магнитного поля в начальный момент времени следует выполнение этого условия во все последующие моменты времени [7].

Теперь определим функциональный класс, в котором будет поставлена задача (1)-(3): напряженности $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ в любой момент времени $t > 0$ должны принадлежать пространству $\mathbf{H}(\text{rot}, \mathbb{R}^3)$; кроме того, на полуинтервале $t \geq 0$ напряженности $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ должны быть дифференцируемы по времени в $L_2(\mathbb{R}^3)$. Покажем, что такая постановка задачи должным образом учитывает граничные условия (2), и при такой постановке у задачи (1)-(3) существует единственное решение.

3. Исследование начально-краевой задачи

Обозначим как K класс векторных полей, обладающих следующими свойствами. Эти векторные поля непрерывно дифференцируемы в Ω_c , $\Omega \setminus \overline{\Omega}_c$, $\Omega_{\text{full}} \setminus \overline{\Omega}$ и $\mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}_{\text{full}}$, а также могут быть по непрерывности продолжены на границы Ω_c , Ω и Ω_{full} вместе со своими производными первого порядка как изнутри, так и снаружи данных областей; кроме того, на границах областей Ω_c , Ω и Ω_{full} эти поля удовлетворяют граничным условиям вида (2) и вместе со своими роторами принадлежат $L_2(\mathbb{R}^3)$.

Теорема 1. $K \subset \mathbf{H}(\text{rot}, \mathbb{R}^3)$, причем обобщенный ротор любого поля из K в Ω_c , $\Omega \setminus \overline{\Omega}_c$, $\Omega_{\text{full}} \setminus \overline{\Omega}$ и $\mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}_{\text{full}}$ совпадает с обычным ротором с точностью до переопределения на множестве нулевой меры.

Доказательство. Рассмотрим произвольное поле $\mathbf{q} \in D$. Выберем куб $O_{R'}$, образующий в пересечении с Ω область с кусочно-гладкой границей, причем величина R' должна быть достаточно большой, чтобы $\text{supp} \mathbf{q}$ (то есть, носитель поля $\mathbf{q}$) и $\overline{\Omega}_c$ включались в $O_{R'}$ (рис.). Заметим, что такой куб $O_{R'}$ существует вследствие того, что область Ω – допустимая. Так как граница куба $O_{R'}$ и $\text{supp} \mathbf{q}$ являются замкнутыми, ограниченными и непересекающимися множествами, то расстояние между ними (равное точной нижней грани расстояний между их точками) положительно [9]. Следовательно, можно утверждать, что $\mathbf{q} \equiv \mathbf{0}$ не только на границе куба $O_{R'}$ и за его пределами, но и в некотором «приграничном слое» внутри куба.

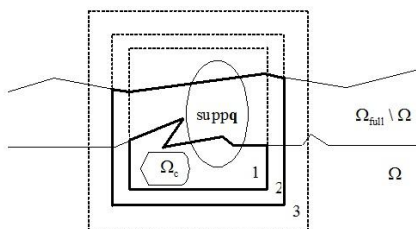


Рис. Пересечение кубов и областей
Fig. Intersection of cubes and domains

Рассмотрим произвольное поле $\mathbf{u} \in K$. Любая точка границы области $O_{R'} \cap \Omega$ является либо граничной для $O_{R'}$ и внутренней для Ω , либо граничной для Ω и внутренней для $O_{R'}$, либо гра-



нической для $O_{R'}$ и Ω одновременно. По определению пространства K , в точках гладкости границы Ω , внутренних для $O_{R'}$, поле $\mathbf{u}$ и его частные производные первого порядка допускают непрерывное продолжение изнутри и снаружи $O_{R'} \cap \Omega$; кроме того, $\mathbf{u}$ удовлетворяет граничным условиям вида (2). Следовательно, в таких точках векторное произведение $[\mathbf{u} \times \mathbf{q}]$ со своими частными производными допускает непрерывное продолжение изнутри и снаружи $O_{R'} \cap \Omega$, причем $[\mathbf{u}_\tau \times \mathbf{q}]$ меняется непрерывно при переходе через границу. Если же граничная точка $O_{R'} \cap \Omega$ является граничной для $O_{R'}$, то в некоторой малой ее окрестности векторное произведение $[\mathbf{u} \times \mathbf{q}] \equiv \mathbf{0}$, то есть бесконечное число раз непрерывно дифференцируемо. Следовательно, во всех точках гладкости границы $O_{R'} \cap \Omega$ $[\mathbf{u}_\tau \times \mathbf{q}]$ меняется непрерывно при переходе через границу. Заметим также, что граничные точки Ω , находящиеся за пределами замыкания $O_{R'} \cap \Omega$, не могут быть внутренними точками $O_{R'}$ и, следовательно, не участвуют в разрывах векторного произведения $[\mathbf{u} \times \mathbf{q}]$ и его частных производных.

Теперь выберем куб $O_{R''}$, $R'' > R'$, образующий в пересечении с Ω_{full} область с кусочно-гладкой границей (см. рис. 1). Аналогично приходим к выводу, что при переходе через границу $O_{R''} \cap \Omega_{\text{full}}$ в точках гладкости $[\mathbf{u}_\tau \times \mathbf{q}]$ меняется непрерывно, и граничные точки Ω_{full} , не принадлежащие замыканию $O_{R''} \cap \Omega_{\text{full}}$, не участвуют в разрывах векторного произведения $[\mathbf{u} \times \mathbf{q}]$ и его частных производных. Также выберем куб $O_{R''}$, $R'' > R'$ (см. рис. 1).

В точках гладкости поля $\mathbf{u}$ справедлива следующая формула векторного анализа:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{q}(\mathbf{r}) = \mathbf{q}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{u}(\mathbf{r}) - \text{div} [\mathbf{u}(\mathbf{r}) \times \mathbf{q}(\mathbf{r})].$$

Воспользуемся этой формулой, а также формулой Остроградского-Гаусса:

$$\begin{aligned} \int_{R^3} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{q}(\mathbf{r}) dV &= \int_{\Omega_3} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{q}(\mathbf{r}) dV = \\ &= \int_{\Omega_3 \setminus \Omega_2} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{q}(\mathbf{r}) dV + \int_{\Omega_2 \setminus \Omega_1} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{q}(\mathbf{r}) dV + \int_{\Omega_1 \setminus \Omega_c} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{q}(\mathbf{r}) dV + \int_{\Omega_c} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{q}(\mathbf{r}) dV = \\ &= \int_{\Omega_3 \setminus \Omega_2} \mathbf{q}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{u}(\mathbf{r}) dV + \int_{\Omega_2 \setminus \Omega_1} \mathbf{q}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{u}(\mathbf{r}) dV + \int_{\Omega_1 \setminus \Omega_c} \mathbf{q}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{u}(\mathbf{r}) dV + \int_{\Omega_c} \mathbf{q}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{u}(\mathbf{r}) dV - \\ &- \oint_{\text{Fr}(\Omega_2)} ([\mathbf{u}_{\text{int}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{q}(\mathbf{r})] - [\mathbf{u}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{q}(\mathbf{r})]) \mathbf{n}_2(\mathbf{r}) dS - \oint_{\text{Fr}(\Omega_1)} ([\mathbf{u}_{\text{int}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{q}(\mathbf{r})] - [\mathbf{u}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{q}(\mathbf{r})]) \mathbf{n}_1(\mathbf{r}) dS \\ &- \oint_{\text{Fr}(\Omega_c)} ([\mathbf{u}_{\text{int}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{q}(\mathbf{r})] - [\mathbf{u}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{q}(\mathbf{r})]) \mathbf{n}_c(\mathbf{r}) dS, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\Omega_3 = O_{R''}$, $\Omega_2 = O_{R'} \cap \Omega_{\text{full}}$, $\Omega_1 = O_{R'} \cap \Omega$ (на чертеже области Ω_i отмечены соответствующими номерами, причем границы Ω_1 и Ω_2 жирно выделены – см. рис. 1); Fr – обозначение границы; $\mathbf{n}_c$, $\mathbf{n}_1$ и $\mathbf{n}_2$ – векторы внешней единичной нормали, соответственно, к $\text{Fr}(\Omega_c)$, $\text{Fr}(\Omega_1)$ и $\text{Fr}(\Omega_2)$; dS – элемент поверхности в поверхностном интеграле. В (4) учтено, что $\mathbf{q} \equiv \mathbf{0}$ на границе куба $O_{R''}$.

На границах областей в смешанных произведениях $[\mathbf{u} \times \mathbf{q}] \mathbf{n}$ участвуют только касательные составляющие $\mathbf{u}_{\text{int}}$ и $\mathbf{u}_{\text{ext}}$. Выше было отмечено, что векторное $[\mathbf{u}_\tau \times \mathbf{q}]$ меняется непрерывно при переходе через границы Ω_c , Ω_1 и Ω_2 , то есть $[\mathbf{u}_{\tau, \text{int}} \times \mathbf{q}] = [\mathbf{u}_{\tau, \text{ext}} \times \mathbf{q}]$. Следовательно, все поверхностные интегралы в формуле (4) равны нулю, и

$$\int_{R^3} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{q}(\mathbf{r}) dV = \int_{\Omega_3} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{q}(\mathbf{r}) dV = \int_{\Omega_3} \mathbf{q}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{u}(\mathbf{r}) dV = \int_{R^3} \mathbf{q}(\mathbf{r}) \text{rot} \mathbf{u}(\mathbf{r}) dV.$$

То есть пространство K включается в $\mathbf{H}(\text{rot}, R^3)$, причем для любого поля $\mathbf{u} \in K$ обобщенный ротор совпадает с обычным в областях гладкости $\mathbf{u}$ (с точностью до замены компонент на эквивалентные функции). **Теорема доказана.**

Обозначим как $\mathbf{H}'$ пространство векторных полей, непрерывно дифференцируемых в R^3 и квадратично суммируемых в R^3 вместе со своими роторами. Очевидно, что $\mathbf{H}'$ является подпространством $\mathbf{H}(\text{rot}, R^3)$. Для $\mathbf{H}'$ и $\mathbf{H}(\text{rot}, R^3)$ справедливы следующие теоремы [6, 7].

Теорема 2. $\mathbf{H}'$ и $\mathbf{H}(\text{rot}, R^3)$ являются плотными подпространствами $L_2(R^3)$.



Теорема 3. Если последовательность $\mathbf{u}_n \in H(\text{rot}, R^3)$ сходится к $\mathbf{u} \in L_2(R^3)$ и при этом $\text{rot} \mathbf{u}_n$ сходится к $\mathbf{v} \in L_2(R^3)$, то $\mathbf{u} \in H(\text{rot}, R^3)$ и $\text{rot} \mathbf{u} = \mathbf{v}$.

Теорема 4. Для любого векторного поля $\mathbf{u} \in H(\text{rot}, R^3)$ существует такая последовательность $\mathbf{u}_n \in H'$, что $\mathbf{u}_n$ сходится к $\mathbf{u}$ и $\text{rot} \mathbf{u}_n$ сходится к $\text{rot} \mathbf{u}$ по норме $L_2(R^3)$.

Очевидно включение $H' \subset K$; по теореме 1, $K \subset H(\text{rot}, R^3)$. Следовательно, теорему (4) можно переформулировать, заменив H' на K . Следует заметить, что в отличие от определения H' , в определении K заложена информация о граничных условиях рассматриваемой начально-краевой задачи (в данном случае это граничные условия сопряжения для неограниченных областей с указанным при постановке задачи взаимным расположением).

Исследование начально-краевой задачи (1)-(3) сопряжено с исследованием свойств оператора $\hat{A}$, действующего на упорядоченные пары $(\mathbf{u}; \mathbf{v}) \in (H(\text{rot}, R^3))^2$ (второй степенью обозначен декартов квадрат) по следующей формуле:

$$\hat{A}(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = \left(\frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon} \text{rot} \mathbf{v} - \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \varepsilon} \mathbf{u}; -\frac{1}{\mu_0} \text{rot} \mathbf{u} \right). \quad (5)$$

В силу свойств кусочной непрерывности и ограниченности $\sigma(\mathbf{r})$ и $\varepsilon(\mathbf{r})$, а также положительности $\varepsilon_{\inf}$ (и, как следствие, ограниченности $1/\varepsilon$), можно утверждать, что оператор $\hat{A}$ отображает $(H(\text{rot}, R^3))^2$ в $(L_2(R^3))^2$. Обозначим как $\hat{A}'$ линейный оператор, действующий по той же формуле (5), но на пространстве K^2 .

Теорема 5. Линейный оператор $\hat{A}$ является минимальным замкнутым расширением оператора $\hat{A}'$ в пространстве $(L_2(R^3))^2$.

Доказательство. Предположим, что последовательность $(\mathbf{u}_n; \mathbf{v}_n) \in (H(\text{rot}, R^3))^2$ при $n \rightarrow +\infty$ сходится по среднеквадратичной норме к паре $(\mathbf{u}; \mathbf{v})$, и, при этом, $\hat{A}(\mathbf{u}_n; \mathbf{v}_n) = (\mathbf{f}_n; \mathbf{g}_n)$ сходится к некоторой паре $(\mathbf{f}; \mathbf{g})$. Тогда, в силу кусочной непрерывности и ограниченности $\sigma(\mathbf{r})$ и $\varepsilon(\mathbf{r})$, последовательность $(\text{rot} \mathbf{u}_n; \text{rot} \mathbf{v}_n) = (-\mu_0 \mathbf{g}_n; \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{f}_n + \sigma \mathbf{u}_n)$ сходится по среднеквадратичной норме к $(-\mu_0 \mathbf{g}; \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{f} + \sigma \mathbf{u})$. Следовательно, по теореме 3, $(\mathbf{u}; \mathbf{v}) \in (H(\text{rot}, R^3))^2$, то есть $(\mathbf{u}; \mathbf{v})$ входит в область определения $\hat{A}$, причем $\text{rot} \mathbf{u} = -\mu_0 \mathbf{g}$ и $\text{rot} \mathbf{v} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{f} + \sigma \mathbf{u}$. Кроме того,

$$\hat{A}(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = \left(\frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon} \text{rot} \mathbf{v} - \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \varepsilon} \mathbf{u}; -\frac{1}{\mu_0} \text{rot} \mathbf{u} \right) = \left(\frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon} (\varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{f} + \sigma \mathbf{u}) - \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \varepsilon} \mathbf{u}; -\frac{1}{\mu_0} (-\mu_0 \mathbf{g}) \right) = (\mathbf{f}; \mathbf{g}),$$

то есть $\hat{A}(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = (\mathbf{f}; \mathbf{g})$. Это означает замкнутость $\hat{A}$.

Если для пары $(\mathbf{u}; \mathbf{v}) \in (H(\text{rot}, R^3))^2$ взять сходящуюся к ней по среднеквадратичной норме последовательность $(\mathbf{u}_n; \mathbf{v}_n) \in K^2$ так, чтобы последовательность $(\text{rot} \mathbf{u}_n; \text{rot} \mathbf{v}_n)$ сходилась по среднеквадратичной норме к $(\text{rot} \mathbf{u}; \text{rot} \mathbf{v})$, то последовательность $\hat{A}'(\mathbf{u}_n; \mathbf{v}_n) = \left(\frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon} \text{rot} \mathbf{v}_n - \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \varepsilon} \mathbf{u}_n; -\frac{1}{\mu_0} \text{rot} \mathbf{u}_n \right)$, в силу кусочной непрерывности и ограниченности $\sigma(\mathbf{r})$ и $1/\varepsilon(\mathbf{r})$, будет сходиться к $\left(\frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon} \text{rot} \mathbf{v} - \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \varepsilon} \mathbf{u}; -\frac{1}{\mu_0} \text{rot} \mathbf{u} \right)$, то есть к $\hat{A}(\mathbf{u}; \mathbf{v})$. Следовательно, $\hat{A}'$ для замкнутости следует доопределить, как минимум, до оператора $\hat{A}$. **Теорема доказана.**

Теоремы 2 и 5 обосновывают выбор функционального пространства для задачи (1)-(3), показывают, что выбор области определения для $\hat{A}$ в полной мере учитывает граничные условия (2).

Теорема 6. Для любой упорядоченной пары $(\mathbf{f}; \mathbf{g}) \in (L_2(R^3))^2$ и для любого $p > 0$ уравнение $\hat{A}(\mathbf{u}; \mathbf{v}) - p(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = (\mathbf{f}; \mathbf{g})$ имеет в пространстве $(H(\text{rot}, R^3))^2$ единственное решение, причем это решение удовлетворяет неравенству

$$\sqrt{\varepsilon_0 \|\sqrt{\varepsilon} \mathbf{u}\|_2^2 + \mu_0 \|\mathbf{v}\|_2^2} \leq \frac{1}{p} \cdot \sqrt{\varepsilon_0 \|\sqrt{\varepsilon} \mathbf{f}\|_2^2 + \mu_0 \|\mathbf{g}\|_2^2}. \quad (6)$$



Доказательство. Рассматриваемое уравнение в подробной покомпонентной форме имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r})} \operatorname{rot} \mathbf{v} - \frac{\sigma(\mathbf{r})}{\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r})} \mathbf{u} - p \mathbf{u} = \mathbf{f}(\mathbf{r}) \\ -\frac{1}{\mu_0} \operatorname{rot} \mathbf{u} - p \mathbf{v} = \mathbf{g}(\mathbf{r}) \end{cases} \quad (7)$$

В предположении, что $(\mathbf{u}; \mathbf{v}) \in (H(\operatorname{rot}, R^3))^2$, доказательство неравенства (6) в рассматриваемом случае неограниченного проводника под слоем диэлектрика аналогично доказательству для ограниченных проводников [6, 7]. Первое уравнение системы (7) умножается на $\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{u}$, второе умножается на $\mu_0 \mathbf{v}$; затем уравнения складываются, их сумма интегрируется по R^3 , и используется следующее свойство векторных полей из $H(\operatorname{rot}, R^3)$ [6,7]: $\int_{R^3} (\mathbf{u}(\mathbf{r}) \operatorname{rot} \mathbf{v}(\mathbf{r}) - \mathbf{v}(\mathbf{r}) \operatorname{rot} \mathbf{u}(\mathbf{r})) dV = 0$. Затем применяется неравенство Коши-Буняковского для сумм и интегралов. Только следует понимать, что в рассматриваемом случае неограниченных областей для сходимости возникающих в доказательстве интегралов (в частности, для определенности $\|\sqrt{\varepsilon} \mathbf{u}\|_2$) важна не только кусочная непрерывность $\sigma(\mathbf{r})$ и $\varepsilon(\mathbf{r})$, но ограниченность этих функций, дополнительно предположенная при постановке задачи.

Единственность решения (7) непосредственно следует из неравенства (6): в случае однородной системы $\mathbf{f}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{0}$ и $\mathbf{g}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{0}$. Тогда, в силу неотрицательности каждого слагаемого подкоренного выражения в левой части (6), получаем, что $\mathbf{v}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{0}$ и $\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{0}$. Следовательно, в силу неравенства $\varepsilon_{\inf} > 1$, $\mathbf{u}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{0}$. То есть у соответствующей (7) однородной системы есть только нулевое решение, что означает единственность решения (7) для любой пары $(\mathbf{f}; \mathbf{g}) \in (L_2(R^3))^2$.

Для доказательства существования решения системы (7) в пространстве $(H(\operatorname{rot}, R^3))^2$ при $p > 0$ воспользуемся следующей системой интегро-дифференциальных уравнений [1]:

$$\begin{cases} \mathbf{u}(\mathbf{r}) = \frac{\operatorname{grad} \operatorname{div} - p^2 \varepsilon_0 \mu_0}{p} \int_{R^3} G(p, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{f}(\mathbf{r}') dV' - \mu_0 \operatorname{rot} \int_{R^3} G(p, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{g}(\mathbf{r}') dV' + \\ + \frac{\operatorname{grad} \operatorname{div} - p^2 \varepsilon_0 \mu_0}{p \varepsilon_0} \int_{\Omega'_{\text{полн}}} G(p, \mathbf{r}, \mathbf{r}') (\sigma(\mathbf{r}') + p \varepsilon_0 (\varepsilon(\mathbf{r}') - 1)) \mathbf{u}(\mathbf{r}') dV' \\ \mathbf{v}(\mathbf{r}) = \frac{\operatorname{grad} \operatorname{div} - p^2 \varepsilon_0 \mu_0}{p} \int_{R^3} G(p, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{g}(\mathbf{r}') dV' + \varepsilon_0 \operatorname{rot} \int_{R^3} G(p, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{f}(\mathbf{r}') dV' + \\ + \operatorname{rot} \int_{\Omega'_{\text{полн}}} G(p, \mathbf{r}, \mathbf{r}') (\sigma(\mathbf{r}') + p \varepsilon_0 (\varepsilon(\mathbf{r}') - 1)) \mathbf{u}(\mathbf{r}') dV' \end{cases} \quad (8)$$

где $G(p, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \exp(-p \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) / 4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$; $\Omega'_{\text{полн}}$ – область, получающаяся из $\Omega_{\text{полн}}$ удалением $\overline{\Omega}_c$. В системе уравнений (8) учтено, что в полости Ω_c $\sigma(\mathbf{r}) \equiv 0$, $\varepsilon(\mathbf{r}) \equiv 1$ и, следовательно, $\sigma(\mathbf{r}) + p \varepsilon_0 (\varepsilon(\mathbf{r}) - 1) \equiv 0$. То есть вследствие того, что дефект-полость по электромагнитным свойствам идентичен внешней среде, окружающей $\Omega_{\text{полн}}$, Ω_c формально можно исключить из $\Omega_{\text{полн}}$, присовокупив к внешней среде.

Для исследования системы (11) оказываются полезными свойства объемного потенциала $\hat{P}[\mathbf{w}](\mathbf{r}) = \int_{\Xi} G(p, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{w}(\mathbf{r}') dV'$, (Ξ – область, $\mathbf{w} \in L_2(\Xi)$), а также свойства оператора

$$\hat{B} = \frac{p^2 \varepsilon_0 \mu_0 - \operatorname{grad} \operatorname{div}}{p \varepsilon_0} \hat{P}.$$

Объемный потенциал $\hat{P}[\mathbf{w}](\mathbf{r})$ непрерывен во всех точках R^3 , имеет квадратично суммируемые в R^3 первые и вторые обобщенные производные по Соболеву, а также удовлетворяет неоднородному уравнению Гельмгольца [1]:

$$(\mu_0 \varepsilon_0 p^2 - \Delta) \hat{P}[\mathbf{w}] = \mathbf{w}(\mathbf{r}). \quad (9)$$



Оператор $\hat{B}$ при всех $p > 0$ диссипативен в пространстве $L_2(\Xi)$ [1]: $\int_{\Xi} \hat{B}[\mathbf{w}](\mathbf{r})\mathbf{w}(\mathbf{r})dV \geq 0$.

В доказательстве указанных свойств используется преобразование Фурье по пространственным координатам от векторного поля $\mathbf{w} \in L_2(\Xi)$, доопределенного нулевым вектором на все пространство R^3 [1]. Этот формальный прием в полной мере применим и в случае, когда область Ξ неограничена или объемно неоднородна, и приводит к тем же результатам. Следовательно, можно утверждать, что указанные свойства $\hat{P}$ и $\hat{B}$ имеют место и для $\Xi = R^3$, и для $\Xi = \Omega'_{\text{полн}}$.

Заметим, что систему уравнений (8) достаточно решить в области Ω'_{full} : в остальных точках R^3 $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$ определяются из системы (8) непосредственным интегрированием. Кроме того, заметим, что в системе (8) достаточно решить первое уравнение относительно $\mathbf{u}$: во втором уравнении $\mathbf{v}$ просто выражается через $\mathbf{u}$. Первое уравнение в области Ω'_{full} можно представить в следующем виде:

$$b(\mathbf{r})\mathbf{u} + \hat{B}[\mathbf{u}] = \mathbf{U}_0(\mathbf{r}), \quad (10)$$

$$\text{где } b(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sigma(\mathbf{r}) + p\varepsilon_0(\varepsilon(\mathbf{r}) - 1)}, \quad \mathbf{U}_0(\mathbf{r}) = b(\mathbf{r}) \cdot \left(\frac{\text{grad div} - p^2\varepsilon_0\mu_0}{p} \int_{R^3} G(p, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{f}(\mathbf{r}') dV' - \mu_0 \text{rot} \int_{R^3} G(p, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{g}(\mathbf{r}') dV' \right),$$

$$\mathbf{U} = (\sigma + p\varepsilon_0(\varepsilon - 1))\mathbf{u}.$$

При диссипативном операторе $\hat{B}$ для существования и единственности решения уравнения вида (10) в пространстве $L_2(\Omega'_{\text{full}})$ достаточно, чтобы функция $b(\mathbf{r})$ была локально суммируема, ограничена и допускала нижнюю положительную оценку [1]. В пределах Ω'_{full} для проводящей среды $b(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sigma(\mathbf{r})}$, а для диэлектрической среды $b(\mathbf{r}) = \frac{1}{p\varepsilon_0(\varepsilon(\mathbf{r}) - 1)}$. Функции $\sigma(\mathbf{r})$ и $\varepsilon(\mathbf{r})$ непрерывны в

каждой из отдельных сред, допускают непрерывные продолжения на границы сред, $\sigma_{\text{inf}} > 0$ у проводящих сред и $\varepsilon_{\text{inf}} > 1$ у диэлектрических сред. Следовательно, $b(\mathbf{r})$ допускает непрерывные продолжения на границу Ω_c снаружи, на границу Ω_{full} изнутри, а также на границу Ω изнутри и снаружи. Это означает, что в пределах Ω'_{full} $b(\mathbf{r})$ локально суммируема. Очевидна ограниченность $b(\mathbf{r})$

сверху: $b(\mathbf{r}) \leq \max \left\{ \frac{1}{p\varepsilon_0(\varepsilon_{\text{inf}} - 1)}; \frac{1}{\sigma_{\text{inf}}} \right\}$. Кроме того, $b(\mathbf{r})$ имеет очевидную нижнюю положительную

оценку: $b(\mathbf{r}) \geq \min \left\{ \frac{1}{p\varepsilon_0(\varepsilon_{\text{sup}} - 1)}; \frac{1}{\sigma_{\text{sup}}} \right\}$, где sup – обозначение точной верхней грани. Следовательно,

уравнение (10) имеет единственное решение в пространстве $L_2(\Omega'_{\text{full}})$, и система (8) имеет единственное решение в пространстве $(L_2(\Omega'_{\text{full}}))^2$. Тогда в силу свойств $\hat{P}$ и $\hat{B}$ та же система (8) имеет единственное решение в пространстве $(L_2(R^3))^2$.

В силу свойств оператора $\hat{P}$ и свойств обобщенного ротора, к правым частям уравнений системы (8) можно применить операцию rot в обобщенном смысле определения 4, причем в результате применения этой операции получатся поля из $L_2(R^3)$; следовательно, решение системы (8) $(\mathbf{u}; \mathbf{v}) \in (H(\text{rot}, R^3))^2$. Кроме того, применение операции rot к системе (8), с учетом свойства (9), приводит к системе уравнений (7). То есть решение системы (8) является решением системы (7) и, следовательно, решение системы (7) в пространстве $(H(\text{rot}, R^3))^2$ существует. **Теорема доказана.**

Заметим, что в силу неравенств $\|\mathbf{u}\|_2 \leq \sqrt{\varepsilon_{\text{inf}}} \|\mathbf{u}\|_2 \leq \|\sqrt{\varepsilon} \mathbf{u}\|_2 \leq \sqrt{\varepsilon_{\text{sup}}} \|\mathbf{u}\|_2$ выражение $\|\sqrt{\varepsilon} \mathbf{u}\|_2$ определяет одну из эквивалентных среднеквадратичных норм в пространстве $L_2(R^3)$; следовательно, выражение

$$\|(\mathbf{u}; \mathbf{v})\| = \sqrt{\varepsilon_0 \|\sqrt{\varepsilon} \mathbf{u}\|_2^2 + \mu_0 \|\mathbf{v}\|_2^2} \quad (11)$$

определяет одну из эквивалентных среднеквадратичных норм в пространстве $(L_2(R^3))^2$.



Обозначим как $\hat{I}$ единичный оператор; теорема 6 допускает следующую эквивалентную формулировку.

Теорема 6'. Оператор $(\hat{A} - p\hat{I})^{-1}$ определен на всем пространстве $(L_2(\mathbb{R}^3))^2$, причем относительно нормы (11) $\|(\hat{A} - p\hat{I})^{-1}\| \leq \frac{1}{p}$.

Из теорем 2, 5 и 6' непосредственно следует, что для существования и единственности решения начально-краевой задачи (1)-(3) достаточно, чтобы плотность стороннего тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ на полуинтервале $t \geq 0$ имела вторую непрерывную производную в $L_2(\mathbb{R}^3)$ по t , и векторное поле $\mathbf{j}(\mathbf{r}, 0)$ принадлежало области определения оператора $\hat{A}$ [10]. Двукратная непрерывная дифференцируемость $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ по t в $L_2(\mathbb{R}^3)$ при $t \geq 0$ изначально предположена при постановке задачи (1)-(3). Также при постановке задачи предположено, что $\mathbf{j}(\mathbf{r}, 0) \equiv \mathbf{0}$, а тождественно нулевое векторное поле, очевидно, входит в область определения $\hat{A}$. Следовательно, существование и единственность решения начально-краевой задачи (1)-(3) доказаны.

Заключение

В данной работе исследована начально-краевая задача электродинамики для неограниченного неферромагнитного дефектного проводника, находящегося под слоем диэлектрика. Выбран функциональный класс для постановки начально-краевой задачи. Показано, что выбранный функциональный класс согласуется с граничными условиями задачи – условиями непрерывности касательных компонент напряженностей. Доказано, что в выбранном функциональном классе существует единственное решение рассмотренной начально-краевой задачи.

Список литературы References

1. Дякин В.В., Сандовский В.А. 2008. Задачи электродинамики в неразрушающем контроле. Екатеринбург, Институт физики металлов, 390.
Dakin V.V., Sandovskii V.A. 2008. Zadachi elektrodinamiki v nerazrushaiuschem kontrole [Electrodynamics problems in the nondestructive testing]. Yekaterinburg, Institute of Metal Physics, 390. (in Russian)
2. Дюво Г., Лионс Ж.-Л.. 1980. Неравенства в механике и физике. Перев. с фр. М., Наука, 1980, 384.
Duvo G., Lions J.-L. 1980. Neravenstva v makhanike i fizike [Inequalities in mechanics and physics]. Moscow, Nauka, 384 (Duvo G., Lions J.-L. 1972. Les inequations en mecanique et en physique, Paris, Dunod, 387.).
3. Калинин А.В. 2007. Математические задачи физической диагностики. Корректность задач электромагнитной теории в стационарном и квазистационарном приближении. Нижний Новгород, Нижегородский государственный университет, 121.
Kalinin A.V. 2007. Matematicheskie zadachi fizicheskoy diagnostiki. Korrektnost' zadach v statzionarnom i kvazistatzionarnom priblihenii [Mathematical problems of physical diagnostics. Correctness of problems of the electromagnetic theory in the stationary and quasi-stationary approximation]. Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod State University, 121. (in Russian)
4. Дякин В.В., Марвин С.В. 2008. Начально-краевая задача и интегродифференциальные уравнения электродинамики для неоднородного проводящего тела. Журнал вычислительной математики и математической физики, 48 (2): 288–296.
Dyakin V.V., Marvin S.V. 2008. Initial-boundary value problem and integrodifferential equations electrodynamics for an inhomogeneous conductive body. Computational mathematics and mathematical physics, 48 (2): 275–283.
5. Марвин С.В., Дякин В.В. 2008. Нестационарная краевая задача электродинамики для немагнитного проводящего образца. Электричество, 12: 30–36.
Marvin S.V., Dyakin V.V. 2008. Initial-boundary value problem for a nonmagnetic conductive body. Elektrichestvo [Electricity], 12: 30–36. (in Russian)
6. Марвин С.В. 2016. Существование и единственность решения начально-краевой задачи для однородной системы уравнений Максвелла в случае неферромагнитного дефектного металлического тела. Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Физика. Математика, 1: 105–117.
Marvin S.V. 2016. Existence and the uniqueness of solution of initial-boundary problem for the uniform system of equations of Maxwell in the case of nonferromagnetic defective metallic body. Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika [Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics], 1: 105–117. (in Russian)
7. Марвин С. В. 2016. Начально-краевая задача структуроскопии неферромагнитного металлического тела с инородными диэлектрическими включениями остаточным полем мгновенно выключенного стороннего тока. Дефектоскопия, 2: 42–54.



Marvin S.V. 2016. An initial-boundary value problem of structurescopy of a nonferromagnetic metal solid with foreign dielectric inclusions using the residual field of an instantaneously cut-off extraneous current. Russian journal of nondestructive testing, 52 (2): 85-94.

8. Марвин С.В. 2016. Начально-краевая задача электромагнитного контроля дефектного ферромагнитного проводника остаточным полем мгновенно выключенного стороннего тока. Дефектоскопия, 11: 27-38.

Marvin S.V. 2016. Initial-boundary value problem of electromagnetic testing of a flawed ferromagnetic conductor by the residual field of an instantaneously cut-off current. Russian journal of nondestructive testing, 52 (11): 638-646.

9. Кудрявцев Л.Д. 1981. Курс математического анализа. Т. 2. М., Высшая школа, 584.

Kudryavtsev L. D. 1981. Kurs matematicheskogo analiza [Course of mathematical analysis]. Vol. 2. Moscow, Vysshaya shkola, 584. (in Russian)

10. Крейн С.Г. 1967. Линейные дифференциальные уравнения в банаховом пространстве. М., Наука, 464.

Krein S.G. 1967. Lineinie differencial'nie uravneniia v banahovom prostranstve [Linear differential equations in the Banach space]. Moscow, Nauka, 464. (in Russian)



УДК 519

О ГРАНИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ ЧАСТНОГО ПРОИЗВЕДЕНИЙ ДЖРБАШЯНА И БЛЯШКЕ

ON BOUNDARY PROPERTIES OF PARTIAL PRODUCTS OF DJRBASHYAN AND BLASCHKE

В.С. Закарян, Р.В. Даллакян
V.S. Zakaryan, R.V. Dallakyan

Национальный Политехнический Университет Армении, Ереван, Армения.

National Polytechnic University Of Armenia, Yerevan, Armenia.

E-mail: mathdep@seua.am, dallakyan57@mail.ru

Аннотация

Пользуясь аппаратом интегриродифференцирования Римана – Лиувилля, М.М. Джрбашян обобщил класс мероморфных в единичном круге функций N Р. Неванлинны, вводя в рассмотрение классы N_α ($-1 < \alpha < +\infty$). Фундаментальную роль в этих исследованиях играют произведения B_α , которые в специальном случае $\alpha = 0$ превращаются в произведения Бляшке. В этой заметке исследуется граничное поведение частного произведения B_α , ($-1 < \alpha < 0$) и $B_0 \equiv B$ – Бляшке.

Abstract

Using the Riemann-Liouville integration-differentiation operator M. M. Djrbashyan generalized the class of Nevanlinna's meromorphic functions in the unit circle, introducing classes N_α ($-1 < \alpha < +\infty$). Essential roles in these investigations plays products B_α , which is special case $\alpha = 0$ coincide with the Blaschke product. In this work we investigate boundary properties partial products B_α , ($-1 < \alpha < 0$) and $B_0 \equiv B$ – products Blaschke.

Ключевые слова: Оператор интегриродифференцирования Римана – Лиувилля, произведения Бляшке и Джрбашяна, класс гармонических в единичном круге функций U_α , α – емкость множества E .

Keywords: Riemann-Liouville integration-differentiation operator, Blyashke and Djrbashyan product, class of U_α functions harmonic in unite circle, α capacity of a set E .

Введение

Пусть D – единичный круг комплексной плоскости $\mathbb{C}$, $-1 < \alpha < +\infty$ и пусть последовательность $\{z_n\} \subset D$, $z_n \neq 0$, $n = 1, 2, \dots$, такая что

$$\sum_{n=0}^{\infty} (1 - |z_n|)^{1+\alpha} < +\infty. \quad (1)$$

Бесконечное произведение $B_\alpha(z; \{z_n\})$, $z \in D$ М. М. Джрбашяна определяется следующим образом [1, гл. IX]:

$$B_\alpha(z; \{z_n\}) = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{z}{z_n}\right) \exp\{-W_\alpha(z; z_n)\},$$

где для $\xi \in D$

$$W_\alpha(z; \xi) = \int_{|\xi|}^1 \frac{(1-x)^\alpha}{x} dx - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Gamma(1+\alpha+k)}{\Gamma(1+\alpha)\Gamma(1+k)} \left\{ \xi^{-k} \int_0^{|\xi|} (1-x)^\alpha x^{k-1} dx - \bar{\xi}^k \int_{|\xi|}^1 (1-x)^\alpha x^{-k-1} dx \right\} z^k ..$$

В специальном случае $\alpha = 0$ эти произведения превращаются в произведения Бляшке [1, с. 625]:

$$B_0(z; \{z_n\}) = B(z; \{z_n\}) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{z_n - z}{1 - \bar{z}_n z} \cdot \frac{|z_n|}{z_n}.$$



В работе [2] было доказано следующее утверждение о взаимосвязи между произведениями B_α , $(-1 < \alpha < 0)$ и B .

Теорема. Пусть $-1 < \alpha < 0$ и пусть последовательность $\{z_n\} \subset D$ удовлетворяет условию (1). Тогда

$$B_\alpha(z; \{z_n\}) = B(z; \{z_n\}) \cdot \exp \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} S_\alpha(e^{-i\theta} z) d\omega(\Theta) \right\},$$

где

$$S_\alpha(z) = \Gamma(1+\alpha) \left\{ \frac{2}{(1-z)^{1+\alpha}} - 1 \right\}, \quad |z| < 1,$$

$\omega(\Theta)$ – некоторая невозрастающая функция ограниченной вариации на $[0, 2\pi]$.

Отметим, что для любой функции $\omega(x)$ из класса Ω [3, гл. 1] М.М. Джрбашьяном также определены классы N_ω и произведения B_ω . Подобные классы и произведения А. М. Джрбашьяном определены и на верхней полуплоскости, о которых можно читать в книге [4] А.М. Джрбашьяна.

Как известно из работы [5, с. 54], для существования радиального предела произведения Бляшке в граничной точке $e^{i\varphi}$ необходимо и достаточно, чтобы в этой точке выполнялось условие Фростмана:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1-|z_n|}{|e^{i\varphi} - z_n|} < +\infty.$$

Для произведений B_α $(-1 < \alpha < 0)$ доказано, что если имеет место условие типа Фростмана [6, с. 139]

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1-|z_n|}{|e^{i\varphi} - z_n|} \right)^{1+\alpha} < +\infty,$$

то в граничной точке $e^{i\varphi}$ существует конечный и отличный от нуля предел произведения B_α . Отметим, что вопрос о справедливости обратного утверждения пока остается открытым.

Рассмотрим систему всех множеств $\{B\}$, измеримых по Борелю и лежащих на $[0, 2\pi]$. Будем называть мерой μ всякую неотрицательную, вполне аддитивную функцию множеств, определенную на $\{B\}$ и нормированную, т. е. $\mu([0, 2\pi]) = 1$. Будем говорить, что мера сосредоточена на B и писать $\mu \prec B$, если $m(B) = 1$, т. е. если

$$\int_B d\mu = \int_0^{2\pi} d\mu = 1.$$

Скажем, что множество E , измеримое по Борелю, имеет положительную γ -емкость $(0 < \gamma < 1)$, если найдется такая $\mu \prec E$, для которой функция

$$V_\gamma(x; z) = \int_0^{2\pi} \frac{d\mu}{|e^{it} - re^{ix}|^\gamma}$$

остается равномерно ограниченной по x при $r \rightarrow 1-0$, то есть если при некотором $\mu \prec E$ имеем

$$V_\gamma(\mu) = \sup_{0 \leq r \leq 1} \left\{ \max_{0 \leq x \leq 2\pi} V_\gamma(x; r) \right\} < +\infty.$$



Если же для любой меры $\mu \prec E$ $V_\gamma(\mu) = +\infty$, то скажем, что E имеет γ -емкость равную нулю, и напомним $\text{cap}_\gamma E = 0$.

В работе [6] доказано, что если последовательность $\{z_n\} \subset D$ удовлетворяет условию (1) и имеет место $1 + \alpha$ условие типа Фростмана ($-1 < \alpha < 0$), то везде на $[0, 2\pi]$ существуют конечные радиальные значения (отличные от нуля) произведения $B_\alpha(z; \{z_n\})$, кроме, быть может, некоторого исключительного множества $E \subset [0, 2\pi]$, $1 + \alpha$ -емкость которого равна нулю: $\text{cap}_{1+\alpha} E = 0$.

Более того, если точка $z = e^{i\varphi}$ не является точкой сгущения для последовательности $\{z_n\}$, то произведение $B_\alpha(z; \{z_n\})$ непрерывно в некоторой окрестности точки $z = e^{i\varphi}$ ($|z| \leq 1$).

Если последовательность $\{z_n\} \subset D$ удовлетворяет условию (1), то, согласно источнику [7], для произведения Бляшке также везде на $[0, 2\pi]$ существует радиальный предел (по модулю равный единице) кроме, быть может, некоторого исключительного, некоторого множества E , для которого $\text{cap}_{1+\alpha} E = 0$.

Оператор интегро-дифференцирования $D^{-\alpha}$ ($-1 < \alpha < +\infty$) в смысле Римана-Лиувилля с началом в нулевой точке определяется следующим образом:

$$D^{-\alpha}\{\varphi(r)\} = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^r (r-t)^{\alpha-1} \varphi(t) dt, \text{ если } 0 < \alpha < +\infty,$$

$$D^0\{\varphi(r)\} = \varphi(r),$$

$$D^{-\alpha}\{\varphi(r)\} = \frac{d}{dr} D^{-(1+\alpha)}\{\varphi(r)\}, \text{ если } -1 < \alpha < 0.$$

Обозначим через U_α ($-1 < \alpha < +\infty$) класс гармонических в единичном круге D функций $u(z)$, удовлетворяющих условию

$$\sup_{0 < r < 1} \left\{ \int_0^{2\pi} |u_\alpha(re^{i\varphi})| d\varphi \right\} < +\infty,$$

где при данном α

$$u_\alpha(re^{i\varphi}) \equiv r^{-\alpha} D^{-\alpha} u(re^{i\varphi}).$$

Из литературы [1, с. 649] известно, что если $u(z)$ – гармоническая в единичном круге функция, то при любом α ($-1 < \alpha < +\infty$) ассоциированная с ней функция $u_\alpha(z)$ также будет гармонической.

В работе [8] доказано, что если для некоторой точки $e^{i\varphi}$, $\varphi \in [0, 2\pi]$ при каком-либо α ($-1 < \alpha < +\infty$) выполняется условие

$$\lim_{z \rightarrow e^{i\varphi}} (1 - |z|)^{1+\alpha} |u(z)| = d > 0,$$

где $z \rightarrow e^{i\varphi}$ по касательному к единичной окружности пути, то $u(z)$ не принадлежит классу U_α .

Отметим, что это утверждение в специальном случае $\alpha = 0$ доказано А. Г. Нафтаlevичем [9]. Перейдем к результатам настоящей работы.

Теорема 1. Пусть $-1 < \alpha < 0$, последовательность $\{z_n\}_{n=1}^\infty \subset D$ удовлетворяет условию (1) Бляшке-Джрбашяна и пусть $n(r)$ – количество точек z_n , лежащих в круге $|z| \leq r < 1$. Тогда если

$$n(r) \leq \frac{\lambda(r)}{(1-r)^{1+\alpha}},$$

где $\lambda(r)$ такая, что



$$\lim_{r \rightarrow 1-0} \lambda(r) = 0,$$

то для любого значения φ , $\varphi \in [0, 2\pi]$

$$\lim_{z \rightarrow e^{i\varphi}} (1-|z|)^{1+\alpha} \left| \log \frac{B_\alpha(z; \{z_n\})}{B(z; \{z_n\})} \right| = 0.$$

Доказательство. Из определений функций $B_\alpha(z; \{z_n\})$ и $B(z; \{z_n\}) \equiv B_0(z; \{z_n\})$ имеем:

$$\left| \log \frac{B_\alpha(z; \{z_n\})}{B(z; \{z_n\})} \right| = \left| \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re}[W_0(z; z_n) - W_\alpha(z; z_n)] \right|.$$

Согласно источнику [10] известно, что если $|z| < 1$, $|\xi| < 1$, то справедливо неравенство

$$\operatorname{Re}[W_\alpha(z; \xi) - W_0(z; \xi)] \geq -\frac{\alpha}{2+\alpha} \int_{|\xi|}^1 \frac{(1-x)^\alpha - 1}{x} dx > 0. \quad (2)$$

Из неравенства (2) следует, что предыдущее равенство примет следующий вид:

$$\left| \log \frac{B_\alpha(z; \{z_n\})}{B(z; \{z_n\})} \right| = \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re}[W_\alpha(z; z_n) - W_0(z; z_n)].$$

Напишем это равенство в таком виде:

$$\begin{aligned} & \left| \log \frac{B_\alpha(re^{i\varphi}; \{z_n\})}{B(re^{i\varphi}; \{z_n\})} \right| = \\ & = \sum_{|z_n| \leq r} \operatorname{Re}[W_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) - W_0(re^{i\varphi}; z_n)] + \sum_{|z_n| > r} \operatorname{Re}[W_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) - W_0(re^{i\varphi}; z_n)] \end{aligned} \quad (3)$$

Из работы [3 с. 106] известно, что если $z = re^{i\varphi}$, $r < 1$, $|\xi| < 1$, то

$$|W_\alpha(z; \xi) - W_0(z; \xi)| \leq C \cdot \left(\frac{1-|\xi|}{e^{i\varphi} - \xi} \right)^{1+\alpha}, \quad (4)$$

где C – некоторое положительное число не зависящее ни от z , ни от ξ . Пользуясь этим неравенством, оценим сверху следующую сумму:

$$\begin{aligned} \sum_{|z_n| \leq r} \operatorname{Re}[W_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) - W_0(re^{i\varphi}; z_n)] & \leq \sum_{|z_n| \leq r} \operatorname{Re}[W_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) - W_0(re^{i\varphi}; z_n)] \leq \\ & \leq C \sum_{|z_n| \leq r} \left(\frac{1-|z_n|}{|e^{i\varphi} - z_n|} \right)^{1+\alpha} \leq C \sum_{|z_n| \leq r} 1 = Cn(r) = \frac{C\lambda(r)}{(1-r)^{1+\alpha}}. \end{aligned}$$

Следовательно, имея в виду неравенство (2) и то, что $\lambda(r) \rightarrow 0$, когда $r \rightarrow 1-0$, имеем:

$$\lim_{z \rightarrow e^{i\varphi}} (1-r)^{1+\alpha} \sum_{|z_n| \leq r} \operatorname{Re}[W_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) - W_0(re^{i\varphi}; z_n)] = 0. \quad (5)$$

В работе [1, с. 624] доказано, что если $0 \leq |z| < |\xi| < 1$, то

$$W_\alpha(z; \xi) = \log \left(1 - \frac{z}{\xi} \right) + \omega_\alpha(z; \xi),$$

где

$$\omega_\alpha(z; \xi) = \int_{|\xi|}^1 \left[\left(1 - \frac{\bar{\xi}z}{x} \right)^{-1-\alpha} + \left(1 - \frac{xz}{\xi} \right)^{-1-\alpha} - 1 \right] \frac{(1-x)^\alpha}{x} dx,$$

причем

$$\lim_{|\xi| \rightarrow 1-0} \sup \frac{|\omega_\alpha(re^{i\varphi}; \xi)|}{(1-|\xi|)^{1+\alpha}} \leq \frac{1}{1+\alpha} \left[\frac{2}{(1-r)^{1+\alpha}} + 1 \right]. \quad (6)$$



Пусть r достаточно близкое к 1 число. Пользуясь последними фактами, оценим сверху вторую сумму правой части равенства (3):

$$\begin{aligned} \sum_{|z_n|>r} \operatorname{Re}[W_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) - W_0(re^{i\varphi}; z_n)] &= \sum_{|z_n|>r} \operatorname{Re}[\omega_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) - \omega_0(re^{i\varphi}; z_n)] \leq \\ &\leq \sum_{|z_n|>r} \left\{ \left| \omega_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) \right| - \operatorname{Re} \int_{|z_n|}^1 \left[\left(1 - \frac{\overline{z_n} re^{i\varphi}}{x} \right)^{-1} + \left(1 - \frac{x re^{i\varphi}}{\xi} \right)^{-1} - 1 \right] dx \right\}. \end{aligned}$$

Нетрудно убедиться, что при $x \in [z_n; 1]$, $r < |z_n|$

$$\operatorname{Re} \left(1 - \frac{\overline{z_n} re^{i\varphi}}{x} \right)^{-1} \geq 0$$

$$\operatorname{Re} \left(1 - \frac{x re^{i\varphi}}{z_n} \right)^{-1} \geq 0,$$

следовательно, из последнего неравенства будем иметь:

$$\sum_{|z_n|>r} \operatorname{Re}[W_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) - W_0(re^{i\varphi}; z_n)] \leq \sum_{|z_n|>r} \operatorname{Re} \left[\omega_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) + \log \frac{1}{|z_n|} \right].$$

Отсюда, пользуясь оценкой (6), для достаточно близких к 1 чисел r будем иметь

$$\sum_{|z_n|>r} \operatorname{Re}[W_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) - W_0(re^{i\varphi}; z_n)] \leq \sum_{|z_n|>r} \log \frac{1}{|z_n|} + \frac{1}{1+\alpha} \left[\frac{2}{(1-r)^{1+\alpha}} + 1 \right] \sum_{|z_n|>r} (1-|z_n|)^{1+\alpha}.$$

Значит,

$$\begin{aligned} (1-r)^{1+\alpha} \sum_{|z_n|>r} \operatorname{Re}[W_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) - W_0(re^{i\varphi}; z_n)] &\leq (1-r)^{1+\alpha} \sum_{|z_n|>r} \log \frac{1}{|z_n|} + \\ &+ (1-r)^{1+\alpha} \frac{1}{1+\alpha} \sum_{|z_n|>r} (1-|z_n|)^{1+\alpha} + \frac{2}{1+\alpha} \sum_{|z_n|>r} (1-|z_n|)^{1+\alpha}. \end{aligned}$$

Из условия (1) следует, что

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 1-0} (1-r)^{1+\alpha} \sum_{|z_n|>r} \log \frac{1}{|z_n|} &= 0 \\ \lim_{r \rightarrow 1-0} (1-r)^{1+\alpha} \sum_{|z_n|>r} (1-|z_n|)^{1+\alpha} &= 0 \\ \lim_{r \rightarrow 1-0} \sum_{|z_n|>r} (1-|z_n|)^{1+\alpha} &= 0. \end{aligned}$$

Это означает, что

$$\lim_{z \rightarrow e^{i\varphi}} (1-r)^{1+\alpha} \sum_{|z_n|>r} \operatorname{Re}[W_\alpha(re^{i\varphi}; z_n) - W_0(re^{i\varphi}; z_n)] = 0. \quad (7)$$

Из равенства (3) с использованием формул (5), (7) и следует справедливость утверждения теоремы.

Далее, пользуясь теоремой 1, докажем справедливость такого утверждения.

Теорема 2. Пусть $-1 < \alpha < 0$, последовательность $\{z_n\} \subset D$ удовлетворяет условию (1) Бляшке-Джрбашяна. Тогда, если для некоторого значения φ , $\varphi \in [0, 2\pi]$

$$\lim_{z \rightarrow e^{i\varphi}} (1-|z|)^{1+\alpha} \cdot \left| \log \left| \frac{B_\alpha(z; \{z_n\})}{B(z; \{z_n\})} \right| \right| = d > 0,$$

то существует последовательность $\{r_k\}$

$$0 < r_1 < r_2 < \dots < r_{k-1} < r_k < \dots < 1, \quad r_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 1,$$



такая, что

$$n(r_k) = \frac{c}{(1-r_k)^{1+\alpha}},$$

где c – некоторая константа.

Доказательство. Заметим, что

$$\sum_{n=1}^{\infty} (1-|z_n|)^{1+\alpha} > \sum_{|z_n| \leq r} (1-|z_n|)^{1+\alpha} \geq (1-r)^{1+\alpha} \sum_{|z_n| \leq r} 1 = (1-r)^{1+\alpha} n(r).$$

Значит, для любого значения $r, 0 < r < 1$, имеем

$$n(r) \leq \frac{c}{(1-r)^{1+\alpha}},$$

где $c = \sum_{n=1}^{\infty} (1-|z_n|)^{1+\alpha}$.

Пользуясь этим фактом и теоремой 1, нетрудно установить справедливость утверждения теоремы.

Теорема 3. Пусть $-1 < \alpha < 0$, последовательность $\{z_n\} \subset D$ удовлетворяет условию (1) Бляшке-Джрбашяна и пусть z стремится к граничной точке $e^{i\varphi}$ касательным путем. Тогда

$$\lim_{z \rightarrow e^{i\varphi}} (1-|z|)^{1+\alpha} \log \left| \frac{B_{\alpha}(z; \{z_n\})}{B(z; \{z_n\})} \right| = 0.$$

Доказательство. Из теоремы о взаимосвязи между произведениями Бляшке и Джрбашяна имеем:

$$\log \left| \frac{B_{\alpha}(re^{i\varphi}; \{z_n\})}{B(re^{i\varphi}; \{z_n\})} \right| = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \operatorname{Re} S_{\alpha}(re^{i(\varphi-\Theta)}) d\omega(\Theta) = u(re^{i\varphi}),$$

где $\omega(\Theta)$ – невозрастающая функция конечной вариации на $[0, 2\pi]$. Покажем, что гармоническая функция $u(re^{i\varphi})$ принадлежит классу U_{α} . Так как [1, с. 576]

$$r^{-\alpha} D^{-\alpha} \{\operatorname{Re} S_{\alpha}(re^{i\varphi})\} = \operatorname{Re} S_0(re^{i(\varphi-\Theta)}) = \frac{1-r^2}{1-2\cos(\varphi-\Theta)+r^2},$$

то

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} r^{-\alpha} D^{-\alpha} u(re^{i(\varphi-\Theta)}) d\varphi &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} r^{-\alpha} D^{-\alpha} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \operatorname{Re} S_{\alpha}(re^{i(\varphi-\Theta)}) d\omega(\Theta) \right\} d\varphi = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1-r^2}{1-2r\cos(\varphi-\Theta)+r^2} d\omega(\Theta) \right\} d\varphi = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1-r^2}{1-2r\cos(\varphi-\Theta)+r^2} d\varphi \right\} d\omega(\Theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega(\Theta). \end{aligned}$$

Значит, действительно $u(re^{i\varphi}) \in U_{\alpha}$. В работе [8] доказано, что если $u(re^{i\varphi}) \in U_{\alpha}$ и z стремится к граничной точке $e^{i\varphi}$ касательным путем, то

$$\lim_{re^{i\varphi} \rightarrow e^{i\varphi}} u(re^{i\varphi}) = 0.$$

Из этого факта и следует справедливость утверждения теоремы.

Следуя М.М. Джрбашяну [2, с. 26], через Ω обозначим класс функций $\omega(x)$, удовлетворяющих следующим условиям:

1) $\omega(x)$ положительна и непрерывна на $[0, 1)$.

2) $\omega(0) = 1, \int_0^1 \omega(x) dx < +\infty$.



Теперь докажем справедливость следующего утверждения.

Теорема 4. Пусть $-1 < \alpha < 0$, последовательность $\{z_n\}_{n=1}^{\infty} \subset D$ удовлетворяет условию (1) Бляшке-Джрбашяна и пусть

$$n(r_k) = \frac{c}{(1-r_k)^{1+\alpha}}, k = 1, 2, \dots$$

где c – некоторое постоянное, а последовательность $\{r_k\}$ такая, что

$$0 < r_1 < r_2 < \dots < r_{k-1} < r_k < \dots < 1, \lim_{k \rightarrow \infty} r_k \rightarrow 1.$$

Тогда

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int_{|z_n|}^1 \omega(x) dx = +\infty,$$

где $\omega(x)$ – любая неубывающая функция из класса Ω , такая, что

$$\frac{\omega(r)}{(1-r)^{\alpha}} \xrightarrow{r \rightarrow 1-0} +\infty.$$

Доказательство. Допустим противное: существует неубывающая функция $\omega(x) \in \Omega$, такая, что

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int_{|z_n|}^1 \omega(x) dx < +\infty.$$

Тогда для любого натурального числа k

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int_{|z_n|}^1 \omega(x) dx \geq \sum_{|z_n| \leq r_k} \int_{|z_n|}^1 \omega(x) dx \geq \left(\int_{r_k}^1 \omega(x) dx \right) n(r_k).$$

Значит,

$$n(r_k) \leq \frac{c_1}{\int_{r_k}^1 \omega(x) dx}, k = 1, 2, \dots,$$

где $c_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{|z_n|}^1 \omega(x) dx$.

Из условия теоремы следует, что

$$\frac{c}{(1-r_k)^{1+\alpha}} = \frac{c_1}{\int_{r_k}^1 \omega(x) dx}, k = 1, 2, \dots,$$

то есть

$$\frac{\int_{r_k}^1 \omega(x) dx}{(1-r_k)^{1+\alpha}} \leq \frac{c_1}{c}, k = 1, 2, \dots.$$

Отсюда, так как $\omega(x)$ – неубывающая функция, то будем иметь:

$$\frac{\omega(r_k)}{(1-r_k)^{\alpha}} \leq \frac{c_1}{c}, k = 1, 2, \dots.$$

Это означает, что когда $r \rightarrow 1-0$ то $\frac{\omega(r)}{(1-r)^{\alpha}}$ не стремится к $+\infty$. Этим противоречием и завершается доказательство теоремы.

Из теоремы 2 с использованием теоремы 4 следует справедливость следующего утверждения.

Теорема 5. Пусть $-1 < \alpha < 0$, последовательность $\{z_n\} \subset D$ удовлетворяет условию (1) Бляшке-Джрбашяна. Тогда, если для некоторого значения φ , $\varphi \in [0, 2\pi]$



$$\overline{\lim}_{z \rightarrow e^{i\varphi}} (1 - |z|)^{1+\alpha} \left| \log \left| \frac{B_\alpha(z; \{z_n\})}{B(z; \{z_n\})} \right| \right| = d > 0,$$

то

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int_{|z_n|}^1 \omega(x) dx = +\infty,$$

где $\omega(x)$ – любая неубывающая функция из класса Ω , такая, что

$$\frac{\omega(r)}{(1-r)^\alpha} \xrightarrow{r \rightarrow 1-0} +\infty.$$

Далее докажем справедливость такого утверждения.

Теорема 6. Пусть $-1 < \alpha < 0$, последовательность $\{z_n\} \subset D$ удовлетворяет условию (1) Бляшке-Джрбашяна. Тогда, если для некоторого значения φ , $\varphi \in [0, 2\pi]$

$$\overline{\lim}_{z \rightarrow e^{i\varphi}} (1 - |z|)^{1+\alpha} \left| \log \left| \frac{B_\alpha(z; \{z_n\})}{B(z; \{z_n\})} \right| \right| = d > 0,$$

то точка $e^{i\varphi}$ является точкой сгущения для последовательности $\{z_n\}$. Более того, ряд типа Фростмана в этой точке расходится:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1 - |z_n|}{|e^{i\varphi} - z_n|} \right)^{1+\alpha} = \infty.$$

Доказательство. Допустим противное: пусть точка $e^{i\varphi}$ не является точкой сгущения для последовательности $\{z_n\}$. Тогда из неравенства (1) следует, что имеет место следующее условие типа Фростмана:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1 - |z_n|}{|e^{i\varphi} - z_n|} \right)^{1+\alpha} < +\infty. \quad (8)$$

Но из определений функций $B_\alpha(z; \{z_n\})$, $B(z; \{z_n\})$ и из неравенств (4) и (8) будем иметь:

$$\begin{aligned} \left| \log \left| \frac{B_\alpha(z; \{z_n\})}{B(z; \{z_n\})} \right| \right| &= \left| \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re}[W_\alpha(z; z_n) - W_0(z; z_n)] \right| \leq \\ &\leq \left| \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re}[W_0(z; z_n) - W_\alpha(z; z_n)] \right| \leq \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1 - |z_n|}{|e^{i\varphi} - z_n|} \right)^{1+\alpha} < +\infty. \end{aligned}$$

Значит,

$$\lim_{z \rightarrow e^{i\varphi}} (1 - |z|)^{1+\alpha} \log \left| \frac{B_\alpha(z; \{z_n\})}{B(z; \{z_n\})} \right| = 0.$$

В случае когда точка $e^{i\varphi}$ является точкой сгущения последовательности $\{z_n\}$, расходимость ряда (8) типа Фростмана доказывается аналогичным образом.

Полученное противоречие и завершает доказательство первого утверждения теоремы.

Теорема 7. Пусть $-1 < \alpha < 0$, последовательность $\{z_n\} \subset D$ удовлетворяет условию (1) Бляшке-Джрбашяна и пусть E – множество тех точек $e^{i\varphi}$, $\varphi \in [0, 2\pi]$ для которых

$$\overline{\lim}_{z \rightarrow e^{i\varphi}} (1 - |z|)^{1+\alpha} \left| \log \left| \frac{B_\alpha(z; \{z_n\})}{B(z; \{z_n\})} \right| \right| = d > 0.$$

Тогда $\operatorname{cap}_{1+\alpha} E = 0$.



Доказательство. По теореме 6, для тех $\varphi, \varphi \in [0, 2\pi]$, для которых $e^{i\varphi} \in E$, имеем:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1 - |z_n|}{e^{i\varphi} - z_n} \right)^{1+\alpha} = +\infty.$$

Откуда и следует [3, с. 105] $\text{cap}_{1+\alpha} E = 0$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного комитета по науке МОН РА в рамках научного проекта № 15Т-1А083.

Список литературы References

1. Джрбашян М. М. 1966. Интегральные преобразования и представления функций в комплексной области. Изд. "Наука", Москва.
Djrbashian M. M. 1966. Integral transformation and representation of functions on the complex domain. – M. Nauka.
2. Джрбашян М. М., Захарян В. С. 1968. О факторизации B_a , Мат. Зам, т. 4, N 1: 3-10.
Djrbashian M. M., Zakaryan V. S. 1968. On factorization of function B_a . Math. zam, vol. 4. N. 1: 3-10.
3. Джрбашян М. М., Захарян В. С. 1993. Классы и граничные свойства функций, мероморфных в круге. Изд. "Наука", Москв.
Djrbashian M. M., Zakaryan V. S. 1993. Classes and boundary properties of functions meromorphic in circle. Izd. Nauka, Moscow.
4. Djrbashian A. M. 2005. Functions of a -Bounded Type in the Half-Plane. Springer Science+Business Media.
5. Коллингвуд, Ловатер А. 1971. Теория предельных множеств. Изд. «Мир», Москва.
Kollingvud, Lovater A. 1971. Theory of boundary sets. Izd. Mir. Moscow.
6. Захарян В. С. 1968. О радиальных предельных значениях функций B_a . Изв. АН Арм. ССР, Мат. 3 N 4: 5.
Zakaryan V. S. 1968. On radial boundary values of functions B_a . Izv. AN Arm. SSR, Math. 3, N4: 5.
7. Broman A. 1947. On two classes of trigonometrical series. Thesis, University of Uppsala.
8. Dallakyan R. V. On the boundary behavior of functions in the Djrbashyan classes U_a and A_a . Eurasian Math. Journal, vol. 4, Number 2 (2013): 57-63.
9. Нафтаевич А. Г. 1956. Об интерполировании функций ограниченного вида. Ученые Записки Вильнюсского университета, т. 5.
Naftalevich A. G. 1956. On interpolation of function of bounded types. Uchenie zapiski vilnyussskogo universiteta, vol. 5.
10. Захарян В. С. 1988. Об одной оценке для произведения М. М. Джрбашяна. Известия АН Арм. ССР, Мат. XXIII, N2.
Zakaryan V. S. 1988. On an estimation for Djrbashian's product. Izvestia AN Arm. SSR, Math. XXIII, N2



УДК 517.983

О РАЗРЕШИМОСТИ ВЫРОЖДАЮЩИХСЯ ЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДРОБНОГО ПОРЯДКА

ON THE SOLVABILITY OF DEGENERATE LINEAR DIFFERENTIAL EQUATIONS OF FRACTIONAL ORDER

А.В. Глушак, Т.Г. Романченко
A.V. Glushak, T.G. Romanchenko

Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

Belgorod National Research University, 85, Pobedy St., Belgorod, 308015, Russia

E-mail: Glushak@bsu.edu.ru; Romanchenko_t@bsu.edu.ru

Аннотация

Для вырождающегося дифференциального уравнения дробного порядка в зависимости от коэффициента при дробной производной выделено два случая. Случай, когда все решения имеют непрерывную дробную производную и случай, когда лишь часть решений обладает этим свойством. Получены представления указанных решений и установлены их оценки.

Abstract

For degenerate differential equations of fractional order, depending on the coefficient of the fractional derivative selected two cases. The case when all decisions are continuous fractional derivative to the case when only a part of the solution has this property. The representations of these solutions and their evaluation.

Ключевые слова: производная дробного порядка, вырождающееся дифференциальное уравнение, постановка граничной задачи.

Keywords: a derivative of fractional order degenerate differential equation formulation of boundary value problems.

На отрезке действительной оси $[0, d]$ рассматриваются два уравнения:

$$a(x)(D_{d-}^{\alpha} u(x))' + b(x)D_{d-}^{\alpha} u(x) + c(x)u(x) = f(x), \quad (1)$$

$$a(x)(D_{0+}^{\alpha} u(x))' + b(x)D_{0+}^{\alpha} u(x) + c(x)u(x) = f(x), \quad (2)$$

где $D_{d-}^{\alpha} u = -\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_x^d u(t)(t-x)^{-\alpha} dt$ и $D_{0+}^{\alpha} u = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_0^x u(t)(x-t)^{-\alpha} dt$ – соответственно правосторонняя и левосторонняя производные Римана-Лиувилля порядка α , $0 < \alpha < 1$, $\Gamma(\cdot)$ – гамма-функция Эйлера.

Условие 1. Пусть $b(x)$, $c(x)$ и $f(x)$ непрерывны на $[0, d]$, $a(x) \in C^1[0, d]$, $a(0) = 0$, $a(x) > 0$ при $x > 0$.

Таким образом, условие 1 означает, что уравнения (1) и (2) порядка $1+\alpha$ при $x=0$ вырождаются в уравнения низшего порядка α .

Вырождающиеся линейные уравнения целого порядка, т. е. случай, когда $\alpha=1$, ранее детально изучались в работах [1 – 3]. В этих работах при исследовании гладкости решений было выделено два существенно различных случая: случай, когда все решения однородного уравнения непрерывны вплоть до границы вырождения $x=0$ и случай, когда лишь часть этих решений непрерывна вплоть до точки $x=0$.

В настоящей работе уже для уравнений дробного порядка также рассмотрено два случая: случай, когда все решения уравнения (1) имеют непрерывную на $[0, d]$ дробную производную $D_{d-}^{\alpha} u(x)$ и случай, когда лишь часть уравнения (2) имеет непрерывную дробную производную $D_{0+}^{\alpha} u(x)$. Само же решение и в том и в другом случае имеет интегрируемую особенность.

1. Случай $b(0) < 0$. Тогда уравнение (1) путем обращения оператора $a(x)\frac{d}{dx} + b(x)$ может быть сведено к интегральному уравнению



$$D_{d-}^{\alpha} u = e^{P(x)} \left(\mu - \int_x^d \frac{f(t) - c(t)u(t)}{a(t)} e^{-P(t)} dt \right), \quad (3)$$

где μ – произвольная постоянная, $P(x) = \int_x^d \frac{b(y)}{a(y)} dy$.

Применяя формулу дробного интегрирования по частям [4, с. 51], преобразуем интеграл

$$\int_x^d \frac{c(t)u(t)}{a(t)} e^{-P(t)} dt = \int_x^d D_{x+}^{\alpha} I_{x+}^{\alpha} \left(\frac{c(t)}{a(t)} e^{-P(t)} \right) u(t) dt = \int_x^d I_{x+}^{\alpha} \left(\frac{c(t)}{a(t)} e^{-P(t)} \right) D_{d-}^{\alpha} u(t) dt, \quad (4)$$

здесь $I_{a+}^{\alpha} u(y) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^y u(y)(y-t)^{\alpha-1} dt$.

Используя обозначения

$$v(x) = D_{d-}^{\alpha} u, \quad Q(x, \mu) = e^{P(x)} \left(\mu - \int_x^d \frac{f(t)}{a(t)} e^{-P(t)} dt \right), \quad P(x) = \int_x^d \frac{b(y)}{a(y)} dy, \quad k_0(x, t) = e^{P(x)} I_{x+}^{\alpha} \left(\frac{c(t)}{a(t)} e^{-P(t)} \right)$$

и равенство (4), интегральное уравнение (3) запишем в виде

$$v(x) = Q(x, \mu) + \int_x^d k_0(x, t) v(t) dt. \quad (5)$$

Чтобы воспользоваться известными результатами о разрешимости интегрального уравнения Вольтерра (5), достаточно, чтобы функция $Q(x, \mu)$ была непрерывной, а ядро $k_0(x, t)$ – ограниченным.

Непрерывность функции $Q(x, \mu)$ вытекает из леммы 1.1 и теоремы 1.1 работы [1], а ограниченность $k_0(x, t)$ мы просто потребуем.

Условие 2. Функция $k_0(x, t)$ ограничена.

Отметим, что достаточным условием ограниченности функции $k_0(x, t)$ является следующее условие.

Условие 3. Пусть существуют такие числа $c_0 > 0$ и $p > \frac{1}{\alpha}$, что выполнено неравенство

$$|c^p(x)| < pc_0 a^{p-1}(x).$$

Покажем, что если выполнено условие 3, то функция $k_0(x, t)$ ограничена. Для этого запишем ее как

$$k_0(x, t) = \frac{e^{P(x)}}{\Gamma(\alpha)} \int_x^t (t-y)^{\alpha-1} \frac{c(y)}{a(y)} e^{-P(y)} dy. \quad (6)$$

Применяя в функции (6) неравенство Гельдера, получим:

$$|k_0(x, t)| \leq \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left(\int_x^t \frac{|c(y)|^p}{a^p(y)} e^{p(P(x)-P(y))} dy \right)^{1/p} \left(\int_x^t (t-y)^{q(\alpha-1)} dy \right)^{1/q},$$

где $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$. Поскольку $p > \frac{1}{\alpha}$, то $q < \frac{1}{1-\alpha}$ и $\int_x^t (t-y)^{q(\alpha-1)} dy < \infty$.

Далее, в силу условия 3 имеем

$$\int_x^t \frac{|c(y)|^p}{a^p(y)} e^{p(P(x)-P(y))} dy \leq p \int_x^t \frac{1}{a(y)} e^{p(P(x)-P(y))} dy.$$

Ограниченность же последнего интеграла доказана в лемме 1.2 в работе [1]. Таким образом, ограниченность функции $k_0(x, t)$ установлена.

Решим уравнение (5) методом последовательных приближений, получим:

$$\begin{aligned} v_0(x) &= Q(x, \mu), \\ v_1(x) &= Q(x, \mu) + \int_x^d Q(t, \mu) k_0(x, t) dt, \\ v_2(x) &= Q(x, \mu) + \int_x^d \left(Q(t, \mu) + \int_t^d Q(s, \mu) k_0(t, s) ds \right) k_0(x, t) dt = \\ &= Q(x, \mu) + \int_t^d Q(t, \mu) k_0(x, t) dt + \int_x^d k_0(x, t) \int_t^d Q(s, \mu) k_0(t, s) ds dt = \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 &= Q(x, \mu) + \int_x^d Q(t, \mu) k_0(x, t) dt + \int_x^d Q(s, \mu) \int_x^s k_0(x, t) k_0(t, s) dt ds = \\
 &= Q(x, \mu) + \int_x^d Q(t, \mu) k_0(x, t) dt + \int_x^d Q(s, \mu) k_1(x, s) ds = Q(x, \mu) + \int_x^d Q(t, \mu) \sum_{i=0}^1 k_i(x, t) dt, \\
 &v_3(x) = Q(x, \mu) + \int_x^d Q(t, \mu) \sum_{i=0}^2 k_i(x, t) dt.
 \end{aligned}$$

В результате получим:

$$v(x) = v(x, \mu) = Q(x, \mu) + \int_x^d Q(t, \mu) V(x, t) dt, \quad (7)$$

где $V(x, t) = \sum_{i=0}^{\infty} k_i(x, t)$, и $k_i(x, t) = \int_x^t k_0(x, s) k_{i-1}(s, t) ds$ для $i \geq 1$.

При этом из общей теории интегральных уравнений Вольтерра следует оценка

$$\|v(x, \mu)\| \leq c_1 \|Q(x, \mu)\|, \quad c_1 > 1,$$

где $\|\cdot\|$ – норма в $C[0, d]$, которая, с учетом лемм 1.1 и 1.2 работы [1], приводит к неравенству

$$\|v\| \leq c_2 (\|f\| + |\mu|), \quad c_2 > 0. \quad (8)$$

Теперь, для нахождения функции $u(x)$ из равенства $v(x) = D_{d-}^{\alpha} u$, используем формулу

$$I_{d-}^{\alpha} D_{d-}^{\alpha} u = u(x) - \frac{1}{\Gamma(\alpha)} I_{d-}^{1-\alpha} u(d) (d-x)^{\alpha-1},$$

где $I_{d-}^{\alpha} u = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^d u(t) (t-x)^{\alpha-1} dt$.

Таким образом, мы доказали следующее утверждение.

Теорема 1. Пусть выполнены условия 1, 2 и $b(0) < 0$. Тогда любое решение уравнения (1) имеет непрерывную на $[0, d]$ дробную производную $D_{d-}^{\alpha} u$ и при некоторых μ и β представимо в виде

$$u(x) = I_{d-}^{\alpha} v(x, \mu) + \beta (d-x)^{\alpha-1}, \quad (9)$$

где $v(x, \mu)$ определяется формулой (7). При этом для него справедлива оценка

$$\left\| (x-d)^{1-\alpha} a(x) (D_{d-}^{\alpha} u)' \right\| + \|D_{d-}^{\alpha} u\| + \|(x-d)^{1-\alpha} u\| \leq c_3 (\|f\| + |\mu| + |\beta|) \quad (10)$$

с некоторой постоянной $c_3 > 0$, зависящая от коэффициентов уравнения (1).

Отметим лишь, что оценка (10) вытекает из неравенства (8), представления (9) и ограниченности оператора дробного интегрирования [4, с. 58].

Для выделения единственного решения из множества, определяемого формулой (9), при $c(x) \geq 0$ можно задать два условия, например, вида

$$I_{d-}^{1-\alpha} u(0) = u_0, \quad I_{d-}^{1-\alpha} u(d) = u_d.$$

2. Случай $b(0) > 0$. Тогда уравнение (2) путем обращения оператора $a(x) \frac{d}{dx} + b(x)$ может быть сведено к интегральному уравнению

$$D_{0+}^{\alpha} u = e^{p(x)} \left(\mu + \int_0^x \frac{f(t) - c(t)u(t)}{a(t)} e^{-p(t)} dt \right), \quad (11)$$

где μ – произвольная постоянная.

Применяя формулу дробного интегрирования по частям [4, с. 51], преобразуем интеграл

$$\int_0^x \frac{c(t)u(t)}{a(t)} e^{-p(t)} dt = \int_0^x D_{x-}^{\alpha} I_{x-}^{\alpha} \left(\frac{c(t)}{a(t)} e^{-p(t)} \right) u(t) dt = \int_0^x I_{x-}^{\alpha} \left(\frac{c(t)}{a(t)} e^{-p(t)} \right) D_{0+}^{\alpha} u(t) dt, \quad (12)$$

здесь $I_{a-}^{\alpha} u(y) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^a u(y) (y-t)^{\alpha-1} dt$.

Используя обозначения



$$w(x) = D_{0+}^{\alpha} u, \quad R(x, \mu) = e^{P(x)} \left(\mu + \int_0^x \frac{f(t)}{a(t)} e^{-P(t)} dt \right), \quad l_0(x, t) = e^{P(x)} I_{x-}^{\alpha} \left(\frac{c(t)}{a(t)} e^{-P(t)} \right)$$

и равенство (12), интегральное уравнение (11) запишем в виде

$$w(x) = R(x, \mu) + \int_0^x l_0(x, t) w(t) dt. \quad (13)$$

В замечании 1.1 работы [1] установлено, что если $b(x) > 0$, то $\lim_{x \rightarrow +0} e^{P(x)} = +\infty$, поэтому, если мы хотим найти непрерывное на $[0, d]$ решение уравнения (13), то необходимо положить $\mu = 0$.

Далее функция $R(x, 0)$, как доказано в лемме 2.1 работы [2], непрерывна. Потребуем, наконец, чтобы выполнялось следующее условие.

Условие 4. Функция $l_0(x, t)$ ограничена.

Отметим, что, используя лемму 2.1 [2], легко установить, что условие 3 является также достаточным условием ограниченности и функции $l_0(x, t)$.

Решая интегральное уравнение (13) методом последовательных приближений, аналогично тому как это было сделано в п. 1, получим

$$w(x) = R(x, 0) + \int_0^x R(x, 0) W(x, t) dt, \quad (14)$$

где $W(x, t) = \sum_{i=0}^{\infty} l_i(x, t)$, и $l_i(x, t) = \int_t^x l_0(x, s) l_{i-1}(s, t) ds$ для $i \geq 1$.

При этом в силу леммы 2.1 работы [2] справедлива оценка

$$\|w(x)\| \leq c_1 \|R(x, 0)\| \leq c_2 \|f\|.$$

Теперь для нахождения решения $u(x)$ из равенства $w(x) = D_{0+}^{\alpha} u$ используем формулу:

$$I_{0+}^{\alpha} D_{0+}^{\alpha} u = u(x) - \frac{1}{\Gamma(\alpha)} I_{0+}^{1-\alpha} u(0) x^{\alpha-1}.$$

Теорема 2. Пусть выполнены условия 1, 4 и $b(0) > 0$. Тогда любое решение уравнения (2), имеющее непрерывную на $[0, d]$ производную $D_{0+}^{\alpha} u$, при некотором β представимо в виде

$$u(x) = I_{0+}^{\alpha} w(x) + \beta x^{\alpha-1}, \quad (15)$$

где $w(x)$ определяется формулой (14). При этом для него справедлива оценка

$$\|x^{1-\alpha} a(x) (D_{0+}^{\alpha} u)\| + \|D_{0+}^{\alpha} u\| + \|x^{1-\alpha} u\| \leq c_3 (\|f\| + |\beta|), \quad (16)$$

где $c_3 > 0$ – некоторая постоянная, зависящая от коэффициентов уравнения (2).

Укажем, что оценка (16) вытекает из представления (14) и ограниченности оператора дробного интегрирования [4, с. 58].

Для выделения единственного решения из множества, определяемого формулой (15), теперь следует задать только одно условие, например, вида

$$u(d) = u_d.$$

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 16-29-12911.

Список литературы References

1. Глушко В.П. 1968. Вырождающиеся линейные дифференциальные уравнения. I. Дифференциальные уравнения. Т. 4, № 9: 1584 – 1597.
Glushko V.P. 1968. Degenerate linear differential equations. I. Differential equations. 1968. Т. 4, № 9: 1584 – 1597.
2. Глушко В.П. 1968. Вырождающиеся линейные дифференциальные уравнения. II. Дифференциальные уравнения. Т. 4, № 11: 1956 – 1966.
Glushko V.P. 1968. Degenerate linear differential equations. II. Differential equations. 1968. Т. 4, № 11: 1956 – 1966.
3. Глушко В.П. 1969. Вырождающиеся линейные дифференциальные уравнения. III. Дифференциальные уравнения. Т. 5, № 3: 443 – 455.
Glushko V.P. 1969. Degenerate linear differential equations. III. Differential equations. Т. 5, № 3: 443 – 455.
4. Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И. 1987. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Минск, Наука и техника».



УДК 511.51

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБОГО РЯДА В ПРОБЛЕМЕ КЛООСТЕРМАНА

RESEARCH OF A SPECIAL ROW IN KLOOSTERMAN'S PROBLEM

Л.Н. Куртова, Н.Н. Мотькина
L.N. Kurtova, N.N. Mot'kina

Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г.Белгород, ул. Победы, 85

Belgorod National Research University, 85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia

E-mail: kurtova@bsu.edu.ru; motkina@bsu.edu.ru

Аннотация

В 1770 году Ж.-Л. Лагранж доказал, что каждое натуральное число представимо в виде суммы четырех квадратов целых чисел. В 1926 году Х. Д. Клоостерман получил асимптотическую формулу для числа представлений положительного целого в виде $ax^2 + by^2 + cz^2 + dt^2$. В работе приведены результаты изучения главного члена этой асимптотической формулы. Исследование основано на представлении главного члена в виде произведения по простым числам и применении точных формул для сумм Гаусса.

Abstract

In 1770, J.-L. Lagrange proved that each natural number can be represented as the sum of four squares of integers. In 1926, H. D. Kloosterman obtained an asymptotic formula for the number of representations of a positive integer in the form $ax^2 + by^2 + cz^2 + dt^2$. The report will provide the results of the study the main member of this asymptotic formula. The study is based on the representation of the main member as a product of primes and the use of the exact formulas for Gauss sums.

Ключевые слова: асимптотическая формула, представление главного члена, сумма Гаусса, суммы Клоостермана.

Keywords: asymptotic formula, representation of the main member, Gauss sum, Kloosterman sum.

Введение

В 1770 году Ж.-Л. Лагранж доказал, что каждое натуральное число n представимо в виде суммы четырех квадратов целых чисел. В 1926 году Х. Д. Клоостерман [1] получил асимптотическую формулу для числа решений $r(n)$ уравнения $n = ax^2 + by^2 + cz^2 + dt^2$:

$$r(n) = \frac{\pi^2 n}{\sqrt{abcd}} S(n) + O(n^{17/18+\varepsilon}),$$

где

$$S(n) = \sum_{q=1}^{\infty} A(q),$$

$$A(q) = \frac{1}{q^4} \sum_{\substack{l=1 \\ (l,q)=1}}^q e^{-2\pi i \frac{nl}{q}} S(q; al; 0) S(q; bl; 0) S(q; cl; 0) S(q; dl; 0), \quad A_1 = 1,$$

$$S(q; u; 0) = \sum_{l=1}^q e^{2\pi i \frac{ul^2}{q}}$$

– сумма Гаусса.

Данная работа посвящена исследованию особого ряда $S(n)$. Поскольку функция $A(q)$ является мультипликативной, тогда

$$S(n) = \sum_{q=1}^{\infty} A(q) = \prod_{p|q} (1 + A(p) + A(p^2) + \dots).$$



Нами получены явные формулы для всех таких возможных произведений при нечетном простом p . Исследование основано на представлении главного члена в виде произведения по простым числам и применении точных формул для сумм Гаусса ([2] – [4]).

В данной работе представлены случаи, когда число решений уравнения $n = ax^2 + by^2 + cz^2 + dt^2$ равно нулю.

Вспомогательные леммы

Лемма 1. Для одномерной суммы Гаусса

$$S(q; l; m) = \sum_{j=1}^q e^{2\pi i \frac{lj^2 + mj}{q}}$$

справедливы следующие утверждения:

1. Если $(q_1; q_2) = 1$, то

$$S(q_1 q_2; l; m) = S(q_1; l q_2; m) S(q_2; l q_1; m).$$

2. Если $(q; 2l) = 1$, то

$$S(q; l; m) = e^{-2\pi i \frac{(4l)^* m^2}{q}} \left(\frac{l}{q} \right) S(q; 1; 0),$$

где $4l(4l)^* \equiv 1 \pmod{q}$, $\left(\frac{l}{q} \right)$ – символ Якоби.

3. Если $(q; 2) = 1$, то

$$S(q; 1; 0) = \begin{cases} \sqrt{q}, & \text{если } q \equiv 1 \pmod{4}, \\ i\sqrt{q}, & \text{если } q \equiv 3 \pmod{4}. \end{cases}$$

4. Если $(q; l) = n$, то

$$S(q; l; m) = \begin{cases} 0, & \text{если } n \text{ не делит } m, \\ n S(q/n; l/n; m/n), & \text{если } n \text{ делит } m. \end{cases}$$

Лемма 2. (Свойства суммы Клоостермана) Пусть

$$K(q; u; v) = \sum_{\substack{j=1 \\ (j, q)=1}}^q e^{2\pi i \frac{uj + vj^*}{q}}$$

— сумма Клоостермана. Справедливы следующие утверждения:

1. $K(q; -u; -v) = K(q; u; v)$.

2. Если $(w; q) = 1$, то $K(q; uw; v) = K(q; u; vw)$.

3. При $(q_1; q_2) = 1$ имеет место равенство

$$K(q_1 q_2; u; v) = K(q_1; u; v_1) S(q_2; u; v_2),$$

где v_1 и v_2 определены соответственно по модулям q_1 и q_2 сравнением

$$v_1 q_2^2 + v_2 q_1^2 \equiv v \pmod{q_1 q_2}.$$

4. Пусть $\alpha > 1$, p – простое число.



Если $u \equiv v \equiv 0 \pmod{p}$, то

$$K(p^\alpha; u; v) = pK(p^{\alpha-1}; \frac{u}{p}; \frac{v}{p}).$$

Если $u \not\equiv 0 \pmod{p}$, $v \equiv 0 \pmod{p}$ или $u \equiv 0 \pmod{p}$, $v \not\equiv 0 \pmod{p}$, то

$$K(p^\alpha; u; v) = 0.$$

5. Пусть $(u; p) = 1$, $\alpha > 1$, p – простое число. Тогда

$$K(p; u; 0) = -1; K(p^\alpha; u; 0) = 0.$$

6. Пусть $u = p^\alpha u_1$, $(u_1; p) = 1$, $\alpha > 1$, $s > 1$, p – простое число. Тогда

$$K(p^\alpha; u; 0) = p^{\alpha-1}(p-1); K(p^{\alpha+1}; u; 0) = -p^\alpha; K(p^{\alpha+s}; u; 0) = 0.$$

Лемма 3. (Равенства для обобщенной суммы Клоостермана) Пусть p – нечетное простое число и

$$K_p(p^\alpha; u; v) = \sum_{\substack{j=1 \\ (j, p^\alpha)=1}}^{p^\alpha} \left(\frac{j}{p} \right) e^{2\pi i \frac{uj+vj^*}{p^\alpha}}$$

— обобщенная сумма Клоостермана. Справедливы следующие утверждения:

1. Пусть $\alpha > 1$. Если $u \equiv v \equiv 0 \pmod{p}$, то

$$K_p(p^\alpha; u; v) = pK_p(p^{\alpha-1}; \frac{u}{p}; \frac{v}{p}).$$

Если $u \not\equiv 0 \pmod{p}$, $v \equiv 0 \pmod{p}$ или $u \equiv 0 \pmod{p}$, $v \not\equiv 0 \pmod{p}$, то

$$K_p(p^\alpha; u; v) = 0.$$

2. Пусть $(u; p) = 1$, $\alpha > 1$. Тогда

$$K_p(p; u; 0) = S(p; u; 0); K_p(p^\alpha; u; 0) = 0.$$

3. Пусть $u = p^\alpha u_1$, $(u_1; p) = 1$, $\alpha > 1$, $s > 1$. Тогда

$$K_p(p^\alpha; u; 0) = 0; K_p(p^{\alpha+1}; u; 0) = p^\alpha S(p; u_1; 0); K(p^{\alpha+s}; u; 0) = 0.$$

Исследование особого ряда в проблеме Клоостермана

Рассмотрим случаи, когда число решений уравнения $n = ax^2 + by^2 + cz^2 + dt^2$ равно нулю. Мы рассматриваем нечетное простое p .

1. Случай, когда три коэффициента делятся на p и n взаимно просто p

Пусть

$$a = p^\alpha a_1, (a_1; p) = 1, b = p^\beta b_1, (b_1; p) = 1, c = p^\gamma c_1, (c_1; p) = 1, \\ \alpha \geq 1, \beta \geq 1, \gamma \geq 1.$$

Тогда

$$A(p) = \frac{1}{p^4} p^3 \left(\frac{d}{p} \right) S(p; 1; 0) \sum_{\substack{l=1 \\ (l, p)=1}}^p \left(\frac{l}{p} \right) e^{-2\pi i \frac{nl}{p}} = \left(\frac{dn}{p} \right).$$

При $k \geq 1$, поскольку $(n; p) = 1$, из утверждения 5 леммы 2, утверждения 2 леммы 3 получаем, что $A(p^k) = 0$.



Имеем следующий множитель:

$$\prod_{\substack{p \\ a=p^\alpha a_1, \alpha \geq 1 \\ (a_1, p)=1 \\ b=p^\beta b_1, \beta \geq 1 \\ (b_1, p)=1 \\ c=p^\gamma c_1, \gamma \geq 1 \\ (c_1, p)=1 \\ (d, p)=1 \\ (n, p)=1}} \left(1 + \left(\frac{dn}{p} \right) \right).$$

Данная скобка может равняться нулю, если dn – квадратичный невычет по модулю p .

2. Случай, когда все коэффициенты делятся на p и n взаимно просто p

В этом случае уравнение $n = ax^2 + by^2 + cz^2 + dt^2$ не имеет решений.

3. Случай, когда два коэффициента и n делятся на p

Положим

$$a = p^\alpha a_1, (a_1; p) = 1, \quad b = p^\beta b_1, (b_1; p) = 1, \quad n = p^\eta n_1, (n_1; p) = 1, \\ \alpha \geq 1, \beta \geq 1, \eta \geq 1.$$

1. Пусть $\eta < \alpha \leq \beta$. Тогда при $1 \leq k \leq \eta + 1$

$$A(p^k) = \frac{1}{p^{4k}} p^{2k} \left(\frac{cd}{p^k} \right) S^2(p^k, 1; 0) \sum_{\substack{l=1 \\ (l, p^k)=1}}^{p^k} e^{-2\pi i \frac{nl}{p^k}}.$$

Имеем

$$A(p^k) = \begin{cases} \left(\frac{-cd}{p^k} \right) \frac{p-1}{p}, & \text{если } 1 \leq k \leq \eta, \\ -\left(\frac{-cd}{p^{\eta+1}} \right) \frac{1}{p}, & \text{если } k = \eta + 1. \end{cases}$$

При $k > \eta + 1$ в $A(p^k)$ будет входить либо сумма Клоостермана, либо обобщенная сумма Клоостермана, которые будут равны нулю в силу утверждения 6 из леммы 2 и утверждения 3 из леммы 3.

Получаем произведение:

$$\prod_{\substack{p \\ a=p^\alpha a_1, \alpha \geq 1 \\ (a_1, p)=1 \\ b=p^\beta b_1, \beta \geq 1 \\ (b_1, p)=1 \\ (c, p)=1 \\ (d, p)=1 \\ n=p^\eta n_1, \eta \geq 1 \\ (n_1, p)=1 \\ 1 \leq \eta < \alpha \leq \beta}} \left(1 + \frac{p-1}{p} \left(\left(\frac{-cd}{p} \right) + \dots + \left(\frac{-cd}{p^\eta} \right) \right) - \left(\frac{-cd}{p^{\eta+1}} \right) \frac{1}{p} \right).$$

Если $(-cd)$ является квадратичным невычетом по модулю p , то для нечетного η рассматриваемая скобка будет равна нулю.

2. Пусть $\eta = \alpha < \beta$. Тогда при $1 \leq k \leq \eta$

$$A(p^k) = \left(\frac{-cd}{p^k} \right) \frac{p-1}{p}.$$

При $k = \eta + 1$ имеем:



$$A(p^{\eta+1}) = \frac{1}{p^{4(\eta+1)}} p^{2\eta+1} \left(\frac{a_1}{p} \right) \left(\frac{cd}{p^{\eta+1}} \right) S(p; 1; 0) S^2(p^{\eta+1}; 1; 0) \sum_{\substack{l=1 \\ (l, p^{\eta+1})=1}}^{p^{\eta+1}} \left(\frac{l}{p} \right) e^{-2\pi i \frac{nl}{p^{\eta+1}}} =$$

$$= \left(\frac{a_1 n_1}{p} \right) \left(\frac{-cd}{p^{\eta+1}} \right) \frac{1}{p}.$$

При $k > \eta + 1$ суммы Клоостермана будут равны нулю в силу утверждения 6 из леммы 2 и утверждения 3 из леммы 3.

Получаем следующий множитель:

$$\prod_{\substack{p \\ a=p^\alpha a_1, \alpha \geq 1 \\ (a_1, p)=1 \\ b=p^\beta b_1, \beta \geq 1 \\ (b_1, p)=1 \\ (c, p)=1 \\ (d, p)=1 \\ n=p^\eta n_1, \eta \geq 1 \\ (n_1, p)=1 \\ 1 \leq \eta < \alpha < \beta}} \left(1 + \frac{p-1}{p} \left(\left(\frac{-cd}{p} \right) + \dots + \left(\frac{-cd}{p^\eta} \right) \right) + \left(\frac{a_1 n_1}{p} \right) \left(\frac{-cd}{p^{\eta+1}} \right) \frac{1}{p} \right).$$

Данная скобка равна нулю, если η – нечетное, $a_1 n_1$ и $(-cd)$ – квадратичные невычеты по модулю p .

3. Пусть $\alpha < \eta < \beta$. Имеем

$$A(p^k) = \begin{cases} \left(\frac{-cd}{p^k} \right) \frac{p-1}{p}, & \text{если } 1 \leq k \leq \alpha, \\ \left(\frac{-cd}{p^k} \right) \frac{p-1}{p^{(k-\alpha)/2+1}}, & \text{если } \alpha < k \leq \eta \text{ и } k-\alpha \text{ - четное,} \\ 0, & \text{если } \alpha < k \leq \eta \text{ и } k-\alpha \text{ - нечетное.} \end{cases}$$

$$A(p^{\eta+1}) = \frac{1}{p^{4(\eta+1)}} p^{\alpha+\eta+1} \left(\frac{a_1}{p^{\eta+1-\alpha}} \right) \left(\frac{cd}{p^{\eta+1}} \right) S(p^{\eta+1-\alpha}; 1; 0) S^2(p^{\eta+1}; 1; 0) \sum_{\substack{l=1 \\ (l, p^{\eta+1})=1}}^{p^{\eta+1}} \left(\frac{l}{p^{\eta+1-\alpha}} \right) e^{-2\pi i \frac{nl}{p^{\eta+1}}} =$$

$$= \begin{cases} - \left(\frac{-cd}{p^{\eta+1}} \right) \frac{1}{p^{(\eta+3-\alpha)/2}}, & \text{если } \eta - \alpha \text{ - нечетное,} \\ \left(\frac{a_1 n_1}{p} \right) \left(\frac{-cd}{p^{\eta+1}} \right) \frac{1}{p^{(\eta+2-\alpha)/2}}, & \text{если } \eta - \alpha \text{ - четное.} \end{cases}.$$

Пусть $k > \eta + 1$. Тогда суммы Клоостермана будут равны нулю в силу утверждения 6 из леммы 2 и утверждения 3 из леммы 3.

Если α и η – нечетные, получаем следующий множитель:

$$\prod_{\substack{a=p^\alpha a_1, \alpha \geq 1 \\ (a_1, p)=1 \\ b=p^\beta b_1, \beta \geq 1 \\ (b_1, p)=1 \\ (c, p)=1 \\ (d, p)=1 \\ n=p^\eta n_1, \eta \geq 1 \\ (n_1, p)=1 \\ 1 \leq \alpha < \eta < \beta}} \left(1 + \frac{p-1}{p} \left(\left(\frac{-cd}{p} \right) + \left(\frac{-cd}{p^2} \right) + \dots + \left(\frac{-cd}{p^\alpha} \right) \right) + \right. \\ \left. + \frac{p-1}{p} \left(\left(\frac{-cd}{p^{\alpha+2}} \right) \frac{1}{p} + \left(\frac{-cd}{p^{\alpha+4}} \right) \frac{1}{p^2} + \dots + \left(\frac{-cd}{p^\eta} \right) \frac{1}{p^{(\eta-\alpha)/2}} \right) + \left(\frac{a_1 n_1}{p} \right) \left(\frac{-cd}{p^{\eta+1}} \right) \frac{1}{p^{(\eta-\alpha+2)/2}} \right).$$

Данная скобка равна нулю, если $a_1 n_1$ и $(-cd)$ – квадратичные невычеты по модулю p .

4. Случай, когда три коэффициента и n делятся на p

Пусть

$$a = p^\alpha a_1, (a_1; p) = 1, b = p^\beta b_1, (b_1; p) = 1, c = p^\gamma c_1, (c_1; p) = 1, n = p^\eta n_1, (n_1; p) = 1,$$

$$\alpha \geq 1, \beta \geq 1, \gamma \geq 1, \eta \geq 1.$$

1. Рассмотрим случай, когда $\eta < \alpha \leq \beta \leq \gamma$. Получим

$$A(p^k) = \frac{1}{p^{4k}} p^{3k} \left(\frac{d}{p^k} \right) S(p^k; 1; 0) \sum_{\substack{l=1 \\ (l, p^k)=1}}^{p^k} \left(\frac{l}{p^k} \right) e^{-2\pi i \frac{nl}{p^k}} = \\ = \begin{cases} p^{k/2-1}(p-1), & \text{если } 1 \leq k \leq \eta \text{ и } k - \text{четное,} \\ 0, & \text{если } 1 \leq k \leq \eta \text{ и } k - \text{нечетное,} \\ -p^{(\eta-1)/2}, & \text{если } k = \eta + 1 \text{ и } \eta - \text{нечетное,} \\ \left(\frac{dn_1}{p} \right) p^{\eta/2}, & \text{если } k = \eta + 1 \text{ и } \eta - \text{четное,} \\ 0, & \text{если } k > \eta + 1. \end{cases}$$

Пусть η – четное. Получаем следующий множитель:

$$\prod_{\substack{a=p^\alpha a_1, \alpha \geq 1 \\ (a_1, p)=1 \\ b=p^\beta b_1, \beta \geq 1 \\ (b_1, p)=1 \\ c=p^\gamma c_1, \gamma \geq 1 \\ (c_1, p)=1 \\ (d, p)=1 \\ n=p^\eta n_1, \eta \geq 1 \\ (n_1, p)=1 \\ 1 \leq \eta < \alpha \leq \beta \leq \gamma}} p^{\eta/2} \left(1 + \left(\frac{dn_1}{p} \right) \right).$$

Данная скобка равна нулю, если dn_1 является квадратичным невычетом по модулю p .

Пусть η – нечетное. Получаем следующий множитель:



$$\prod_{\substack{p \\ a=p^\alpha a_1, \alpha \geq 1 \\ (a_1, p)=1 \\ b=p^\beta b_1, \beta \geq 1 \\ (b_1, p)=1 \\ c=p^\gamma c_1, \gamma \geq 1 \\ (c_1, p)=1 \\ (d, p)=1 \\ n=p^\eta n_1, \eta \geq 1 \\ (n_1, p)=1 \\ 1 \leq \eta < \alpha \leq \beta \leq \gamma}} \left(1 + (p-1)(1+p+p^2+\dots+p^{(\eta-1)/2-1}) - p^{(\eta-1)/2} \right) = 0.$$

2. Рассмотрим случай, когда $\eta = \alpha < \beta \leq \gamma$. Если $1 \leq k \leq \eta$, то $A(p^k) = 0$ для нечетного k , и $A(p^k) = p^{k/2-1}(p-1)$ для четного k .

$$A(p^{\eta+1}) = \begin{cases} \left(\frac{a_1 n_1}{p} \right) p^{(\eta-1)/2}, & \text{если } \eta - \text{нечетное,} \\ - \left(\frac{a_1 d}{p} \right) p^{\eta/2-1}, & \text{если } \eta - \text{четное.} \end{cases}$$

При $k > \eta + 1$ имеем $A(p^k) = 0$.

Если η – нечетное, получаем следующий множитель:

$$\prod_{\substack{p \\ a=p^\alpha a_1, \alpha \geq 1 \\ (a_1, p)=1 \\ b=p^\beta b_1, \beta \geq 1 \\ (b_1, p)=1 \\ c=p^\gamma c_1, \gamma \geq 1 \\ (c_1, p)=1 \\ (d, p)=1 \\ n=p^\eta n_1, \eta \geq 1 \\ (n_1, p)=1 \\ 1 \leq \eta = \alpha \leq \beta \leq \gamma}} \left(\left(1 + \left(\frac{a_1 n_1}{p} \right) \right) p^{(\eta-1)/2} \right).$$

Данная скобка равна нулю, если $a_1 n_1$ является квадратичным невычетом по модулю p .

3. Рассмотрим случай, когда $\alpha < \eta < \beta \leq \gamma$. Если $1 \leq k \leq \alpha$, то $A(p^k) = 0$ для нечетного k , и $A(p^k) = p^{k/2-1}(p-1)$ для четного k . Если $\alpha < k \leq \eta$, то $A(p^k) = 0$ для нечетного α , и для четного α имеем:

$$A(p^k) = p^{\alpha/2-1}(p-1) \left(\frac{-a_1 d}{p^k} \right).$$

Получим

$$A(p^{\eta+1}) = \begin{cases} \left(\frac{a_1}{p^\eta} \right) \left(\frac{d}{p^{\eta+1}} \right) \left(\frac{n_1}{p} \right) p^{(\alpha-1)/2}, & \text{если } \alpha - \text{нечетное,} \\ - \left(\frac{-a_1 d}{p^{\eta+1}} \right) p^{\alpha/2-1}, & \text{если } \alpha - \text{четное.} \end{cases}$$

При $k > \eta + 1$ $A(p^k) = 0$.

Если α – четное, получаем множитель:



$$\prod_p \left(p^{\alpha/2-1} \left(p + (p-1) \left(\left(\frac{-a_1 d}{p^{\alpha+1}} \right) + \left(\frac{-a_1 d}{p^{\alpha+2}} \right) + \dots + \left(\frac{-a_1 d}{p^{\eta}} \right) \right) - \left(\frac{-a_1 d}{p^{\eta+1}} \right) \right) \right).$$

$a = p^{\alpha} a_1, \alpha \geq 1$
 $(a_1, p) = 1$
 $b = p^{\beta} b_1, \beta \geq 1$
 $(b_1, p) = 1$
 $c = p^{\gamma} c_1, \gamma \geq 1$
 $(c_1, p) = 1$
 $(d, p) = 1$
 $n = p^{\eta} n_1, \eta \geq 1$
 $(n_1, p) = 1$
 $1 \leq \alpha < \eta < \beta \leq \gamma$

Если $a_1 d$ является квадратичным невычетом по модулю p и η – нечетное, то рассматриваемая скобка равна нулю.

Если α – нечетное, получаем множитель:

$$\prod_p \left(p^{(\alpha-1)/2} \left(1 + \left(\frac{a_1}{p^{\eta}} \right) \left(\frac{d}{p^{\eta+1}} \right) \left(\frac{n_1}{p} \right) \right) \right).$$

$a = p^{\alpha} a_1, \alpha \geq 1$
 $(a_1, p) = 1$
 $b = p^{\beta} b_1, \beta \geq 1$
 $(b_1, p) = 1$
 $c = p^{\gamma} c_1, \gamma \geq 1$
 $(c_1, p) = 1$
 $(d, p) = 1$
 $n = p^{\eta} n_1, \eta \geq 1$
 $(n_1, p) = 1$
 $1 \leq \alpha < \eta < \beta \leq \gamma$

Данная скобка равна нулю, если

$$\left(\frac{a_1}{p^{\eta}} \right) \left(\frac{d}{p^{\eta+1}} \right) \left(\frac{n_1}{p} \right) = -1.$$

4. Рассмотрим случай, когда $\alpha < \eta = \beta < \gamma$. Если $1 \leq k \leq \alpha$, то $A(p^k) = 0$ для нечетного k , и $A(p^k) = p^{k/2-1}(p-1)$ для четного k . Если $\alpha < k \leq \eta$, то $A(p^k) = 0$ для нечетного α , и для четного α имеем:

$$A(p^k) = p^{\alpha/2-1}(p-1) \left(\frac{-a_1 d}{p^k} \right).$$

$$A(p^{\eta+1}) = \begin{cases} - \left(\frac{a_1}{p^{\eta}} \right) \left(\frac{-b_1}{p} \right) \left(\frac{d}{p^{\eta+1}} \right) p^{(\alpha-3)/2}, & \text{если } \alpha - \text{нечетное,} \\ \left(\frac{-a_1 d}{p^{\eta+1}} \right) \left(\frac{b_1 n_1}{p} \right) p^{\alpha/2-1}, & \text{если } \alpha - \text{четное.} \end{cases}$$

При $k > \eta + 1$ $A(p^k) = 0$.

Если α – четное, получаем множитель:

$$\prod_p \left(p^{\alpha/2-1} \left(p + (p-1) \left(\left(\frac{-a_1 d}{p^{\alpha+1}} \right) + \left(\frac{-a_1 d}{p^{\alpha+2}} \right) + \dots + \left(\frac{-a_1 d}{p^{\eta}} \right) \right) + \left(\frac{-a_1 d}{p^{\eta+1}} \right) \left(\frac{b_1 n_1}{p} \right) \right) \right).$$

$a = p^{\alpha} a_1, \alpha \geq 1$
 $(a_1, p) = 1$
 $b = p^{\beta} b_1, \beta \geq 1$
 $(b_1, p) = 1$
 $c = p^{\gamma} c_1, \gamma \geq 1$
 $(c_1, p) = 1$
 $(d, p) = 1$
 $n = p^{\eta} n_1, \eta \geq 1$
 $(n_1, p) = 1$
 $1 \leq \alpha < \eta = \beta < \gamma$



Данная скобка равна нулю, если η – нечетное, $(-a_1d)$ – квадратичный невычет и b_1n_1 – квадратичный вычет по модулю p .

5. Рассмотрим случай, когда $\alpha \leq \beta < \eta < \gamma$. Если $1 \leq k \leq \alpha$, то $A(p^k) = 0$ для нечетного k , и $A(p^k) = p^{k/2-1}(p-1)$ для четного k . Если $\alpha < k \leq \beta$, то $A(p^k) = 0$ для нечетного α , и для четного α :

$$A(p^k) = p^{\alpha/2-1}(p-1) \left(\frac{-a_1d}{p^k} \right).$$

Если $\beta < k \leq \eta$, то

$$A(p^k) = \begin{cases} \left(\frac{-a_1b_1}{p} \right) \frac{p-1}{p^{(k-\alpha-\beta)/2+1}}, & \text{если } k - \text{четное, } \alpha \text{ и } \beta - \text{нечетные,} \\ \left(\frac{-b_1d}{p} \right) \frac{p-1}{p^{(k-\alpha-\beta)/2+1}}, & \text{если } k \text{ и } \alpha - \text{нечетные, } \beta - \text{четное,} \\ \left(\frac{-a_1d}{p} \right) \frac{p-1}{p^{(k-\alpha-\beta)/2+1}}, & \text{если } k \text{ и } \beta - \text{нечетные, } \alpha - \text{четное,} \\ \frac{p-1}{p^{(k-\alpha-\beta)/2+1}}, & \text{если } k, \alpha \text{ и } \beta - \text{четные,} \\ 0, & \text{если } 3k - \alpha - \beta - \text{нечетное.} \end{cases}$$

$$A(p^{\eta+1}) = \begin{cases} - \left(\frac{-a_1b_1}{p} \right) \frac{1}{p^{(\eta-\alpha-\beta+3)/2}}, & \text{если } \eta, \alpha \text{ и } \beta - \text{нечетные,} \\ - \left(\frac{-a_1d}{p} \right) \frac{1}{p^{(\eta-\alpha-\beta+3)/2}}, & \text{если } \eta \text{ и } \alpha - \text{четные, } \beta - \text{нечетное,} \\ - \left(\frac{-b_1d}{p} \right) \frac{1}{p^{(\eta-\alpha-\beta+3)/2}}, & \text{если } \eta \text{ и } \beta - \text{четные, } \alpha - \text{нечетное,} \\ - \frac{1}{p^{(\eta-\alpha-\beta+3)/2}}, & \text{если } \alpha \text{ и } \beta - \text{четные, } \eta - \text{нечетное,} \\ \left(\frac{-a_1b_1dn_1}{p} \right) \frac{1}{p^{(\eta-\alpha-\beta+2)/2}}, & \text{если } \eta, \alpha \text{ и } \beta - \text{четные,} \\ \left(\frac{dn_1}{p} \right) \frac{1}{p^{(\eta-\alpha-\beta+2)/2}}, & \text{если } \alpha \text{ и } \beta - \text{нечетные, } \eta - \text{четное,} \\ \left(\frac{a_1n_1}{p} \right) \frac{1}{p^{(\eta-\alpha-\beta+2)/2}}, & \text{если } \eta \text{ и } \alpha - \text{нечетные, } \beta - \text{четное,} \\ \left(\frac{b_1n_1}{p} \right) \frac{1}{p^{(\eta-\alpha-\beta+2)/2}}, & \text{если } \eta \text{ и } \beta - \text{нечетные, } \alpha - \text{четное} \end{cases}$$

Пусть $k > \eta+1$. Тогда суммы Клоостермана будут равны нулю в силу утверждения 6 из леммы 2 и 3 из леммы 3.

Если η – четное, α и β – нечетные, получим:

$$\prod_{\substack{p \\ a=p^\alpha a_1, \alpha \geq 1 \\ (a_1, p)=1 \\ b=p^\beta b_1, \beta \geq 1 \\ (b_1, p)=1 \\ c=p^\gamma c_1, \gamma \geq 1 \\ (c_1, p)=1 \\ (d, p)=1 \\ n=p^\eta n_1, \eta \geq 1 \\ (n_1, p)=1 \\ 1 \leq \alpha \leq \beta < \eta < \gamma}} \left(p^{(\alpha-1)/2} \left(1 + \left(\frac{-a_1 b_1}{p} \right) \right) - \frac{1}{p^{(\eta-\alpha-\beta+2)/2}} \left(\left(\frac{-a_1 b_1}{p} \right) - \left(\frac{-d n_1}{p} \right) \right) \right).$$

Данная скобка равна нулю, если $(-a_1 b_1)$ и $d n_1$ – квадратичные невычеты по модулю p .
Если α – четное, η и β – нечетные, получим:

$$\prod_{\substack{p \\ a=p^\alpha a_1, \alpha \geq 1 \\ (a_1, p)=1 \\ b=p^\beta b_1, \beta \geq 1 \\ (b_1, p)=1 \\ c=p^\gamma c_1, \gamma \geq 1 \\ (c_1, p)=1 \\ (d, p)=1 \\ n=p^\eta n_1, \eta \geq 1 \\ (n_1, p)=1 \\ 1 \leq \alpha \leq \beta < \eta < \gamma}} \left(p^{\alpha/2-1} \left(p + (p-1) \left(\left(\frac{-a_1 d}{p^{\alpha+1}} \right) + \dots + \left(\frac{-a_1 d}{p^\beta} \right) \right) + \left(\frac{-a_1 d}{p} \right) \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{p^{(\eta-\alpha-\beta+2)/2}} \left(\left(\frac{b_1 n_1}{p} \right) - \left(\frac{-a_1 d}{p} \right) \right) \right).$$

Данная скобка равна нулю, если $(-a_1 d)$ и $b_1 n_1$ – квадратичные невычеты по модулю p .
Если β – четное, η и α – нечетные, получим

$$\prod_{\substack{p \\ a=p^\alpha a_1, \alpha \geq 1 \\ (a_1, p)=1 \\ b=p^\beta b_1, \beta \geq 1 \\ (b_1, p)=1 \\ c=p^\gamma c_1, \gamma \geq 1 \\ (c_1, p)=1 \\ (d, p)=1 \\ n=p^\eta n_1, \eta \geq 1 \\ (n_1, p)=1 \\ 1 \leq \alpha \leq \beta < \eta < \gamma}} \left(p^{(\alpha-1)/2} \left(1 + \left(\frac{-b_1 d}{p} \right) \right) + \frac{1}{p^{(\eta-\alpha-\beta+2)/2}} \left(\left(\frac{a_1 n_1}{p} \right) - \left(\frac{-b_1 d}{p} \right) \right) \right).$$

Данная скобка равна нулю, если $(-b_1 d)$ и $a_1 n_1$ – квадратичные невычеты по модулю p .

Заключение

В работе [1] Х.Д. Клоостерман рассмотрел обобщение задачи Лагранжа. Он получил асимптотическую формулу для количества представлений числа n диагональной формой с четырьмя целыми переменными. Клоостерман привел примеры случаев, когда число представлений равно нулю. В работе [1] случаи для простого p , равного двум, рассмотрены более подробно, чем для нечетного простого p . Представление главного члена в виде произведения по простым числам и применение точных формул для сумм Гаусса позволило нам дополнить случаи [1] для нечетного простого p , при которых уравнение $n = ax^2 + by^2 + cz^2 + dt^2$ не имеет решений.

Список литературы References

1. Kloosterman H. D. 1926. On the representation of number in the form $ax^2 + by^2 + cz^2 + dt^2$. Acta mathematica. V. 49: 407–464.
2. Малышев А. В. 1962. О представлении целых чисел положительными квадратичными формами. Тр. МИАН СССР. 65: 3–212.
3. Malyshev A. V. 1962. On the representation of integers by positive quadratic forms. Trudy Mat. Inst. Steklov, 65. Moscow: Acad. Sci. USSR: 3–212.
4. Estermann T. A. 1962. New application of the Hardy–Littlewood–Kloosterman method. Proc. London Math. Soc. 12: 425–444.
4. Hua L.K. 1982. Introduction to number theory. Springer.



УДК 519.7

ОБ ОПТИМАЛЬНЫХ КОДАХ АУТЕНТИФИКАЦИИ НА ОСНОВЕ КОНЕЧНЫХ ПОЛЕЙ

ON AUTHENTICATION CODES BASED ON FINITE FIELDS

¹С.М. Рацеев, ²О.И. Череватенко
S.M. Ratseev, O.I. Cherevatenko

¹Ульяновский государственный университет, 432017, г. Ульяновск, ул. Льва Толстого, 42.
Ulyanovsk State University, 432017, Ulyanovsk, Lev Tolstoy 42

E-mail: ratseevsm@mail.ru

²Ульяновский государственный педагогический университет имени И.Н.Ульянова, 432063, г. Ульяновск,
пл. 100-летия со дня рождения В.И. Ленина, 4.
Ulyanovsk State I.N.Ulyanov Pedagogical University, Ploshchad' 100-letiya so dnya rozhdeniya V.I. Lenina, 4

E-mail: chai@pisem.net

Аннотация

В работе исследуются коды аутентификации, стойкие к имитации и подмене сообщений. Особо выделен случай, когда вероятности имитации и подмены достигают нижних границ. Такие коды аутентификации называются оптимальными. Приводятся конструкции оптимальных кодов аутентификации на основе ортогональных таблиц.

Abstract

In the work authentication codes resistant to imitation and substitution messages are investigated. The case when the probability of imitation and substitution reach the lower limits has been highlighted. Such authentication codes are called optimal. We study constructions of optimal authentication codes based on orthogonal tables.

Ключевые слова: код аутентификации, имитация сообщения, хеш-функция.

Keywords: authentication code, hash function.

Пусть $h: K \times X \rightarrow Y$ — ключевая криптографическая хеш-функция, где X — конечное множество сообщений, K — конечное множество ключей, Y — множество значений кода аутентичности. Напомним, что кодом аутентификации (без сокрытия) называется четверка (X, K, Y, h) , для которой выполнено равенство $Y = \bigcup_{k \in K} h_k(X)$.

Заметим, что потенциальный противник может осуществлять не только пассивные действия относительно передаваемых по каналу связи сообщений, которые заключаются, например в подслушивании или перехвате сообщений, но также и активные атаки, заключающиеся в *имитации* или *подмене* сообщения.

Пусть канал связи готов к работе и на приеме установлены действующие ключи $k \in K$, но в данный момент времени никакого сообщения вида (x, y) , где $y = h_k(x)$, не передается. Тогда в этом случае противником может быть предпринята попытка имитации сообщения парой $(x', y') \in X \times Y$.

Рассмотрим вероятностное пространство $(\Omega = K, F_K, P_K)$. Зафиксируем $(x, y) \in X \times Y$. Обозначим через $K(x, y)$ следующее множество: $K(x, y) = \{k \in K \mid h_k(x) = y\}$. Под обозначением $K(x, y)$ будем также понимать событие из алгебры событий F_K , заключающееся в том, что при случайном выборе ключа $k \in K$ будет выполнено равенство $h_k(x) = y$. Тогда событию $K(x, y)$ будут благоприятствовать все элементы из множества $K(x, y)$, и только они. Поэтому

$$P(K(x, y)) = \sum_{k \in K(x, y)} P_K(k).$$

Поскольку противник имеет возможность выбора $(x, y) \in X \times Y$, его шансы на успех имитации сообщения выражаются такой величиной:

$$P_{im} = \max_{(x, y) \in X \times Y} P(K(x, y)).$$

Если же в данный момент передается некоторое сообщение $(x, y) \in X \times Y, y = h_k(x)$, то противник может заменить его на $(x', y') \in X \times Y, x' \neq x$. При этом он будет рассчитывать на то, что



на действующем ключе k при проверке будет выполнено равенство $y' = h_k(x')$. Чем больше вероятность этого события, тем успешнее будет попытка подмены. Пусть " $K(x', y') | K(x, y)$ " — событие, заключающееся в попытке подмены сообщения (x, y) сообщением (x', y') . Применяя теорему о произведении вероятностей, получаем

$$P(K(x', y') | K(x, y)) = \frac{P(K(x, y) \cap K(x', y'))}{P(K(x, y))}.$$

Тогда вероятность успеха подмены сообщения будет вычисляться по следующей формуле:

$$P_{podm} = \max_{x, x' \in X, x \neq x', y, y' \in Y} P(K(x', y') | K(x, y)).$$

Теорема 1 [1]. Для любого кода аутентификации (X, K, Y, h) , $|Y| = s$, справедливы следующие утверждения:

(i) $P_{im} \geq 1/s$, причем нижняя граница достигается тогда и только тогда, когда для всех $(x, y) \in X \times Y$ выполнено равенство $P(K(x, y)) = 1/s$.

(ii) $P_{podm} \geq 1/s$, причем нижняя граница достигается тогда и только тогда, когда для любых $x, x' \in X$, $x \neq x'$, $y, y' \in Y$, выполнено равенство $P(K(x', y') | K(x, y)) = 1/s$.

(iii) P_{im} и P_{podm} одновременно достигают нижней границы тогда и только тогда, когда для любых $x, x' \in X$, $x \neq x'$, $y, y' \in Y$ выполнено равенство $P(K(x, y) \cap K(x', y')) = 1/s^2$.

Напомним, что ортогональной таблицей $OA(s, n, \lambda)$ над множеством $Y = \{y_1, \dots, y_s\}$ называется матрица порядка $\lambda s^2 \times n$ над множеством Y с тем условием, что для любых двух столбцов данной матрицы каждая из пар $(y_i, y_j) \in Y \times Y$ встречается ровно в λ строках.

Большой интерес представляют коды аутентификации со свойством $P_{im} = P_{podm} = 1/|Y|$. Такие коды аутентификации называются оптимальными. Для описания оптимальных кодов аутентификации используется понятие ортогональной таблицы [2].

Теорема 2 [1]. Пусть код аутентификации (X, K, Y, h) является оптимальным, $|X| = n$, $|Y| = s$. Тогда верны следующие утверждения:

(i) $|K| \geq n(s-1)+1$;

(ii) $|K| = n(s-1)+1$ тогда и только тогда, когда табличное задание хеш-функции h представляет собой ортогональную таблицу $OA(s, n, \lambda)$ при $\lambda = \frac{n(s-1)+1}{s^2}$ и распределение вероятностей P_K является равномерным.

Следствие 1. Пусть для некоторого кода аутентификации (X, K, Y, h) , $|X| = n$, $|Y| = s$, выполнено равенство $|K| = n(s-1)+1$. Код аутентификации (X, K, Y, h) является оптимальным тогда и только тогда, когда выполнены следующие условия:

(i) табличное задание хеш-функции h представляет собой ортогональную таблицу $OA\left(s, n, \frac{n(s-1)+1}{s^2}\right)$;

(ii) распределение вероятностей на множестве K равномерно.

Обобщим алгоритм создания ортогональной таблицы из работы [1].

Пусть $F = GF(q)$ — конечное поле из q элементов, $q = p^n$ — степень простого числа p , F^d — векторное пространство размерности d , $d \geq 2$, над полем F . Пусть M — подмножество в F^d , состоящее из попарно линейно независимых векторов над F . Например, множество M можно построить следующим образом.

Рассмотрим следующие подмножества в F^d :

$$M_i = \{(0, \dots, 0, 1, x_{i+1}, \dots, x_d) | x_j \in F, j = i+1, \dots, d\},$$

Тогда в качестве M возьмем такое множество: $M = \bigcup_{i=1}^d M_i$. Заметим, что

$$|M| = 1 + q + \dots + q^{d-1} = \frac{q^d - 1}{q - 1}.$$



Пусть A — матрица порядка $|F^d| \times |M|$ над F . Пронумеруем строки матрицы A элементами множества F^d , а столбцы — элементами множества M . В матрице A на пересечении строки с номером $x = (x_1, \dots, x_d) \in F^d$ и столбца с номером $y = (y_1, \dots, y_d) \in M$ поставим элемент $(x, y) = \sum_{i=1}^d x_i y_i \in F$.

Предложение 1. Полученная матрица A является ортогональной таблицей $OA(q, |M|, q^{d-2})$ над F .

Доказательство. Так как любая пара различных элементов множества M является линейно независимой, то для любых $a, b \in F$, $y, z \in M$, $y \neq z$, найдутся ровно q^{d-2} элементов x пространства F^d , для которых система

$$\begin{cases} (x, y) = a, \\ (x, z) = b \end{cases}$$

разрешима относительно $x \in F^d$. Это означает, что в любых двух столбцах матрицы A каждая из пар $(a, b) \in F \times F$ встречается ровно $\lambda = q^{d-2}$ раз.

Осталось заметить, что число строк матрицы A равно $q^d = \lambda q^2$. Предложение доказано.

Предложение 2. Пусть табличное задание хеш-функции $h: K \times X \rightarrow Y$ представляет собой построенную выше матрицу A и распределение вероятностей на множестве ключей K равномерно. Тогда код аутентификации (X, K, Y, h) является оптимальным.

Доказательство следует из предложения 1 и следствия 1.

Заметим, что недостатком данной математической модели кода аутентификации являются ограничения, накладываемые на мощности множеств X и K . Рассмотрим математическую модель кода аутентификации без этих ограничений, введенную в работе [3], которая является аналогом математической модели шифров замены с ограниченным и неограниченным ключом, введенную А.Ю. Zubovым в работе [4] и позволяющая строить совершенные имитостойкие шифры [5].

Пусть U , V — соответственно конечные множества возможных кодовеличин и кодобозначений (как аналогия шифрвеличинам и шифробозначениям в модели шифра замены с неограниченным ключом [4]). Перед выработкой кода аутентификации сообщение $x \in X$ предварительно представляется в виде последовательности кодовеличин, которые в процессе выработки кода аутентичности заменяются на кодобозначения. Пусть также имеются конечное множество ключей K и ключевая хеш-функция $h: K \times U \rightarrow V$. Процесс выработки кода аутентификации для сообщения $x = u_1 \dots u_l$ на ключе $k_1 \dots k_l$ заключается в замене каждой кодовеличины u_i на кодобозначение v_i в соответствии с ключом k_i , $i = 1, \dots, l$. Опорным кодом кода аутентификации назовем совокупность $\Delta = (U, K, V, h)$, для которой выполнено равенство $V = \bigcup_{k \in K} h_k(U)$.

l -й степенью опорного кода Δ назовем совокупность

$$\Delta^l = (U^l, K^l, V^l, h^{(l)}),$$

где U^l, K^l, V^l — декартовы степени соответствующих множеств U , K , V ; множество $h^{(l)}$ состоит из отображений

$$h_k: U^l \rightarrow V^l, k \in K^l,$$

таких, что для любых $u = u_1 \dots u_l \in U^l$, $k = k_1 \dots k_l \in K^l$ выполнено равенство

$$h_k(u) = h_{k_1}(u_1) \dots h_{k_l}(u_l) = v_1 \dots v_l \in V^l.$$

Кодом аутентификации с неограниченным ключом назовем семейство

$$\Delta_H = (\Delta^l, l \in \mathbb{N}; \psi_c),$$

где ψ_c — случайный генератор ключевого потока.

Для кода аутентификации Δ^l , $l \in \mathbb{N}$, обозначим через P_{im}^l вероятность успеха имитации, а через $P_{podm}^l(t)$ — вероятность успеха подмены в сообщении длины l ровно t элементов множества U элементами множества V .

Будем говорить, что код аутентификации с неограниченным ключом Δ_H является оптимальным, если оптимальным является код Δ^l для любого $l \in \mathbb{N}$:



$$P_{im}^l = \frac{1}{|V|^l}, \quad P_{podm}^l(t) = \frac{1}{|V|^l}.$$

Заметим, что $P_{im}^l \rightarrow 0$ при $l \rightarrow \infty$, $P_{podm}^l(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$.

Так как случайный генератор ψ_c вырабатывает ключевые элементы k_i , $i=1, \dots, l$, ключа $k_1 \dots k_l$ независимо, то

$$P_{im}^l = (P_{im})^l, \quad P_{podm}^l(t) = (P_{podm})^l,$$

где P_{im} и P_{podm} — соответственно вероятности успехов имитации и подмены опорного кода Δ . Исходя из этого, верна следующая теорема.

Теорема 3. Код аутентификации Δ_H является оптимальным тогда и только тогда, когда опорный код Δ является оптимальным.

Следствие 2. Пусть для кода аутентификации Δ_H , $|U|=n$, $|V|=s$, выполнено равенство $|K|=n(s-1)+1$. Код аутентификации Δ_H является оптимальным тогда и только тогда, когда выполнены следующие условия:

(i) табличное задание хеш-функции h представляет собой ортогональную таблицу $OA\left(s, n, \frac{n(s-1)+1}{s^2}\right)$;

(ii) распределение вероятностей на множестве K равномерно.

Доказательство следует из теоремы 3 и следствия 1.

Теорема 3 дает удобный способ построения оптимальных кодов аутентификации Δ_H . Примером тому служит следующий пример.

Предложение 3. Пусть табличное задание хеш-функции $h: K \times U \rightarrow V$ опорного кода Δ представляет собой построенную выше матрицу A и распределение вероятностей на множестве ключей K равномерно. Тогда код аутентификации Δ_H является оптимальным.

Доказательство следует из предложения 2 и теоремы 3.

Список литературы References

1. Черемушкин А.В. 2009. Криптографические протоколы. Основные свойства и уязвимости. М.: Издательский центр "Академия": 272.
Cheremushkin A.V. 2009. Cryptographic Protocols: Basic Properties and Vulnerability. Moscow, Akademiia: 272.
2. Рацеев С.М., Череватенко О.И. 2014. О кодах аутентификации на основе ортогональных таблиц // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. Т. 37, № 4: 178–186.
Ratseev S.M., Cherevatenko O.I. 2014. On authentication codes based on orthogonal tables. Journal of Samara State Technical University, Ser. Physical and Mathematical Sciences, Vol. 37, № 4: 178–186.
3. Рацеев С.М. 2013. Об оптимальных кодах аутентификации. Системы и средства информатики. Т. 23, № 1: 53–57.
Ratseev S. M. 2013. On optimal authentication codes, Systems and Means of Informatics, vol. 23, № 1: 53–57.
4. Зубов А.Ю. 2005. Криптографические методы защиты информации. Совершенные шифры. М.: Гелиос АРВ: 192.
Zubov A. Iy. 2005. Cryptographic Methods of Information Security. Perfect Ciphers. Moscow, Gelios ARV:192.
5. Рацеев С.М. 2015. Некоторые обобщения теории Шеннона о совершенных шифрах. Вестн. ЮУрГУ. Сер. Матем. моделирование и программирование. Т. 8, № 1: 111–127.
Ratseev S.M. 2015. Some generalizations of Shannon's theory of perfect ciphers. Vestnik YuUrGU. Ser. Mat. Model. Progr.. Vol. 8, № 1: 111–127.



УДК 517.927

ОБ АНАЛОГАХ УРАВНЕНИЯ ЭЙЛЕРА И УСЛОВИЯ ЛЕЖАНДРА ДЛЯ ОДНОЙ ВАРИАЦИОННОЙ ЗАДАЧИ НА ГРАФЕ

ON THE ANALOGS OF EULER EQUATION AND LEGENDRE CONDITIONS FOR ONE VARIATIONAL PROBLEM ON A GRAPH

Н.Н. Рябцева, Е.В. Кормош
N.N. Ryabtseva, E.V. Kormosh

Белгородский университет кооперации, экономики и права,
Россия, 308023, Белгород, ул. Студенческая, 116а

Belgorod University of Cooperation, Economics and Law, 116a, Sadovaya St., Belgorod, 308023, Russia

E-mail: kaf-end@bukep.ru

Аннотация

Устанавливается аналог классической теоремы Якоби о положительной определённости второй вариации для функционала, заданного на функциях ветвящегося аргумента из пространственной сети (геометрического графа). Особенности соответствующего аналога уравнения Якоби (как и уравнения Эйлера) порождены процедурой интегрирования по частям, приводящей к дифференцированию по состыкованным мерам.

Abstract

The analogue of classical Jacobi theorem about positive definiteness of the second variation for the functional that determined on the functions of the ramified argument from a spatial network (geometrical graph) is established. The specificities of the corresponding Euler equation and Jacobi equation is generated by the integration by parts procedure. This procedure leads to differentiation in the sense of a snap-together measures.

Ключевые слова: пространственная сеть, дифференцирование по мере, интегральный функционал, уравнение Эйлера, вторая вариация, уравнение Якоби, аналог теоремы Якоби.

Keywords: spatial network, differentiation in the sense of measure, integral functional, second variation, Euler equation, second variation, Jacobi equation, analogue of the Jacobi theorem.

Введение

В современном естествознании, физике, в инженерном проектировании и инженерной практике достаточно часто возникает проблема конструирования и расчетов объектов, которые имеют в пространстве форму решетки, рамы, т. е. некоторой пространственной сети, примером которых могут быть различного рода инженерные сети: системы трубопроводов, гидравлические сети, электрические сети; упругие системы строительной механики: решетки, рамы; модель электронных колебаний сложной молекулы, модели процессов в нейронных сетях и др. Такого рода объекты уже более столетия представляли весьма трудную проблему для эффективных расчетов, поскольку примитивное математическое моделирование, представляющее подобные объекты в виде системы дифференциальных уравнений ввиду не только объема информации, но и сложности этой информации (в расчетах должно учитываться условие сопряжения этих элементов), представляло собой необозримую по сложности задачу. Эффективные математические методы начали внедряться в моделирование подобных систем сравнительно недавно – всего лишь около 30 лет назад. В настоящее время научная активность в этом направлении достаточно высока. В работе в качестве математической модели сложных систем рассматриваются необходимые условия экстремума общего интегрального функционала на множестве функций с ветвящимся аргументом, который принимает значения из некоторого геометрического графа. Устанавливается достаточно полный аналог уравнения Эйлера при условиях, не требующих существования и непрерывности вторых частных производных функции F , а также и необходимое условие, типа классического условия Лежандра.

Рассмотрим функционал, определяемый записью

$$\Phi(u) = \int_{\Gamma} F(x, u(x), u'(x)) dx = \sum_{i=1}^m \int_{\gamma_i} F(x, u(x), u'(x)) dx, \quad (1)$$

где $u(x)$ – скалярнозначные функции, заданные на геометрическом связном графе Γ , т. е. $u: \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$. Мы рассматриваем здесь только непрерывные функции, заданные на Γ , предполагая их равномерно непрерывными на Γ и обозначая их множество через $C_{[\Gamma]}$. Для удобства мы предполагаем так-



же, что каждая из рассматриваемых функций дифференцируема на каждом ребре γ_i так, что ее значение u_i на γ_i оказывается элементом пространства $C^1_{[\gamma_i]}$. Для определенности процедуры дифференцирования нам необходимо задание ориентации на каждом ребре, т. е. выбора одного из двух возможных направлений единым образом сразу на всем ребре (тем самым граф должен быть ориентированным). Функцию F трех аргументов, определяющую подынтегральное выражение в (1), мы считаем заданной по первому аргументу – на Γ , по второму и третьему – на R , т. е. $F: \Gamma \times R \times R \rightarrow R$. Там, где это потребуется мы функцию F будем считать регулярной, т. е. достаточно гладкой – обсуждаемые проблемы определяются другими обстоятельствами, а не трудностями, связанными с потерей гладкости. Описанные договоренности позволяют считать подынтегральное выражение в (1) заданным и непрерывным на каждом ребре, если фиксирована функция $u(x)$. Аналогом классического закрепления концов будет условие задания фиксированного набора предельных значений u из $C^1[\Gamma]: \{u(a)\}_{a \in \partial\Gamma}$, и множество таких функций обозначим через L . L есть линейное многообразие в $C^1[\Gamma]$.

Рассмотрим задачу:

$$\Phi(u) \rightarrow \min_{u \in L},$$

в предположении, что дающая минимум функция $u_0(x)$ – достаточно гладкая, а также функция $F(x, u, u')$, определяющая функционал, достаточно гладкая. Аналогом классической теоремы Эйлера-Лагранжа [1] является следующий факт.

Теорема 1. Пусть F дважды непрерывно дифференцируема. Пусть $u_0(x)$ из L является точкой локального минимума функционала (1), причем $u_0 \in C^2[\Gamma]$. Тогда на каждом ребре γ_i для нее справедливо тождество

$$F_u(x, u_0(x), u'_0(x)) - \frac{d}{dx} F_{u'}(x, u_0(x), u'_0(x)) = 0, \quad (2)$$

а в каждой внутренней вершине $a \in J(\Gamma)$ справедливо условие

$$\sum \phi_i(a) F_{u'}^{(\gamma_i)}(a, u_0(a), (u_0)'_i(a)) = 0. \quad (3)$$

Через $\Gamma(a)$ обозначен набор примыкающих к a ребер. Число $\phi_i(a)$ равно 1, если ребро γ_i ориентировано «от a », и равно -1, если γ_i ориентировано «к a ». Через $(u_0)'_i(a)$ обозначен предел $(u_0)'(x)$ при x , стремящимся к a по ребру γ_i .

Если $u_0(x)$ – точка экстремума данного функционала, то реализация классической схемы Лагранжа в виде минимизации функции $\Phi(u_0 + \lambda h)$ при произвольном допустимом h приводит к первой вариации:

$$\delta\Phi(u_0)h = \frac{d}{d\lambda} [\Phi(u_0 + \lambda h)]_{\lambda=0} = \left(\sum_i \int_{\gamma_i} [F_u h + F_{u'} h'] dx + \sum_{a \in I(\Gamma)} F_u^\circ(a, u(a)) h(a) \right),$$

причем должно быть $\delta\Phi(u_0)h = 0$ для любой допустимой h . Отсюда стандартным образом следуют в силу произвола $h(x)$ аналоги обычных уравнений Эйлера и условие типа

$$\left[\sum_i F_{u'_i}(a, u(a), u'_i(a)) \right] + F_u^\circ(a, u_0(a)) = 0,$$

которые в приложениях реализуются в виде так называемых условий трансмиссии, т. е. условий стыковки решений, подходящих к узлу a вдоль разных ребер.

Систему (2), (3) будем называть уравнением Эйлера для функционала (1). Решение уравнения Эйлера для функционала (1) будем называть экстремалью этого функционала, а решение этого уравнения, принадлежащее L , будем называть допустимой экстремалью функционала (1).

Требование о двукратной дифференцируемости u_0 в доказательстве этой теоремы 1 мы использовали только для того, чтобы иметь возможность говорить о производной $\frac{d}{dx} [F_u(x, u_0(x), u'_0(x))]$, имея в виду, что если $u''_0(x)$ существует, то и $\frac{d}{dx} [F_{u'}(x, u_0(x), u'_0(x))]$ существует в силу известной теоремы о производной от суперпозиции функций. В действительности же требование о существовании второй производной у функции u_0 в теореме является излишним, о чем и говорит следующая лемма.



Лемма. Пусть выполнены условия теоремы 1, с той лишь разницей, что предположение $u_0 \in C^2[\Gamma]$ заменено на $u_0 \in C^1[\Gamma]$. Тогда $\frac{d}{dx}[F_{u'}(x, u_0(x), u_0'(x))]$ существует при всех $x \in R(\Gamma)$ и принадлежит $C[R(\Gamma)]$.

В силу вышесказанного вытекает справедливость утверждения, являющегося аналогом теоремы Дю-Буа-Реймона классического вариационного исчисления[2].

Теорема 2. Если в

условии теоремы 1 условие $u_0 \in C^2[\Gamma]$ заменить на условие $u_0 \in C^1[\Gamma]$, то утверждения этой теоремы останутся верными.

Далее, если y_i – функция, заданная на Γ или на $R(\Gamma)$, то y_i обозначает сужение y на ребро γ_i .

Будем говорить, что функция F трижды непрерывно дифференцируема, если для любого ребра γ_i все частные производные третьего порядка функции $F^{(\gamma_i)}$ непрерывны на $\gamma_i \times R \times R$ и, более того, непрерывно доопределяемы на $[\gamma_i] \times R \times R$.

Теорема 3. Пусть F трижды непрерывно дифференцируема. Пусть вторая вариация функционала (1) неотрицательна для всех $h \in L_0$. Тогда $F_{u'u'}(x, u_0(x), u_0'(x)) \geq 0$ на $R(\Gamma)$.

Вторая вариация функционала (1) состоит из хорошо известных для задач на отрезке компонент и имеет вид:

$$\delta^2 \Phi(u_0)h = \sum_i \int_{\gamma_i} \left[h^2 \left(F_{uu} - \frac{d}{dx} F_{uu'} \right) + F_{u'u'} h'^2 \right] dx + \sum_a (F_{uu}^\circ - F_{uu'}) h^2(a). \quad (4)$$

Переобозначая, как это обычно делается, $M(x) = F_{u'u'}(x, u_0(x), u_0'(x))$, $N(x) = F_{uu}(x, u_0(x), u_0'(x))$, $Q(x) = F_{uu'}(x, u_0(x), u_0'(x))$ мы можем придать второй вариации канонический вид квадратичного функционала:

$$\delta^2 \Phi(u_0)h = \sum_i \int_{\gamma_i} (M h'^2 + (N - Q') h^2) dx + \sum_a (F_{uu}^\circ - F_{uu'}) h^2(a), \quad (5)$$

где последняя группа слагаемых суммируется по внутренним узлам.

Рассмотрим теперь в (5) $h \in L_j$, где $L_j = \{h \in L_0 \mid h_i \equiv 0, i \neq j\}$, тогда для любой $a \in J(\Gamma)$ выполнено $h(a) = 0$. Таким образом, из неотрицательности второй вариации функционала для всех $h \in L_0$ вытекает, что

$$\int_{\gamma_j} (M_j h_j'^2 + (N_j - Q_j') h_j^2) dx \geq 0$$

для всех $h_j \in C_0^1[\gamma_j]$, где $C_0^1[\gamma_j] = \{h_j \in C^1[\gamma_j] \mid h_j(a_j) = h_j(b_j) = 0\}$. Если теперь применим к последнему неравенству известный результат для квадратичного функционала на отрезке, получим, $M_j(x) \geq 0$. Так как j выбрано произвольно, то это и означает, что $M(x) \geq 0$ на $R(\Gamma)$.

Заключение

В работе рассмотрены, в качестве математической модели сложных систем, необходимые условия экстремума общего интегрального функционала на множестве функций с ветвящимся аргументом, т. е. аргументом, принимающим значения из некоторого геометрического графа. Установлен достаточно полный аналог уравнения Эйлера при условиях, не требующих существования и непрерывности вторых частных производных функции F , а также и необходимое условие, типа классического условия Лежандра.

Список литературы References

1. Покорный Ю.В., Пенкин О.М., Прядиев В.Л., Боровских А.В., Лазарев К.П., Шабров С.А. 2003. Дифференциальные уравнения на геометрических графах. М.: ФИЗМАТЛИТ: 272.
Pokornyi Yu. V., Penkin O. M., Pryadiev V. L., Borovskikh A. V., Lazarev K. P., et Shabrov S. A. 2003. Equations Differentiales in geometrica graphs. M.: FISMAT: 272.
2. Покорный Ю.В., Покорная И.Ю., Прядиев В.Л., Рябцева Н.Н. 2007. Об интегрировании в вариационных неравенствах на пространственных сетях. Математические заметки, 81, 6: 904-911.
Pokornyi Yu.V., Pokornaya I.Yu., Pryadiev V.L., Ryabtseva N.N. 2007. Integration in variational inequalities on spatial grids. Mathematical Notes, 81,6: 810-816.



УДК 517.952

О ПСЕВДОПОЛИНОМИАЛЬНЫХ РЕШЕНИЯХ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ, СОДЕРЖАЩЕГО ПРОИЗВЕДЕНИЕ ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

ON THE PSEUDO-POLYNOMIAL SOLUTIONS OF TWO-DIMENSIONAL EQUATION CONTAINING THE PRODUCTION OF PARTIAL DERIVATIVES

И.В. Рахмелевич
I.V. Rakhmelevich

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Россия, 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23

Nizhny Novgorod State University, 23 Gagarin Ave, Nizhny Novgorod, 603950, Russia

E-mail: igor-kitpd@yandex.ru

Аннотация

Исследовано двумерное уравнение, содержащее произведение частных производных любых порядков. С помощью метода разделения переменных получены псевдополиномиальные решения этого уравнения, которые выражаются через полиномы от независимых переменных и функции одной переменной, которые либо определяются как решения некоторых обыкновенных дифференциальных уравнений, либо являются произвольными. Доказана теорема, позволяющая на основании известного частного решения данного уравнения получить новое семейство решений.

Abstract

There is investigated two-dimensional equation containing the production of partial derivatives of any order. Pseudo-polynomial solutions of this equation have been received with the help of variables separation method. These solutions are expressed through the polynomials of independent variables and the functions of one variable which either define as the solutions of some ordinary differential equations or are arbitrary. There is proved the theorem which allows to receive a new family of solutions on the base of known particular solution of the given equation.

Ключевые слова: дифференциальное уравнение, частная производная, разделение переменных, псевдополиномиальное решение.

Keywords: differential equation, partial derivative, separation of variables, pseudo-polynomial solution.

Введение

В настоящее время известно достаточно много работ, посвященных нахождению полиномиальных решений для уравнений в частных производных. В большинстве из них изучались решения такого типа для линейных уравнений [1-4]. При этом существенный интерес представляют нелинейные уравнения, в том числе содержащие произведение частных производных. Так, в работах

[5-9] изучались решения нелинейных уравнений, содержащих произведение степеней частных производных первого порядка. Целью данной работы является исследование псевдополиномиальных решений двумерных уравнений в частных производных, содержащих произведение частных производных любого порядка. Псевдополиномиальными будем называть решения, выражающиеся через полиномы от независимых переменных и функции, которые либо определяются как решения некоторых обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), либо являются произвольными.

1. Постановка задачи

Рассмотрим класс двумерных уравнений относительно неизвестной функции $u(x, y)$, содержащих произведение частных производных:

$$\prod_{k=1}^K \frac{\partial^{m_k+n_k} u}{\partial x^{m_k} \partial y^{n_k}} = f(x)g(y). \quad (1)$$



Здесь $f(x)$, $g(y)$ – некоторые заданные функции, а m_k, n_k удовлетворяют условию:

$$m_k + n_k \geq 1,$$

при всех $k \in \Xi$, где $\Xi = \{1, \dots, K\}$ – множество значений индекса k .
Уравнение (1) имеет семейства решений, которые будут приведены в следующем разделе.

2. Основные результаты

Теорема 1

1. Пусть $m, n \in \mathbf{N}$ – такие, что для каждого $k \in \Xi$ имеет место одна из двух ситуаций:

$$m < m_k, \quad n \geq n_k, \quad (2)$$

либо

$$m \geq m_k, \quad n < n_k. \quad (3)$$

При этом оба подмножества $\Xi_1 \subset \Xi$, $\Xi_2 \subset \Xi$ значений индекса k , для которых выполняются условия (2) и (3) соответственно, предполагаются непустыми.

Тогда уравнение (1) имеет следующие решения:

$$u(x, y) = P_m(x)Y(y) + Q_n(y)X(x), \quad (4)$$

где $P_m(x), Q_n(y)$ – полиномы степеней m, n с произвольными коэффициентами, а функции $X(x), Y(y)$ являются решениями следующих ОДУ:

$$\prod_{k \in \Xi_1} X^{(m_k)}(x) = \frac{\mu f(x)}{\prod_{k \in \Xi_2} P_m^{(m_k)}(x)}, \quad \prod_{k \in \Xi_2} Y^{(n_k)}(y) = \frac{\nu g(y)}{\prod_{k \in \Xi_1} Q_n^{(n_k)}(y)}, \quad (5)$$

причем постоянные μ, ν удовлетворяют условию $\mu\nu = 1$.

2. Пусть $m, n \in \mathbf{N}$ – такие, что для каждого $k \in \Xi$ выполняются условия (2), т. е. $\Xi_2 = \emptyset$. Тогда уравнение (1) имеет решение вида (4) при дополнительном условии, что $g(y), Q_n(y)$ удовлетворяют соотношению:

$$\prod_{k=1}^K Q_n^{(n_k)}(y) = g(y). \quad (6)$$

При этом $Y(y)$ – произвольная функция, дифференцируемая достаточное число раз, а функция $X(x)$ должна удовлетворять следующему ОДУ:

$$\prod_{k=1}^K X^{(m_k)}(x) = \mu f(x) \quad (7)$$

Аналогично, если $m, n \in \mathbf{N}$ – такие, что для каждого $k \in \Xi$ выполняются условия (3), т. е. $\Xi_1 = \emptyset$, то уравнение (1) имеет решение вида (4) при дополнительном условии, что $f(x), P_m(x)$ удовлетворяют соотношению:

$$\prod_{k=1}^K P_m^{(m_k)}(x) = f(x). \quad (8)$$

При этом $X(x)$ – произвольная функция, дифференцируемая достаточное число раз, а функция $Y(y)$ должна удовлетворять следующему ОДУ:

$$\prod_{k=1}^K Y^{(n_k)}(y) = g(y). \quad (9)$$

Доказательство

1. Рассмотрим функцию вида (4) и запишем выражение для производных, входящих в левую часть уравнения (1):

$$\frac{\partial^{m_k+n_k} u}{\partial x^{m_k} \partial y^{n_k}} = P_m^{(m_k)}(x) Y^{(n_k)}(y) + X^{(m_k)}(x) Q_n^{(n_k)}(y). \quad (10)$$

Для $k \in \Xi_1$ из первого условия (2) следует: $P_m^{(m_k)}(x) = 0$, поэтому для таких k

$$\frac{\partial^{m_k+n_k} u}{\partial x^{m_k} \partial y^{n_k}} = X^{(m_k)}(x) Q_n^{(n_k)}(y). \quad (11)$$

Далее, для $k \in \Xi_2$ из второго условия (3) следует: $Q_n^{(n_k)}(y) = 0$, поэтому для данных k

$$\frac{\partial^{m_k+n_k} u}{\partial x^{m_k} \partial y^{n_k}} = P_m^{(m_k)}(x) Y^{(n_k)}(y). \quad (12)$$

Используя (11) и (12), левую часть уравнения (1) можно представить в виде:

$$\prod_{k=1}^K \frac{\partial^{m_k+n_k} u}{\partial x^{m_k} \partial y^{n_k}} = \prod_{k \in \Xi_1} \{X^{(m_k)}(x) Q_n^{(n_k)}(y)\} \cdot \prod_{k \in \Xi_2} \{P_m^{(m_k)}(x) Y^{(n_k)}(y)\}. \quad (13)$$

Используя соотношение (13), уравнение (1) можно преобразовать так:

$$\frac{\prod_{k \in \Xi_2} P_m^{(m_k)}(x) \cdot \prod_{k \in \Xi_1} X^{(m_k)}(x)}{f(x)} \cdot \frac{\prod_{k \in \Xi_1} Q_n^{(n_k)}(y) \cdot \prod_{k \in \Xi_2} Y^{(n_k)}(y)}{g(y)} = 1. \quad (14)$$

Левая часть уравнения (14) представляет собой произведение двух сомножителей, первый из которых зависит от x , а второй от y . Поэтому, в соответствии с известным методом разделения переменных [10,11], уравнение (14) можно удовлетворить только в том случае, если

$$\frac{\prod_{k \in \Xi_2} P_m^{(m_k)}(x) \cdot \prod_{k \in \Xi_1} X^{(m_k)}(x)}{f(x)} = \mu, \quad \frac{\prod_{k \in \Xi_1} Q_n^{(n_k)}(y) \cdot \prod_{k \in \Xi_2} Y^{(n_k)}(y)}{g(y)} = \nu, \quad (15)$$

где μ, ν – постоянные, удовлетворяющие условию $\mu\nu = 1$. Из (15) непосредственно следуют уравнения (5).

2. Пусть для некоторых $m, n \in \mathbb{N}$ при всех $k \in \Xi$ выполнены условия (2), т. е. $\Xi_2 = \emptyset$.

Тогда при всех $k \in \Xi$ производные, входящие в (1), выражаются с помощью соотношения (11). Проводя рассуждения, аналогичные предыдущему пункту, получаем, что уравнение (1) в этом случае можно представить в виде:

$$\frac{\prod_{k \in \Xi} X^{(m_k)}(x)}{f(x)} \cdot \frac{\prod_{k \in \Xi} Q_n^{(n_k)}(y)}{g(y)} = 1 \quad (16)$$

Разделяя переменные в (16), приходим к уравнениям (6) и (7). Для случая $\Xi_1 = \emptyset$ доказательство проводится полностью аналогично. Теорема доказана.

Теорема 2

Пусть $u_0(x, y)$ – любое решение уравнения (1),

$$\tilde{m} = \min(m_k)_{k \in \Xi} - 1, \quad \tilde{n} = \min(n_k)_{k \in \Xi} - 1. \quad (17)$$

Пусть также существуют такие $m', n' \in \mathbb{N}$, что для каждого $k \in \Xi$ выполнено хотя бы одно из условий:



$$m' < m_k, n' < n_k. \quad (18)$$

Тогда функция

$$u(x, y) = u_0(x, y) + P_{\tilde{m}}(x)Y_0(y) + Q_{\tilde{n}}(y)X_0(x) + R_{m'n'}(x, y) \quad (19)$$

также является решением уравнения (1), где $P_{\tilde{m}}(x), Q_{\tilde{n}}(y)$ – полиномы с произвольными коэффициентами, причём $P_{\tilde{m}}(x) \equiv 0$ при $\tilde{m} = -1$, и $Q_{\tilde{n}}(y) \equiv 0$ при $\tilde{n} = -1$; $R_{m'n'}(x, y)$ – полином степени m' по x и степени n' по y с произвольными коэффициентами; $X_0(x), Y_0(y)$ – произвольные функции, дифференцируемые достаточное число раз.

Доказательство

Запишем производные для функции (19), входящие в левую часть уравнения (1):

$$\frac{\partial^{m_k+n_k} u}{\partial x^{m_k} \partial y^{n_k}} = \frac{\partial^{m_k+n_k} u_0}{\partial x^{m_k} \partial y^{n_k}} + P_{\tilde{m}}^{(m_k)}(x)Y^{(n_k)}(y) + X^{(m_k)}(x)Q_{\tilde{n}}^{(n_k)}(y) + \frac{\partial^{m_k+n_k} R_{m'n'}}{\partial x^{m_k} \partial y^{n_k}} \quad (20)$$

Так как $\tilde{m}, \tilde{n}$ определяются выражениями (17), то при всех $k \in \Xi$

$$P_{\tilde{m}}^{(m_k)}(x) \equiv 0, \quad Q_{\tilde{n}}^{(n_k)}(y) \equiv 0. \quad (21)$$

Далее, из того, что при каждом $k \in \Xi$ выполнено хотя бы одно из условий (18), следует:

$$\frac{\partial^{m_k+n_k} R_{m'n'}}{\partial x^{m_k} \partial y^{n_k}} = 0. \quad (22)$$

Из (20) – (22) имеем, что $\frac{\partial^{m_k+n_k} u}{\partial x^{m_k} \partial y^{n_k}} = \frac{\partial^{m_k+n_k} u_0}{\partial x^{m_k} \partial y^{n_k}}$. Тогда, если $u_0(x, y)$ является реше-

нием уравнения (1), то и $u(x, y)$ также удовлетворяет этому уравнению. Теорема доказана.

Следствие

Уравнение (1) имеет следующие решения:

$$u(x, y) = X(x)Y(y) + P_{\tilde{m}}(x)Y_0(y) + Q_{\tilde{n}}(y)X_0(x) + R_{m'n'}(x, y). \quad (23)$$

Здесь $P_{\tilde{m}}(x), Q_{\tilde{n}}(y), R_{m'n'}(x, y), X_0(x), Y_0(y)$ определяются согласно условию теоремы 2, а функции $X(x), Y(y)$ удовлетворяют уравнениям:

$$\prod_{k=1}^K X^{(m_k)}(x) = \mu f(x), \quad \prod_{k=1}^K Y^{(n_k)}(y) = \nu g(y), \quad (24)$$

где μ, ν – постоянные, удовлетворяющие условию $\mu\nu = 1$.

Доказательство

Подставим функцию $u_0(x, y) = X(x)Y(y)$ в уравнение (1) и представим его в виде:

$$\frac{\prod_{k=1}^K X^{(m_k)}(x)}{f(x)} \cdot \frac{\prod_{k=1}^K Y^{(n_k)}(y)}{g(y)} = 1 \quad (25)$$

Разделяя переменные в (25) аналогично (14), (16), получаем, что функция $u_0(x, y) = X(x)Y(y)$ является решением уравнения (1) только в том случае, если $X(x), Y(y)$ удовлетворяют уравнениям (24). Тогда, согласно теореме 2, функция, определяемая выражением (23), также является решением уравнения (1). Следствие доказано.



Пример

Рассмотрим уравнение, не содержащее смешанных производных:

$$\prod_{k \in \Xi_1} \frac{\partial^{m_k} u}{\partial x^{m_k}} \cdot \prod_{k \in \Xi_2} \frac{\partial^{n_k} u}{\partial y^{n_k}} = f(x)g(y). \quad (26)$$

Для уравнения (26) $n_k = 0$ при всех $k \in \Xi_1$, и $m_k = 0$ при всех $k \in \Xi_2$. Согласно доказанным выше теоремам 1,2, уравнение (26) имеет следующие семейства решений:

Семейство 1:

$$u(x, y) = P_m(x)Y(y) + Q_n(y)X(x) + R_{m'n'}(x, y), \quad (27)$$

где степени полиномов m, n, m', n' удовлетворяют условиям:

$$0 \leq m \leq \min(m_k)_{k \in \Xi_1} - 1, \quad 0 \leq n \leq \min(n_k)_{k \in \Xi_2} - 1, \quad (28a)$$

$$m' = \min(m_k)_{k \in \Xi_1} - 1, \quad n' = \min(n_k)_{k \in \Xi_2} - 1, \quad (28b)$$

а функции $X(x), Y(y)$ удовлетворяют уравнениям:

$$\prod_{k \in \Xi_1} X^{(m_k)}(x) = \frac{\mu f(x)}{[P_m(x)]^{K_2}}, \quad \prod_{k \in \Xi_2} Y^{(n_k)}(y) = \frac{\nu g(y)}{[Q_n(y)]^{K_1}}, \quad (29)$$

где K_1, K_2 – число элементов в множествах Ξ_1, Ξ_2 соответственно.

Семейство 2:

$$u(x, y) = X(x)Y(y) + R_{m'n'}(x, y), \quad (30)$$

где m', n' определяются условиями (28b), а функции $X(x), Y(y)$ удовлетворяют уравнениям:

$$\prod_{k \in \Xi_1} X^{(m_k)}(x) = \mu f(x), \quad \prod_{k \in \Xi_2} Y^{(n_k)}(y) = \nu g(y), \quad (31)$$

Отметим, что в обоих семействах решений отсутствуют слагаемые $P_{\tilde{m}}(x)Y_0(y) + Q_{\tilde{n}}(y)X_0(x)$, поскольку из (17) $\tilde{m} = -1$, $\tilde{n} = -1$, и согласно теореме 2, $P_{\tilde{m}}(x) \equiv 0$ и $Q_{\tilde{n}}(y) \equiv 0$.

Заключение

Таким образом, в настоящей работе исследовано дифференциальное уравнение с двумя независимыми переменными, содержащее произведение частных производных любых порядков. Получены псевдополиномиальные решения этого уравнения, которые выражаются через полиномы от независимых переменных и функции, которые либо определяются как решения некоторых ОДУ, либо являются произвольными. Доказана теорема, позволяющая на основании известного частного решения данного уравнения получить новое семейство решений. В качестве примера рассмотрены решения двумерного уравнения, не содержащего смешанных производных. Полученные в данной работе результаты могут быть обобщены на класс многомерных уравнений, содержащих произведение частных производных любых порядков.

Список литературы References

1. Карачик В.В. 2011. Полиномиальные решения дифференциальных уравнений в частных производных с постоянными коэффициентами I. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – № 10(227): 4–17.
Karachik V.V. 2011. Polinomialnye resheniya differentsialnykh uravneniy v chastnykh proizvodnykh s postoyannymi koeffitsientami I. Vestnik Yuzhno-Uralskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya Matematika . Mekhanika. Fizika. No 10(227): 4–17 (in Russian).



2. Карачик В.В. 2011. Полиномиальные решения дифференциальных уравнений в частных производных с постоянными коэффициентами II. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». № 32(249): 27–38.

Karachik V.V. 2011. Polinomialnye resheniya differentsialnykh uravneniy v chastnykh proizvodnykh s postoyannymi koeffitsientami II. Vestnik Yuzhno-Uralskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya Matematika . Mekhanika. Fizika. No 32(249): 27–38 (in Russian).

3. Карачик В.В., Антропова Н.А. 2010. О решении неоднородного полигармонического уравнения и неоднородного уравнения Гельмгольца. Дифференциальные уравнения. Т.46, № 3: 384–395.

Karachik V.V., Antropova N.A. 2010. On the solution of the inhomogeneous polyharmonic equation and the inhomogeneous Helmholtz equation. Differential equations. V.46, No 3: 387–399.

4. Miles E.P., Williams E. 1959. Basic sets of polynomials for iterated Laplace and wave equations. Duke Mathematical Journal. V.26, No 1: 35–40.

Miles E.P., Williams E. 1959. Basic sets of polynomials for iterated Laplace and wave equations. Duke Mathematical Journal. V.26, No 1.: 35–40.

5. Рахмелевич И.В. 2015. О двумерных гиперболических уравнениях со степенной нелинейностью по производным. Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. № 1: 12–19.

Rakhmelevich I.V. 2015. O dvumernykh hyperbolicheskikh uravneniyah so stepennoy nelineynosti po proizvodnym. Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika. No 1: 12–19. (In Russian).

6. Рахмелевич И.В. 2015. О некоторых новых решениях многомерного уравнения в частных производных первого порядка со степенными нелинейностями // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. № 3: 18–25.

Rakhmelevich I.V. 2015. O nekotorykh novykh resheniyakh mnogomernogo uravneniya v chastnykh proizvodnykh pervogo poriyadka so stepennymi nelineynost'yami. Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika. No 3: 18–25 (in Russian).

7. Рахмелевич И.В. 2016. О решениях многомерного дифференциального уравнения произвольного порядка со смешанной старшей частной производной и степенными нелинейностями. Владикавказский математический журнал. № 4: 41–49.

Rakhmelevich I.V. 2016. O resheniyakh mnogomernogo differentsialnogo uravneniya so smeshannoy starshey chastnoy proizvodnoy i stepennymi nelineynost'yami. Vladikavkazskiy matematicheskiy zhurnal. No 4: 41–49 (in Russian).

8. Рахмелевич И.В. 2016. О редукции многомерных уравнений первого порядка с мультиоднородной функцией от производных. Известия вузов. Математика. № 4: 57–67.

Rakhmelevich I.V. 2016. Reduction of multidimensional first order equations with multi-homogeneous function of derivatives. Russian Mathematics. V.60. № 4: 47–55.

9. Рахмелевич И.В. 2014. О решениях многомерного уравнения Клеро с мультиоднородной функцией от производных. Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. Т. 14. № 4-1: 374–381.

Rakhmelevich I.V. 2014. O resheniyah mnogomernogo uravneniya Clairaut s multiodnorodnoy funkciey ot proizvodnyh. Izvestiya Saratovskogo universiteta. Novaya seria. Seriya: Matematika. Mehanika. Informatica. V.14. № 4-1: 374–381. (In Russian).

10. Полянин А.Д., Зайцев В.Ф. 2002. Справочник по нелинейным уравнениям математической физики: точные решения. М., Физматлит, 432 с.

Polyanin A. D. and Zaitsev V. F. 2012. Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations, 2nd Edition, Chapman & Hall/CRC Press, Boca Raton.

11. Полянин А.Д., Зайцев В.Ф., Журов А.И. 2005. Методы решения нелинейных уравнений математической физики и механики. М., Физматлит, 256.

Polyanin, A. D., Zaitsev, V. F., Zhurov A. I. 2005. Metody resheniya nelineynykh uravneniy matematicheskoy fiziki i mehaniki. M., Fizmatlit (In Russian).



УДК: 517.925.7

ОБ ОДНОМ ОБОБЩЕНИИ ТОЧНЫХ КРИТЕРИЕВ СУЩЕСТВОВАНИЯ ПОДВИЖНЫХ ОСОБЫХ ТОЧЕК ОДНОГО КЛАССА НЕЛИНЕЙНЫХ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В КОМПЛЕКСНОЙ ОБЛАСТИ

THE EXACT CRITERIA FOR THE EXISTENCE OF MOVABLE SINGULAR POINTS OF SOLUTIONS OF A CLASS OF NONLINEAR ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS OF SECOND ORDER IN THE COMPLEX REGION

Т.Ю. Леонтьева
T.Yu. Leont'eva

Чувашский государственный педагогический университет им. И. Я. Яковлева, 428000, г. Чебоксары,
ул. К. Маркса, 38

I. Yakovlev named Chuvash State Pedagogical University, 38 K. Marx St, Cheboksary, 428000, Russia

E-mail: betty2784@mail.ru

Аннотация

Один из аспектов дифференциальных уравнений – это приложение в различных областях деятельности человека в виде математической модели. Наличие подвижных особых точек делает необходимым развитие теории и методов решения нелинейных дифференциальных уравнений. Характер подвижной особой точки связан с классом рассматриваемого нелинейного дифференциального уравнения, и их координаты практически невозможно определить без соответствующего математического аппарата, являющегося основой для программного обеспечения персональных компьютеров. Указанные задачи являются составляющими для аналитического приближенного метода решения нелинейных дифференциальных уравнений с подвижными особыми точками. Успешная апробация этого метода была проведена в последнее время для ряда классов нелинейных дифференциальных уравнений. Результаты статьи расширяют данный класс уравнений с подвижными особыми точками.

Abstract

One aspect of the differential equations of this application in various fields of human activities in a mathematical model. Nonlinear differential equations require the development of theory and methods of their solution due to the presence of moving singular points. The nature of mobile singularity associated with the class of nonlinear differential equations and their position is almost impossible to determine without a corresponding mathematical apparatus, which is the basis for the software of personal computers. These tasks are integral to approximate the analytical method for solving nonlinear differential equations with moving singular points. Successful testing of this method has been carried out in recent years for a number of classes of nonlinear differential equations. The results of this paper extend this class of nonlinear differential equations with moving singular points.

Ключевые слова: нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка, подвижная особая точка, координаты, приближенное решение, возмущение подвижной особой точки, точные критерии существования, комплексная область.

Keywords: nonlinear differential equation of the second order, a movable singular point, coordinates, approximate solution, perturbation of the movable singular point, the exact criteria for the existence of the solution, complex region.

Введение

Классические методы решения применимы лишь к линейным дифференциальным уравнениям, а для нелинейных дифференциальных уравнений необходима разработка нового аналитического приближенного метода решения в силу наличия подвижных особых точек. В настоящее время разработан и предложен в работах [Орлов 2006а, б; Орлов 2008а, б; Орлов 2009; Орлов 2010; Редкозубов, Орлов 2009] аналитический приближенный метод решения нелинейных дифференциальных уравнений, в котором одной из задач является нахождение подвижной особой точки с заданной точностью. Решение этой задачи связано с разработкой точных критериев существования подвижных особых точек в комплексной области, которые представляют собой необходимые и достаточные условия и классифицируются на точечные и интервальные критерии. С практической точки зрения, предпочтительными являются интервальные критерии, а точечные позволяют лишь констатировать факт их существования и применимы для проведения контроля.



Объекты и методы исследования

Объектом исследования является один класс нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка с полиномиальной правой частью пятой степени. Существующие методы решения дифференциальных уравнений можно классифицировать на точные, приближенные и асимптотические. Преобладающее большинство работ, посвященных решению дифференциальных уравнений, основывается на точных и частично асимптотических методах, лишь незначительная их часть использует формальный аппарат аналитического приближенного метода, но без строгого обоснования всех пунктов этих методов. В данной работе представлено решение одного из этапов аналитического приближенного метода решения исследуемого класса нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка с подвижными особыми точками, позволяющее находить координаты последних с заданной точностью. Решения данной задачи для других классов нелинейных дифференциальных уравнений представлены в работах [Орлов 2006а, б; Редкозубов, Орлов 2009; Орлов, Гузь 2013; Орлов и др. 2016]. Предыдущие этапы исследуемого метода решения рассматриваемого класса нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка были опубликованы ранее [Орлов, Леонтьева 2013а, б; Орлов, Леонтьева 2014; Леонтьева 2015; Орлов, Леонтьева 2016].

Результаты и их обсуждение

Рассмотрим нелинейное дифференциальное уравнение:

$$y''(z) = a_0(z)y^5(z) + a_1(z)y^4(z) + a_2(z)y^3(z) + a_3(z)y^2(z) + a_4(z)y(z) + a_5(z), \quad (1)$$

где $a_i, i = 0, 1, \dots, 5$ – аналитические функции в рассматриваемой области. С помощью замены переменной

$$y(z) = \frac{v(z)}{\sqrt[4]{a_0(z)}} - \frac{a_1(z)}{5a_0(z)}$$

при условии:

$$\frac{a_1(z)}{5a_0(z)} = \frac{a_2(z)}{2a_1(z)} = \frac{a_3(z)}{a_2(z)} = \frac{2 \left(a_4(z) + \frac{a_0''(z)}{4a_0(z)} - \frac{5}{16} \left(\frac{a_0''(z)}{a_0(z)} \right)^2 \right)}{a_3(z)},$$

уравнение (1) приводится к нормальному виду:

$$v''(z) = v^5(z) + r(z),$$

где

$$\begin{aligned} r(z) = & -\frac{a_1^5(z)\sqrt[4]{a_0(z)}}{5^5 a_0^4(z)} - \frac{3a_0''(z)\sqrt[4]{a_0(z)}}{20a_0^2(z)} + a_5(z)\sqrt[4]{a_0(z)} + \\ & + \frac{a_1''(z)\sqrt[4]{a_0(z)}}{5a_0(z)} - \frac{2a_0'(z)a_1'(z)\sqrt[4]{a_0(z)}}{5a_0^2(z)} + \frac{2(a_0'(z))^2 a_1(z)\sqrt[4]{a_0(z)}}{5a_0^3(z)} - \\ & - \frac{(a_0''(z))^2 a_1(z)\sqrt[4]{a_0(z)}}{16a_0^3(z)} + \frac{a_0'(z)}{2a_0(z)} u'(z) \end{aligned}$$

во всех областях, где выполняется условие $a_0(z) \neq 0$ [8]–[9].

Рассмотрим задачу Коши:

$$y''(z) = y^5(z) + r(z), \quad (2)$$

$$y(z_0) = y_0, y'(z_0) = y_1. \quad (3)$$

Используя формулу регуляризации

$$y^2(z) = \frac{1}{w_1(z)}, \quad (4)$$

получим задачу Коши:

$$2w_1''(z)w_1(z) = 3\left(w_1'(z)\right)^2 - 4 - 4 \cdot \left(\sqrt{w_1(z)}\right)^5 r(z), \quad (5)$$

$$w_1(z_0) = w_{1,0}, \quad w_1'(z_0) = w_{1,1}. \quad (6)$$

Решение уравнения (5) можно представить в виде следующего разложения:

$$w_1(z) = u_1(x, y) + iv_1(x, y),$$

которое характеризуется двумя фазовыми пространствами:

$$\Phi_1 = \{x, y, u_1(x, y)\}, \quad \Phi_2 = \{x, y, v_1(x, y)\}.$$

Для формулировки следующих теорем необходимы определения [Орлов 2011].

Определение 1. Линия в некоторой области комплексной плоскости называется правильной, если для координат точек этой линии существует взаимно-однозначное соответствие.

Определение 2. Линия в некоторой области комплексной плоскости называется неправильной в направлении оси Ox (Oy), если на этой линии существуют, по крайней мере, две точки, имеющие одинаковые вторые (первые) координаты.

Определение 3. Неправильная линия в направлении осей Ox (Oy) называется неправильной линией.

Теорема 1. z^* – подвижная особая точка решения $y(z)$ задачи Коши (2)-(3) тогда и только тогда, когда функции $u_1(x, y)$ и $v_1(x, y)$ в некоторой области G_1 ($z^* \in G_1$) фазовых пространств Φ_1 и Φ_2 являются непрерывными относительно своих аргументов и меняют знаки при переходе через точку $z^*(x^*, y^*)$, двигаясь вдоль некоторой правильной линии l ($z^* \in l \subset G_1$, $l \in \Phi_1$, $l \in \Phi_2$).

Доказательство.

I. (Необходимость). z^* – подвижная особая точка решения задачи Коши (2)-(3). На основании результатов, полученных в работе [Орлов, Леонтьева 2014], решение задачи Коши (2)-(3) в окрестности подвижной особой точки представимо в виде:

$$y(z) = (z^* - z)^{-1/2} \sum_{n=0}^{\infty} C_n (z^* - z)^{n/2}, \quad (7)$$

где $C_0 = \sqrt[4]{3/4}$, $C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = C_8 = 0$. Отсюда следует, что решение $y(z)$ в некоторой окрестности G_1 точки z^* будет определяться главной частью в формуле (7):

$$y(z) = O\left(\sqrt[4]{3/4} / \sqrt{z^* - z}\right).$$

Учитывая замену переменной (4), для $w_1(z)$ в области G_1 получим:

$$w_1(z) = O\left(2/\sqrt{3} \cdot (z^* - z)\right).$$

При этом

$$\begin{aligned} \text{sign}(u_1(x, y)) &= \text{sign}\left(\frac{2}{\sqrt{3}} \cdot (x^* - x)\right), \\ \text{sign}(v_1(x, y)) &= \text{sign}\left(\frac{2}{\sqrt{3}} \cdot (y^* - y)\right) \end{aligned} \quad (8)$$

Положим для определенности, что z^* находится в первой четверти плоскости xOy фазовых пространств Φ_1 и Φ_2 . В качестве правильной линии l рассмотрим часть окружности $|z| = |z^*|$ в области G_1 . Тогда для всех точек $z \in l : \arg z > \arg z^*$ следует, что

$$x < x^*, \quad y > y^*, \quad (9)$$

а для точек $z \in l : \arg z < \arg z^*$

$$x > x^*, \quad y < y^*. \quad (10)$$



Таким образом, функции $u_1(x, y)$ и $v_1(x, y)$, двигаясь по правильной линии l при переходе через точку z^* , являются непрерывными относительно своих аргументов и одновременно меняют знаки в соответствующих фазовых пространствах. Не нарушая общности, это утверждение справедливо для z^* в любой четверти координатной плоскости xOy фазовых пространств Φ_1 и Φ_2 .

II. (Достаточность). По условию теоремы функции $u_1(x, y)$ и $v_1(x, y)$ – непрерывны относительно своих аргументов и одновременно меняют знаки при движении вдоль некоторой правильной линии $l(l \subset G_1)$. В качестве правильной линии выберем часть окружности, проходящей через точку $z^*(x^*, y^*)$. Представив уравнение окружности в виде: $x^2 + y^2 = x^{*2} + y^{*2}$, получим

$$y = \pm \sqrt{x^{*2} - x^2 + y^{*2}}.$$

Рассмотрим поведение указанной окружности в первой четверти:

$$y = \sqrt{x^{*2} - x^2 + y^{*2}}$$

с учетом расположения точки z^* . Отсюда следует, что функции $u_1(x, y)$ и $v_1(x, y)$ переходят в категорию функций одной переменной, которые на концах интервала $[x_1, x_2] \subset G_1$ принимают значения разных знаков. По условию нашей теоремы ($u_1(x, y) \in C(G_1)$, $v_1(x, y) \in C(G_1)$), на основании теоремы Больцано-Коши, следует существование некоторой точки x^* , в которой $u_1(x, y)$ и $v_1(x, y)$ одновременно обращаются в нуль. Тогда функции $u_1(x, y)$ и $v_1(x, y)$ имеют линейный множитель относительно своего аргумента, и для функции $w_1(z)$ следует структура выражения:

$$w_1(z) = (z^* - z) \sum_{n=0}^{\infty} C_n (z^* - z)^n.$$

Отсюда, учитывая замену (4), получим:

$$y^2(z) = 1 / \left((z^* - z) \sum_{n=0}^{\infty} C_n (z^* - z)^n \right),$$

или

$$y(z) = (z^* - z)^{-1/2} / \left(\sum_{n=0}^{\infty} C_n (z^* - z)^n \right)^{1/2},$$

где $C_0 \neq 0$, что и завершает доказательство теоремы.

В силу абстрактности характера произвольной правильной линии, практически необходимо осуществление движения по ломаной, расположенной вдоль данной правильной линии. Это приводит к увеличению объема вычислений, которые связаны с уменьшением значений возникающих функционалов. Переход на неправильные линии позволяет существенно уменьшить объем вычислений.

Теорема 2. z^* – подвижная особая точка решения $y(z)$ задачи Коши (2)-(3) тогда и только тогда, когда функции $u_1(x, y)$ и $v_1(x, y)$ в некоторой области G_1 ($z^* \in G_1$) фазовых пространств Φ_1 и Φ_2 являются непрерывными относительно своих аргументов и меняют знаки при переходе через точку $z^*(x^*, y^*)$, двигаясь последовательно вдоль некоторых линий l_1 и l_2 неправильных в направлении осей OX и OY соответственно ($z^* \in l_1 \subset G_1$, $z^* \in l_2 \subset G_1$, $l_1 \in \Phi_1$, $l_2 \in \Phi_2$).

Доказательство.

I. (Необходимость). Так как z^* – подвижная особая точка решения задачи Коши (2)-(3), то, основываясь на теореме существования [Орлов, Леонтьева 2014], получаем существование некоторой окрестности G_1 точки z^* , в которой решение $y(z)$ будет определяться главной частью формулы (7):

$$y(z) = O\left(\sqrt{3/4} / \sqrt{z^* - z}\right).$$



Отсюда следует, что для решения $w_1(z)$ уравнения (5), учитывая выражение (4), в области G_1 получим:

$$w_1(z) = O(2/\sqrt{3} \cdot (z^* - z)).$$

Пусть прямая $l_1: y = \text{const}$ - неправильная линия в направлении оси Ox . При движении вдоль указанной линии l_1 , с учетом соотношений (8) и теоремы существования [Орлов, Леонтьева 2014], функция u_1 как функция одной переменной меняет знак при переходе через точку z^* .

В дальнейшем за неправильную линию в направлении оси Oy возьмем прямую $l_2: x = x^* = \text{const}$. По аналогии получаем, что для функции $v_1(x, y)$ выполняется условие - $v_1(\text{const}, y) \in C(G_1)$ и меняется знак при переходе через точку z^* . Таким образом, получаем утверждение теоремы.

II. (Достаточность). По условию теоремы имеем, что функции $u_1(x, y)$ и $v_1(x, y)$ в некоторой области G_1 ($z^* \in G_1$) фазовых пространств Φ_1 и Φ_2 являются непрерывными относительно своих аргументов и меняют знаки при переходе через точку $z^*(x^*, y^*)$, двигаясь последовательно вдоль некоторых линий l_1 и l_2 неправильных в направлении осей Ox и Oy соответственно ($z^* \in l_1 \subset G_1$, $z^* \in l_2 \subset G_1$, $l_1 \in \Phi_1$, $l_2 \in \Phi_2$). Следовательно, $w_1(z^*) = 0$ и для функции $w_1(z)$: $w_1(z) = u_1(x, y) + iv_1(x, y)$ можно предполагать существование разложения относительно $|z^* - z|$:

$$w_1(z) = (z^* - z) \sum_{n=0}^{\infty} C_n (z^* - z)^n.$$

Тогда, с учетом замены

$$w_1(z) = \frac{1}{y^2(z)},$$

получим

$$y(z) = (z^* - z)^{-1/2} / \left(\sum_{n=0}^{\infty} C_n (z^* - z)^n \right)^{1/2}.$$

z^* - подвижная особая точка функции $y(z)$.

Заключение

В статье представлены формулировки и доказательства теорем, представляющие необходимые и достаточные условия существования подвижных особых точек в комплексной области, которые являются ключевым моментом в алгоритме программы нахождения подвижных особых точек. Следует отметить, что теорема 2 предпочтительнее для алгоритма, так как минимизирует объем вычислений.

Список литературы References

1. Голубев В.В. 1950. Лекции по аналитической теории дифференциальных уравнений. 2 изд. М.-Л.,: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 436.
Golubev V.V. 1950. Lekcii po analiticheskoj teorii differencial'nyh uravnenij [Lectures on the analytic theory of differential equations]. 2 izd. M.-L: Gosudarstvennoe izdatel'stvo tehniko-teoreticheskoi literatury, 436. (in Russian)
2. Леонтьева Т.Ю. 2015. Влияние возмущения подвижной особой точки на приближенное решение одного нелинейного дифференциального уравнения второго порядка в комплексной области. Вестник Чувашского государственного педагогического университета им. И.Я. Яковлева. Серия: Механика предельного состояния, 2 (24): 109–118.
Leont'eva T.Ju. 2015. The effect of perturbation movable singular point on the approximate solution of a non-linear differential equation of second order in a complex region. Vestnik Chuvashskogo gosudarstvennogo pedagogicheskogo universiteta im. I.Ja. Jakovleva. Serija: Mehanika predel'nogo sostojanija [Bulletin of I. Yakovlev Chuvash State Pedagogical University. Series: Mechanics limit state], 2 (24): 109–118.



3. Орлов В.Н. 2006. Критерии существования подвижных особых точек решений дифференциальных уравнений Риккати. Вестник Самарского государственного университета. Естественная научная серия, 6/1 (46): 64–69.

Orlov V.N. 2006. Criteria for the existence of mobile singular points of solutions of differential equations of Riccati. Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo universiteta. Estestvennaja nauchnaja serija [Bulletin of the Samara State University. Natural science series], 6/1 (46): 64–69.

4. Орлов В.Н. 2006. Критерии существования подвижных особых точек решений второго уравнения Пенлеве. Известия Тульского государственного университета. Серия Дифференциальные уравнения и прикладные задачи, 1: 26–29.

Orlov V.N. 2006. Criteria for the existence of mobile singular points of solutions of the second Painlevé equation. Izvestija Tul'skogo gosudarstvennogo universiteta. Serija Differencial'nye uravnenija i prikladnye zadachi [News of the Tula State University. A series of differential equations and applied problems], 1: 26–29.

5. Орлов В.Н. 2008. О приближенном решении первого уравнения Пенлеве. Вестник Казанского государственного технического университета им. А.Н. Туполева, 2: 42–46.

Orlov V.N. 2008. The approximate solution of the first Painlevé equation. Vestnik Kazanskogo gosudarstvennogo tehničeskogo universiteta im. A.N. Tupoleva [Bulletin of the A. Tupolev Kazan State Technical University], 2: 42–46.

6. Орлов В.Н. 2008. Об одном методе приближенного решения матричных дифференциальных уравнений Риккати. Вестник Московского авиационного института, 15 (5): 128–135.

Orlov V.N. 2008. A method for the approximate solution of matrix differential Riccati equations. Vestnik Moskovskogo aviacionnogo instituta [Bulletin of the Moscow Aviation Institute], V. 15, 5: 128–135.

7. Орлов В.Н. 2009. Исследование приближенного решения дифференциального уравнения Абеля в окрестности подвижной особой точки. Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Серия: Естественные науки, 4 (35): 102–108.

Orlov V.N. 2009. A study of the approximate solution of Abel differential equation in the neighborhood of a singular point of a mobile. Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo tehničeskogo universiteta im. N. Je. Bauman. Serija: Estestvennye nauki [Bulletin of N. Bauman Moscow State Technical University. Series: Natural Sciences], 4 (35): 102–108.

8. Орлов В.Н. 2010. Точные границы для приближенного решения дифференциального уравнения Абеля в окрестности приближенного значения подвижной особой точки в комплексной области. Вестник Чувашского государственного педагогического университета им. И.Я. Яковлева. Серия: Механика предельного состояния, 2 (8): 399–405.

Orlov V.N. 2010. The precise boundaries for the approximate solution of Abel differential equation in the neighborhood of the approximate value of the movable singular point in the complex domain. Vestnik Chuvashskogo gosudarstvennogo pedagogičeskogo universiteta im. I. Ja. Jakovleva. Serija: Mehanika predel'nogo sostojanija [Bulletin of I. Yakovlev Chuvash State Pedagogical University. Series: Mechanics limit state], 2 (8): 399–405.

9. Орлов В.Н. 2011. Об одном точном критерии существования подвижной особой точки решений скалярного и матричного дифференциальных уравнений Риккати. Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Физика. Математика, 1: 209–213.

Orlov V.N. 2011. On the exact criteria for the existence of mobile singular points of solutions of scalar and matrix Riccati differential equations. Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Serija: Fizika. Matematika [Bulletin of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics], 1: 209–213.

10. Орлов В.Н., Гузь М.П. 2013. Точные критерии существования подвижных особых точек решения одного нелинейного обыкновенного дифференциального уравнения. Вестник Чувашского государственного педагогического университета им. И.Я. Яковлева, ч. 2 4 (80): 156–161.

Orlov V.N., Guz' M.P. 2013. The exact criteria for the existence of mobile singular points of solutions of nonlinear ordinary differential equation. Vestnik Chuvashskogo gosudarstvennogo pedagogičeskogo universiteta im. I. Ja. Jakovleva [Bulletin of I. Yakovlev Chuvash State Pedagogical University], p. 2, 4 (80): 156–161.

11. Орлов В.Н., Леонтьева Т.Ю. 2013. Исследование влияния возмущения начальных данных на приближенное решение одного нелинейного дифференциального уравнения в области голоморфности. Вестник Филиала Российского государственного социального университета в г. Чебоксары, 2 (29): 147–150.

Orlov V.N., Leont'eva T. Ju. 2013. Investigation of the effect of the perturbation of the initial data on the approximate solution of a nonlinear differential equation in a domain of holomorphy. Vestnik Filiala Rossijskogo gosudarstvennogo social'nogo universiteta v g. Cheboksary [Bulletin of the branch of the Russian State Social University in Cheboksary], 2 (29): 147–150.

12. Орлов В.Н., Леонтьева Т.Ю. 2013. Построение приближенного решения одного нелинейного дифференциального уравнения второго порядка в области голоморфности. Вестник Чувашского государственного педагогического университета им. И.Я. Яковлева. Серия: Механика предельного состояния, 4 (80), Ч. 2: 162–167.

Orlov V.N., Leont'eva T. Ju. 2013. Construction of the approximate solution of a nonlinear second-order differential equation in a domain of holomorphy. Vestnik Chuvashskogo gosudarstvennogo pedagogičeskogo universiteta im. I. Ja. Jakovleva. Serija: Mehanika predel'nogo sostojanija [Bulletin of I. Yakovlev Chuvash State Pedagogical University. Series: Mechanics limit state], 4 (80), p. 2: 162–167.

13. Орлов В.Н., Леонтьева Т.Ю. 2014. Построение приближенного решения одного нелинейного дифференциального уравнения второго порядка в окрестности подвижной особой точки в комплексной области. Вестник Чувашского государственного педагогического университета им. И.Я. Яковлева. Серия: Механика предельного состояния, 4 (22): 157–166.



Orlov V.N., Leont'eva T.Ju. 2014. Construction of the approximate solution of a nonlinear second-order differential equations in the neighborhood of a singular point of a mobile in a complex region. Vestnik Chuvashskogo gosudarstvennogo pedagogicheskogo universiteta im. I.Ja. Jakovleva. Serija: Mehanika predel'nogo sostojanija [Bulletin of I. Yakovlev Chuvash State Pedagogical University. Series: Mechanics limit state], 4 (22): 157–166.

14. Орлов В.Н., Леонтьева Т.Ю. 2016. О точных границах области применения приближенного решения одного класса нелинейных дифференциальных уравнений 2 порядка в окрестности приближенного значения подвижной особой точки в комплексной области. Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Физика. Математика, 4: 142–151.

Orlov V.N., Leont'eva T.Ju. 2016. On the exact boundaries of the application of the approximate solution of a class of nonlinear differential equations of order 2 in the vicinity of the approximate value of the movable singular point in a complex region. Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Serija: Fizika. Matematika [Bulletin of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics], 4: 142–151.

15. Орлов В.Н., Хмара П.В., Сейтвелиева Т.Б. 2016. Необходимые и достаточные условия существования подвижных особых точек одного класса нелинейных дифференциальных уравнений. Нелинейный мир. Издательство Радиотехника, Т. 14, 7: 31–35.

Orlov V.N., Hmara P.V., Sejtvelieva T.B. 2016. Necessary and sufficient conditions for the existence of mobile singular points of a class of nonlinear differential equations. Nelinejnyj mir. Izdatel'stvo Radiotekhnika [The nonlinear world. Publisher Radio engineering], V. 14, 7: 31–35.

16. Редкозубов С.А., Орлов В.Н. 2009. Точные критерии существования подвижной особой точки дифференциального уравнения Абеля. Известия института инженерной физики, 4 (14): 12–14.

Redkozubov S.A., Orlov V.N. 2009. The exact criteria for the existence of mobile singularity Abel differential equation. Izvestija instituta inzhenernoj fiziki [Proceedings of the Institute of Engineering Physics], 4 (14): 12–14.



УДК 519.6

ЗАДАЧА СИНТЕЗА ТЕРМИНАЛЬНОЙ СЕТИ НА ГРАФЕ

TERMINAL NETWORK SYNTHESIS PROBLEM ON A GRAPH

М.М. Бухурова
M.M. Bukhurova

Институт прикладной математики и автоматизации, Россия, 360000, г. Нальчик, ул. Шортанова, д. 89А

Institute of Applied Mathematics and Automation, 89 A, Shortanov St, Nalchik, 360000, Russia

E-mail:mareta.bukhurova@mail.ru

Аннотация

В работе рассматривается задача синтеза терминальной сети на графе, которая является многоэкстремальной и решается методом динамической декомпозиции, сводящий процесс оптимизации сети к оптимизации ее частей. Сформулирован системный принцип оптимальности для терминальной сети с одним источником, дано определение p -оптимальной сети и проведены вычислительные эксперименты на графах, имеющих регулярную структуру и одни и те же нормативные данные в узлах и на ветвях.

Abstract

We consider the problem of synthesis of terminal network on the graph, which is multiextremal and is solved by a dynamic of decomposition, which reduces the network optimization process to optimize its parts. Formulated system optimality principle for terminal network with a single source, a definition of the p -optimal network and performed computational experiments on columns having a regular structure and the same normative data in nodes and branches.

Ключевые слова: задача синтеза, терминальная сеть, граф, метод динамической декомпозиции, принцип оптимальности.

Keywords: synthesis problem, terminal network, graph, dynamic method of decomposition, the principle of optimality.

Введение

Реально функционирующие системы содержат наряду с непрерывной средой, локализованными в пространстве элементами, еще и каналы, по которым транспортируется вещество, энергия, информация и выносятся из системы продукты распада. Вследствие этого задачи оптимального определения конфигурации сети каналов и их параметров являются актуальными с математической и прикладной точек зрения.

Математическая теория сетей начинается с работ Л. Эйлера, Я. Штейнера, Г. Кирхгофа [1]. В работах Р. Прима и И. Краскала построены эффективные алгоритмы определения кратчайшей связывающей сети [2]. Е. Дейкстра разработал алгоритм построения кратчайшего маршрута на взвешенном графе между заданными вершинами. Сетевая задача с вогнутой целевой функцией практически эффективно решена В.П. Булатовым, Л.И. Касинской [3] и В.А. Трубиным [4]. Решения В.П. Булатова и Л.И. Касинской основаны на методе Хоанг Туя [5], решения В.А. Трубина – на методе ветвей и границ.

Следует отметить, что направление решения задач синтеза сетей связано со стремлением свести задачи синтеза сети к обобщенной задаче Штейнера. Для этого решается вначале задача оптимизации параметров ветвей сети на заданной конфигурации (задача оптимизации параметров – «хорошая» задача минимизации выпуклой функции при линейных (сетевых) ограничениях), а затем путем вариации положения точек ветвления сети (точек Штейнера) эта конфигурация оптимизируется.

Постановка задачи

При решении сетевой задачи Штейнера на первом этапе решается не содержащая точек Штейнера задача синтеза терминальной сети с одним источником [6].

Данная задача состоит в следующем:



$$\begin{cases} z = \sum_{ij \in D} c_{ij}(v_{ij})l_{ij} \rightarrow \min, \\ \sum_{i \in \Gamma_j^+} v_{ij} - \sum_{k \in \Gamma_j^-} v_{jk} = g_j, \forall j_{\neq 1} \in B; \sum_{j \in \Gamma_i^-} v_{ij} = \sum_{i \in B} g_i = Q_1, \\ v_{ij} \geq 0, \forall ij \in D, \end{cases} \quad (1)$$

$$\sum_{i \in \Gamma_j^+} v_{ij} - \sum_{k \in \Gamma_j^-} v_{jk} = g_j, \forall j_{\neq 1} \in B; \sum_{j \in \Gamma_i^-} v_{ij} = \sum_{i \in B} g_i = Q_1, \quad (2)$$

$$v_{ij} \geq 0, \forall ij \in D, \quad (3)$$

где: $\Gamma(B, D)$ – заданный конечный, связный, вообще говоря, двузвенный орграф, моделирующий возможные соединения узлов (вершин) сети друг с другом; B и D – множества его вершин и дуг; v_{ij}, c_{ij}, l_{ij} , – соответственно искомое значение потока по ij – ой дуге (ветви) сети, его удельная (на единицу длины) стоимость и заданная длина ветви; Q_1, g_j – заданный поток в сеть, заданный расход потока в j – ом узле (вершине) сети соответственно.

Целевая функция (1) отражает стоимость сети. Ограничения (2), (3) учитывают законы теории сетей и требования по обеспечению потребителей сети потоками.

Задача является существенно многоэкстремальной и относится к классу полиномиально неразрешимых задач. Сложность состоит в том, что задача, во-первых, комбинаторная – экстремумы могут достигаться только в угловых точках транспортного многогранника (2), (3), вершинам многогранника, как известно, соответствуют базисные решения системы (2), (3). Эта система содержит $(n-1)$ линейно-независимых уравнений (n – количество вершин сети) и, следовательно, количество положительных переменных равно $(n-1)$. Во-вторых, в каждой угловой точке в процессе направленного перебора приходится решать не расчетную, а оптимизационную задачу (выпуклого программирования при линейных ограничениях).

Для задачи (1) – (3) имеет место следующий принцип.

Принцип оптимальности

а) Найдется остов T графа $\Gamma(B, D)$ и соответствующее ему базисное решение задачи

$\{v_{ij}^*\}_{ij \in D}$, $(v_{ij}^* = 0 \text{ } ij \notin T)$, такое, что

$$\min \sum_{ij \in D} c_{ij}(v_{ij})l_{ij} = \sum_{ij \in T} c_{ij}(v_{ij}^*)l_{ij}.$$

б) Пусть T' – любая связная часть T , $\Gamma(T')$ – граф, порожденный на графе $\Gamma(B, D)$ графом T' . Тогда:

$$\min \sum_{ij \in D} c_{ij}(v_{ij})l_{ij} = \sum_{ij \in D} c_{ij}(v_{ij}^*)l_{ij},$$

где $v_{ij} = v_{ij}^* \forall ij \notin \Gamma(T')$.

Условие а) сводит процесс оптимизации сети к перебору решений, соответствующих остовным деревьям графа $\Gamma(B, D)$. Однако даже направленный перебор таких решений неосуществим в силу их большого количества, растущего экспоненциально от числа вершин и дуг графа $\Gamma(B, D)$, и необходимости решать на каждом из них задачу выпуклого программирования с линейными ограничениями. Для преодоления этого препятствия можно использовать утверждение б), сводящее оптимизацию сети к оптимизации ее частей.

Поскольку оптимумы соответствуют вершинам транспортного многогранника, а им, в свою очередь, остовы графа $\Gamma(B, D)$, то будем использовать метод направленного перебора угловых точек

– симплекс метод, но в сетевой интерпретации. Пусть T – некоторое текущее дерево сети. Продвижению из текущей угловой точки в смежную соответствуют внесение в текущее остовное дерево некоторой хорды e из $\Gamma(B, D)$ и удаление инцидентной ей дуги. При этом изменяются потоки только по дугам контура K , замыкаемого хордой e на дереве T . Фиксируем лучшее решение, переходим к следующему контуру. Модификация структуры сети продолжается до тех пор, пока уже ни на одном контуре текущего дерева невозможно будет получить лучшего решения. Полученное при этом решение будет 1-оптимальное решение первого ранга.

Назовем p -оптимальным такое решение задачи (1) – (3), которое нельзя улучшить внеся в остовное дерево, соответствующее решению, любые p хорд и удалив из него соответствующие им p дуг.

P -оптимальное решение обеспечивает глобально-оптимальное решение на множестве симплексов транспортного многогранника (2), (3), которые имеют смежность в промежутке $[1, p]$ к симплексу, вершиной которого является p -оптимальное решение.

В настоящее время разработаны алгоритмы генерации и оптимизации подграфов графа возможных соединений вершин сети, которые соответствуют второму рангу оптимальности. Ниже представлены структуры терминальных сетей первого и второго ранга оптимальности.

Чтобы исключить влияние иных факторов – структуру графа и параметров узлов сети (нормативный расход и напор воды, длины ветвей сети), вычислительные эксперименты проводились на графах, имеющих регулярную структуру и одни и те же нормативные данные в узлах и на ветвях. В качестве таких графов были выбраны геометрические графы, каждый элементарный контур которых является квадратом (см. рисунок).

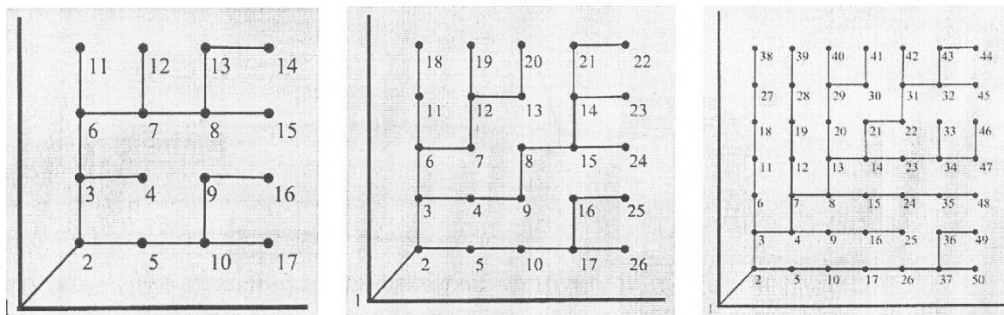
Сети первого ранга оптимальности, как видно из рисунка, не имеют регулярной структуры: их вид существенно меняется в зависимости от размерности графа сети. Это говорит о необходимости построения решений более высокого ранга оптимальности. Сети второго ранга оптимальности уже обладают регулярной структурой.

Дальнейшее увеличение рангов оптимизируемых структур не приводит к существенному уменьшению значения целевой функции.

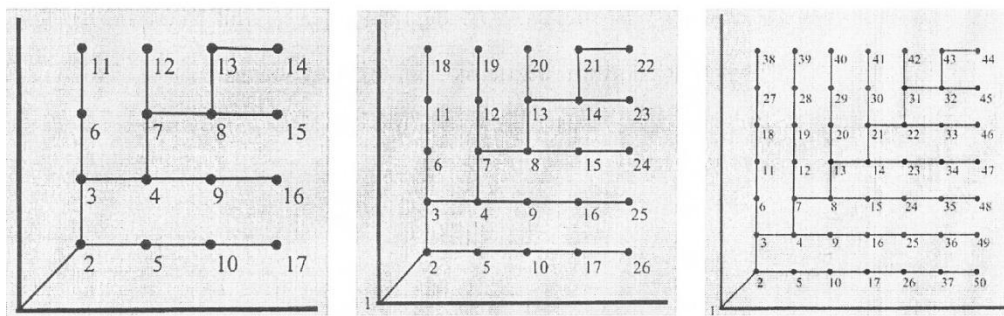
Заключение

Сформулирован системный принцип оптимальности для терминальной сети с одним источником, дано определение p -оптимальной сети и проведены вычислительные эксперименты на графах, имеющих регулярную структуру и одни и те же нормативные данные в узлах и на ветвях.

Структуры сетей 1-го ранга оптимальности



Структуры сетей 2-го ранга оптимальности



Список литературы References

1. Кристофидес Н. 1978. Теория графов. М., Мир.
Kristofides N. 1978. Teoriya grafov [Graph theory]. Moscow, Mir.
2. Прим Р.К. 1961. Кратчайшие связывающие сети и некоторые обобщения, Кибернетический сборник, (2). 95-107.
Prim R.K. 1961. Cratchaishie svyazyvayushie seti i nekotorye obobsheniya [Shortest connecting networks and some generalizations]. Cybernetic collection.
3. Булатов В.П., Кассинская Л.И. 1987. Некоторые методы минимизации вогнутой функции на выпуклом многограннике, Методы оптимизации и их приложения. Иркутск, СЭИ СО АН СССР, 151-172.
Bulatov V.P., Kassinskaya L.I. 1987. Nekotorye metody minimizatsii vognutoy functsii na vypuklom mnogogrannike [Some methods for minimizing a concave function on a convex polyhedron]. Optimization methods and their applications. Irkutsk: SEI SB AS USSR.
4. Трубин В.А. 1982. Свойства и методы решения оптимального синтеза сетей. Киев: Общество «Знание» УССР. 23с.



Trubin V.A. 1982. Svoistva i metody resheniya optimalnogo sinteza setey [Properties and methods for solving optimal network synthesis]. Kiev, Society "Knowledge" of the Ukrainian SSR.

5. Туй Х. 1964. Вогнутое программирование при линейных ограничениях, Доклады АН СССР, 159(1): 32-35.

Tui Kh. 1964. Vognutoe programmirovaniye pri lineinykh ogranicheniyah [Concave Programming with Linear Constraints]. Reports of the Academy of Sciences of the USSR.

6. Кудаев В.Ч., Багов М.А. 2015. Преобразование терминальной сети в сеть Штейнера. Нальчик, Известия КБНЦ РАН, 6 (68): 31-37.

Kudaev V.Ch., Bagov M.A. 2015. Preobrazovanie terminalnoi seti v set Steynera [Transformation of a terminal network into a Steiner network]. Nalchik. The News of KBSC of RAS.



ФИЗИКА PHYSICS

УДК 517.987

РАЗЛОЖЕНИЕ ПО ДЛИННОМУ РАДИУСУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В РАВНОВЕСНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ ОДНОАТОМНЫХ ГАЗОВ

EXPANSION ON LONG RADIUS OF INTERACTION IN THE EQUILIBRIUM STATISTICAL MECHANICS OF MONATOMIC GASES

Ю.П. Вирченко, Л.П. Данилова
Yu.P. Virchenko, L.P. Danilova

Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

Belgorod National Research University, 85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia

E-mail: virch@bsu.edu.ru;

Аннотация

В работе, на основе вириального разложения давления в равновесной статистической механике одноатомных газов, посредством суммирования графиком Майера, которые дают главный вклад в асимптотике, когда «малый параметр» – обратный радиус потенциала парного взаимодействия между атомами стремится к нулю, найдена формула для точки фазового перехода газ-жидкость.

Abstract

On the basis of the virial expansion of the pressure, in frameworks of equilibrium statistical mechanics of monatomic gases, it is found the formula of gas-liquid phase transition point. It is done by the summation of those Mayer graphs which give the main contribution to the asymptotics when the "small parameter" being the inverse radius of the pair interaction potential between atoms tends to zero.

Ключевые слова: производящая функция, графики Майера, древесные графы, радиус взаимодействия, потенциал взаимодействия, уравнение состояния, вириальное разложение.

Keywords: generation function, Mayer's graphics, tree graphs, interaction radius, potential interaction, equation of state, virial expansion.

Введение

Исследование газа одноатомных молекул малой плотности в рамках равновесной статистической механики, в частности, вычисление его уравнения состояния, под которым понимается выражение давления газа как функции от его плотности ρ и температуры T , осуществляется на основе так называемого вириального разложения, которое ввел в рассмотрение Камерлинг Оннес [1, 2]. Это разложение представляет собой разложение давления газа $P(\rho, T)$ в степенной ряд по его плотности ρ ,

$$P / T = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \rho^n. \quad (1)$$

Здесь T – абсолютная температура газа, выраженная в энергетических единицах. Коэффициенты c_n , $n \in \mathbb{N}$ вычисляются на основе последовательности коэффициентов β_n , $n \in \mathbb{N}$, которые определяют следующие групповые разложения давления и плотности в степенные ряды по параметру Z , который в теории газов называется активностью,

$$P / T = \sum_{n=1}^{\infty} z^n \beta_n(T), \quad (2)$$

$$\rho = \sum_{n=1}^{\infty} n z^n \beta_n(T). \quad (3)$$



Последовательности функций $\beta_n(T)$ от температур при $n \geq 2$ вычисляются явно на основе так называемых групповых интегралов:

$$\beta_n = \frac{V^{-1}}{n!} \int_{\Omega^n} \sum_{\Gamma_n} \prod_{\{i,j\} \in \Psi} (e^{-\Phi(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)/T} - 1) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_n, \quad (4)$$

где $\Phi(\mathbf{q})$ – парный потенциал взаимодействия между молекулами, Ω – ограниченная область в $\mathbb{R}^3$ расположения молекул газа (сосуд), а V – ее объем; суммирование в представленной формуле осуществляется по всем связанным графам $\Gamma_n = \langle I_n, \Psi \rangle$ с помеченными n вершинами, а произведение осуществляется по ребрам каждого такого фиксированного графа. В групповых разложениях (2), (3) функция $\beta_1 \equiv 1$. Точно также в вириальном разложении (1) коэффициент $c_1 = 1$.

Считается, что подход к исследованию системы большого числа одноатомных молекул в рамках статистической механики обеспечивает адекватное описание состояния такой системы при любых значениях интенсивных термодинамических параметров T и ρ . В частности, такой подход должен с теоретической точки зрения описывать фазовые превращения, происходящие в такой системе, а именно, конденсацию газа в жидкое состояние при понижении температуры и затем, при дальнейшем ее понижении, отвердевание жидкости. Однако, несмотря на это теоретическое положение, его конкретная математическая реализация оказывается чрезвычайно сложной. Такая ситуация усматривается уже из того, что при таких фазовых превращениях, при каждом из которых происходит скачок плотности (переход 1 рода), если рассматривать ее как функцию от P и T , или, что то же самое, появление в зависимости $P(\rho, T)$ такого интервала значений плотности, на котором давление оказывается неизменным. Это означает, что функция $P(\rho, T)$ не является аналитической и не может быть получена как аналитическое продолжение какой-либо аналитической функции. Тогда получается, что аналитическая функция, получаемая аналитическим продолжением той, которая определяется вириальным разложением (1), не должна иметь никакого отношения к описанию термодинамического состояния рассматриваемой нами системы большого числа частиц в области всех возможных значений ρ и T .

Описанное противоречие известно довольно давно и изложено в работе [3]. Его объяснение было дано в теории конденсации, предложенной Ли и Янгом [4]. Действительно, уравнение состояния $P(\rho, T)$ не является аналитическим продолжением ряда (1), радиус сходимости которого оказывается даже гораздо меньше, чем значение ρ , при котором возможно появление точки фазового перехода (конденсации газа) [2]. Однако реальное уравнение состояния $P(\rho, T)$ может получаться как предел последовательности аналитических функций при так называемом термодинамическом предельном переходе. Этот математический механизм появления фазового перехода связан с поведением нулей так называемой статистической суммы на комплексной плоскости активности Z . Факт его реализации в рамках формализма статистической механики продемонстрирован на примере системы т. н. решеточного газа в работе [5]. В общем же случае, непонятно, на основе какого математического формализма возможно аналитическое исследование фазовых переходов первого рода в рассматриваемой системе большого числа частиц.

В настоящей работе делается попытка найти аналитический подход к изучению фазовых переходов типа конденсации газа в жидкое состояние на основе идеи, связанной с погружением рассматриваемой системы в последовательность похожих на нее систем, у которых потенциал взаимодействия молекул параметризован таким образом, что при некотором фиксированном значении параметра получается рассматриваемая система, а при стремлении этого параметра к какому-то исключительному значению получается система, которая допускает прямое аналитическое изучение и в которой проявляется интересующий нас фазовый переход. Эта общая идея продиктована тем, что в примере, указанном выше, система заведомо обладает фазовым переходом и, вместе с тем, решеточный газ можно рассматривать как приближение к реальной системе одноатомных молекул с «непрерывным» фазовым пространством. Такое приближение, по-видимому, может быть описано формальным предельным переходом по последовательности однотипных систем одноатомных молекул, у которых потенциал взаимодействия имеет дополнительный параметр, при стремлении которого к некоторому предельному значению происходит фиксация пространственных положений в $\mathbb{R}^3$ каждой из молекул в узлах периодической решетки $Z^3 \subset \mathbb{R}^3$. Несмотря на то, что получаемая при таком предельном переходе система решеточного газа все еще очень



сложна для прямого аналитического изучения, она уже является гораздо более простой с аналитической точки зрения, чем исходная система.

Подтверждением возможности реализации такой идеи служат работы [6], где было показано, что в одномерной геометрии система, изучаемая в настоящей работе, при наличии «твердой сердцевин» у потенциала взаимодействия молекул, проявляет фазовый переход газа в жидкое состояние в пределе, когда радиус взаимодействия молекул устремляется к бесконечности. В месте с тем, этот пример указывает и на то, что предложенная выше общая идея может приводить к неправильным результатам. А именно, несмотря на наличие фазового перехода у предельной системы, такой фазовый переход может отсутствовать у исходной системы, так как известно, как на основании общефизических [7], так и чисто математических рассуждений [2], что в одномерной геометрии, фазовые переходы первого рода невозможны. Тем не менее, если описанную аналитическую возможность удалось бы реализовать для физически реальной системы, то на следующем этапе развития теории можно поискать математически строгие критерии применимости или неприменимости метода исследования, основанного на предельном переходе по дополнительному параметру.

Известно, что переход к бесконечному пределу радиуса взаимодействия был реализован в трехмерной геометрии для моделей физических систем многих частиц, которые аналогичны системе решеточного газа [8], [9]. В настоящей работе мы, следуя основной идее параметризации потенциала взаимодействия исследуемой системы и рассматривая совокупность однотипных потенциалов с различным радиусом взаимодействия с последующим переходом к пределу бесконечного радиуса, рассмотрим с этой точки зрения систему одноатомных молекул с потенциалом $\Phi(\mathbf{q})$, не содержащим твердой сердцевин [10]. Вместо этого, мы будем предполагать, что

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Phi(\mathbf{q})| d\mathbf{q} < \infty. \quad (5)$$

Однако для того, чтобы потенциал такого типа не приводил к появлению термодинамической неустойчивости, мы потребуем, согласно результату работы [11], чтобы

$$\nu = \int_{\mathbb{R}^3} \Phi(\mathbf{q}) d\mathbf{q} > 0. \quad (6)$$

В процессе исследования мы будем пользоваться следующими выражениями для коэффициентов $c_n, n \in \mathbb{N}$, указанными в работе [3] и найденными прямым вычислением в нашей работе [12]:

$$c_n = -\frac{(n-1)\gamma_n(T)}{n(n-2)!}, \quad n \geq 2, \quad (7)$$

где $\gamma_n(T)$ определяются формулой, аналогичной (4):

$$\gamma_n(T) = \frac{1}{V} \int_{\Omega^n} \sum_{\Gamma_n}^* \prod_{\{i,j\} \in \Psi} (e^{-\Phi(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)/T} - 1) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_n, \quad (8)$$

но, в отличие от нее, суммирование в формуле (8) должно производиться по всем графикам Майера без вершин сочленения, которые в работе [13] называются также блоками.

В этой работе мы будем считать, следуя основной идее работ [6], что потенциал взаимодействия $\Phi(\mathbf{q})$ заменяется посредством явного введения параметра λ , который по своему физическому смыслу является обратным радиусом взаимодействия, на следующий $\lambda^3 \Phi(\lambda \mathbf{q})$. Тогда параметр λ входит в выражение для каждого из коэффициентов $\beta_n(T)$, $\gamma_n(T)$, c_n , и поэтому мы будем записывать их в виде $\beta_n(T, \lambda)$, $\gamma_n(T, \lambda)$, $c_n(\lambda)$, соответственно. Целью вычислений в этой работе является нахождение асимптотического выражения уравнения состояния на основе вириального разложения (1) при стремлении радиуса взаимодействия к бесконечности $\lambda \rightarrow 0$.

2. Асимптотическая формула для коэффициентов $\gamma_n(T)$ при $\lambda \rightarrow 0$

Формулы для коэффициентов c_j , которые выражают их через групповые интегралы β_j , $j \in \mathbb{N}$, справедливы для любого линейного размера сосуда, содержащего газ. Однако так как реально эти линейные размеры намного превосходят среднее расстояние между атомами газа, то в статистической механике основной интерес представляет их асимптотические выражения при стремлении указанного линейного размера к бесконечности. Такой предельный переход называется



ся *термодинамическим пределом*. Его точное математическое определение нуждается в уточнении, на котором мы здесь не останавливаемся [3]. Здесь мы будем понимать этот предельный переход в рамках простейшего из возможных его определений. А именно, будем полагать, что система частиц заключена в кубический сосуд с размером L . Тогда предельный переход состоит в неограниченном увеличении $L \rightarrow \infty$. Именно при переходе к термодинамическому пределу $\Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ между коэффициентами β_j и γ_j возникают алгебраические соотношения, которые приводят, в результате, к формуле (7). Они получаются на основе формулы, выражающей вклад в коэффициент $\beta_n(T)$ от фиксированного графика Майера Γ_n с n вершинами через интегралы от выражений, составленных на основе вкладов от графиков Майера без вершин сочленения, которые составляют график Γ_n посредством склеек по его вершинам сочленения. Для получения этой формулы сопоставим каждому связному графу $\Gamma_n = \langle I_n, \Psi \rangle$ с n помеченными вершинами число

$$\beta(\Gamma_n) = \int_{(\mathbb{R}^3)^{n-1}} \left(\prod_{\{i,j\} \in \Psi} U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \right) d\mathbf{Q}_{n-1}, \quad (9)$$

где $d\mathbf{Q}_{n-1} = d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_{n-1}$ и введены функции Урселла [2]:

$$U(\mathbf{q}) = \exp(-\Phi(\mathbf{q})/T) - 1. \quad (10)$$

Если связный граф $\Gamma_n = \langle I_n, \Psi \rangle$ не имеет вершин сочленения, то число $\beta(\Gamma_n)$ будем обозначать посредством $\gamma(\Gamma_n)$. Тогда формулы связи коэффициентов $\beta_n(T)$ с коэффициентами $\gamma_l(T)$, $l = 2 \div n$ получаются на основе следующего утверждения.

Теорема 1. Пусть связный граф Γ_n склеен из блоков $\Gamma^j = \langle V_j, \Psi_j \rangle$, $j = 1 \div s$, $s > 1$ по непустому множеству $\bigcup_{\{i,j\} \in I_s^{(2)}} (V_i \cap V_j)$ вершин сочленения, где $\Psi_i \cap \Psi_j = \emptyset$ и каждое пересечение $V_i \cap V_j$ либо одноэлементно, либо пусто. Тогда имеет место формула

$$\beta(\Gamma) = \prod_{j=1}^s \gamma(\Gamma^j). \quad (11)$$

Доказательство проводим индукцией по s . При $s = 1$ формула (11) имеет место по определению, $\gamma(\Gamma_n) = \beta(\Gamma_n)$. Заметим теперь, что из определения (9) следует, что в том случае, когда фиксируется некоторая вершина графа Γ_n (не ограничивая общности можно считать, что таковой является вершина с номером n), то число $\beta(\Gamma_n)$ выражается формулой

$$\beta(\Gamma_n) = \int_{(\mathbb{R}^3)^{n-1}} \left(\prod_{\{j,n\} \in \Psi} U(\mathbf{q}_i) \right) \left(\prod_{\{i,j\} \in \Psi, j \neq n} U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \right) d\mathbf{Q}_{n-1}, \quad (12)$$

которая получается после замены переменных $\mathbf{q}_k - \mathbf{q}_n \Rightarrow \mathbf{q}_k$, $k = 1 \div n-1$ в формуле (9).

Пусть формула (11) верна для какого-то значения s числа блоков в графе Γ_n . Рассмотрим теперь любой связный граф Γ_n , в котором имеется $s+1$ блок и пусть, не ограничивая общности, n -я вершина является вершиной сочленения. Тогда существует блок $\bar{\Gamma}^{s+1} = \langle V_{s+1}, \bar{\Psi}_{s+1} \rangle$ в этом графе, который содержит эту вершину, $n \in V_{s+1}$, и имеет место следующая формула склейки графа Γ_n [13]:

$$\Gamma_n = \Gamma'_n \vee \bar{\Gamma}^{s+1}, \quad (13)$$

где $\Gamma'_n = \langle V', \Psi' \rangle$, $V' \cap V_{s+1} = \{n\}$, $\Psi' \cap \bar{\Psi}_{s+1} = \emptyset$.

Запишем формулу (12) в виде



$$\beta(\Gamma_n) = \int_{(\mathbb{R}^3)^{|V|-1}} \left(\prod_{\{i,j\} \in \Psi'} U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \right) \left(\prod_{k \in V' \setminus \{n\}} d\mathbf{q}_k \right) \int_{(\mathbb{R}^3)^{|V_{s+1}|-1}} \left(\prod_{\{i,j\} \in \Psi_{s+1}} U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \right) \left(\prod_{k \in V_{s+1} \setminus \{n\}} d\mathbf{q}_k \right),$$

так как $|V'| - 1 + |V_{s+1}| = n$.

Произведем в первом интеграле из этого произведения замену переменных интегрирования $\mathbf{q}_k - \mathbf{q}_n \Rightarrow \mathbf{q}_k$, $k \in V_{s+1} \setminus \{n\}$. Тогда

$$\begin{aligned} \beta(\Gamma_n) &= \int_{(\mathbb{R}^3)^{|V|-1}} \left(\prod_{\{i,j\} \in \Psi'} U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \right) \left(\prod_{k \in V' \setminus \{n\}} d\mathbf{q}_k \right) \times \\ &\times \int_{(\mathbb{R}^3)^{|V_{s+1}|-1}} \left(\prod_{\{i,n\} \in \Psi_{s+1}} U(\mathbf{q}_i) \right) \left(\prod_{\{i,j\} \in \Psi_{s+1}, i,j \neq n} U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \right) \left(\prod_{k \in V_{s+1} \setminus \{n\}} d\mathbf{q}_k \right) = \\ &= \int_{(\mathbb{R}^3)^{|V|-1}} \left(\prod_{\{i,j\} \in \Psi'} U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \right) \left(\prod_{k \in V' \setminus \{n\}} d\mathbf{q}_k \right) \beta(\Gamma_{s+1}) = \beta(\Gamma') \beta(\Gamma^{s+1}), \end{aligned}$$

где мы воспользовались тем, что после указанной замены переменных интеграл в первом сомножителе не зависит от $\mathbf{q}_n$ и, следовательно, от переменных интегрирования второго сомножителя.

Остается воспользоваться определением $\beta(\Gamma^{s+1}) = \gamma(\Gamma^{s+1})$, так как граф Γ^{s+1} не имеет вершин сочленения. Так как граф Γ' имеет s блоков, и поэтому для него справедлива, по предположению индукции, формула (11), то из полученного равенства $\beta(\Gamma_n) = \beta(\Gamma') \gamma(\Gamma^{s+1})$ следует, что для графа Γ_n эта формула также справедлива.

Так как основной заявленной целью работы является вычисление асимптотического представления уравнения состояния при $\lambda \rightarrow 0$, то для его осуществления на основе вириального разложения (1), нужно найти главные члены асимптотик каждого из коэффициентов $\gamma_n(T, \lambda)$ при $\lambda \rightarrow 0$. Перейдем к нахождению этих асимптотических формул. С этой целью найдем асимптотики при $\lambda \rightarrow 0$ каждого из интегралов, связанного с фиксированным графиком Майера без вершин сочленения. Произведем замену переменных интегрирования $\lambda \mathbf{q}_j \Rightarrow \mathbf{q}_j$, $j = 1 \div n-1$. Тогда выражение для фиксированного графика Майера Γ_n без вершин сочленения имеем, на основании формулы (12),

$$\beta(\Gamma_n) = \lambda^{-3(n-1)} \int_{(\mathbb{R}^3)^{n-1}} \left(\prod_{\{j,n\} \in \Psi} U(\mathbf{q}_i, \lambda) \right) \left(\prod_{\{i,j\} \in \Psi', i,j \neq n} U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j, \lambda) \right) d\mathbf{Q}_{n-1}, \quad (14)$$

где, согласно формуле (10),

$$U(\mathbf{q}, \lambda) = \exp(-\lambda^3 \Phi(\mathbf{q}) / T) - 1. \quad (15)$$

Главные члены асимптотического разложения для функций Урселла $U(\mathbf{q}, \lambda)$ при $\lambda \rightarrow 0$ имеют вид

$$U(\mathbf{q}, \lambda) = -\lambda^3 (\Phi(\mathbf{q}) / T) (1 + o(1)),$$

так как для потенциала $\Phi(\mathbf{q})$ имеет место (5). Тогда

$$\beta(\Gamma_n) = \lambda^{3(l(\Gamma'_n) + s_n - n + 1)} \left(-\frac{1}{T} \right)^{l(\Gamma_n)} \int_{\mathbb{R}^{3(n-1)}} \left(\prod_{\{j,n\} \in \Psi} \Phi(\mathbf{q}_i) + o(1) \right) \left(\prod_{\{i,j\} \in \Psi', i,j \neq n} \Phi(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) + o(1) \right) d\mathbf{Q}_{n-1},$$

где $l(\Gamma_n)$ и $l(\Gamma'_n)$ – числа ребер соответственно в графике Γ_n и графике Γ'_n , который получается из Γ_n вырезанием вершины n с инцидентными ей ребрами, а s_n – степень вершины n . Из этой формулы следует, что графики класса $\mathbf{G}_0$ с n вершинами, у которых $l(\Gamma'_n) + s_n = n - 1$, приводят к членам асимптотического разложения коэффициентов $\gamma_n(T, \lambda)$, которые не зависят от λ . Первую поправку к этим членам, пропорциональную λ^3 , составляют графики класса $\mathbf{G}_1$, у которых



$l(\Gamma'_n) + s_n = n$. Будем считать, что поправку следующего порядка будут составлять графики класса G_2 , для которых $l(\Gamma'_n) + s_n = n + 1$ и т. д., а аналитические выражения, которые сопоставляются каждому графику, независимо от того, к какому классу мы его относим, имеют вид (14). Это означает, что при построении любого из приближений мы не будем раскладывать по степеням малого параметра λ подынтегральное выражение в формуле (14). Каждое из приближений полностью регулируется выбором класса тех графиков, которые учитываются в этом приближении.

3. Приближение длинного радиуса взаимодействия

В этом разделе мы опишем класс G_0 . Это позволит вычислить уравнение состояния $P(\rho, T)$ в нулевом приближении, которое мы будем называть приближением длинного радиуса взаимодействия. Докажем следующее утверждение.

Теорема 2. Класс G_0 состоит из одного связного графика с $n = 2$.

Допустим в классе G_0 имеется график Γ_n с $n > 2$. Этот график является связным и не имеет вершин сочленения. Тогда соответствующий ему график Γ'_n содержит не менее двух вершин. Он является связным, так как в противном случае в графике Γ_n вершина с номером n была бы вершиной сочленения. Более того, график Γ'_n не имеет концевых вершин, так как в противном случае присутствующая в нем концевая вершина должна быть также концевой в исходном графике Γ_n и, следовательно, в графике Γ_n должна находиться вершина сочленения, которой может быть вершина с номером n или какая-либо другая вершина. Так как в графике Γ'_n с $(n-1)$ -й вершиной нет концевых вершин, то $l(\Gamma'_n) \geq n-1$. Тогда из уравнения $l(\Gamma'_n) + s_n = n-1$, определяющего графики класса G_0 , следует $s_n \leq 0$, чего не может быть. Полученное противоречие доказывает, что в классе G_0 могут быть только графики с $n = 2$. Имеется только один такой график с $l(\Gamma_2) = 1$, $\Gamma'_2 = \langle \{1\}, \emptyset \rangle$, $l(\Gamma'_2) = 0$. Поэтому для него выполняется условие, определяющее графики класса G_0 .

В силу доказанной теоремы получаем, что в приближении длинного радиуса взаимодействия $s_n = 0$ при $n > 2$, и поэтому из формул (1), (7) получаем

$$P = \rho T - \frac{T}{2} \gamma_2(T, \lambda) \rho^2, \quad (16)$$

$$\gamma_2(T, \lambda) = \lambda^{-3} \int_{\mathbb{R}^3} [\exp(-\lambda^3 \Phi(\mathbf{q})/T) - 1] d\mathbf{q}. \quad (17)$$

Исследуем полученное уравнение состояния. В том случае, когда при каких-то температурах имеет место $\gamma_2(T, \lambda) > 0$, в этом уравнении появляется область термодинамической неустойчивости, когда $dP/d\rho < 0$. При этом появление равенства $dP/d\rho = 0$ при каком-то значении плотности ρ_* можно интерпретировать как появление точки конденсации. Если значение ρ_* исчезает при какой-то температуре T_* , а именно, когда вириальный коэффициент $\gamma_2(T, \lambda)$ становится отрицательным, то эту температуру можно интерпретировать как критическую. Тогда она определяется уравнением $\gamma_2(T_*, \lambda) = 0$.

При тех температурах, когда имеет место $\gamma_2(T) > 0$ точка максимума $P(\rho, T)$, при изменении ρ , достигается в том случае, если плотность ρ принимает значение $\rho = [\gamma_2(T)]^{-1}$, происходит потеря устойчивости высокотемпературной фазы.

Покажем, что критическая точка существует и единственна. При этом мы будем полагать, что имеется область отрицательности потенциала $\Phi(\mathbf{q})$, но выполняется условие термодинамической устойчивости (6). В этом случае, при всех достаточно малых значениях T , выполняется



$\gamma_2(T, \lambda) > 0$, а при всех достаточно больших T имеет место $\gamma_2(T, \lambda) < 0$. Эти утверждения вытекают непосредственно из формулы (17). При больших T нужно разложить подынтегральное выражение по степеням $1/T$ и удержать два первых слагаемых в разложении экспоненты,

$$\gamma_2(T, \lambda) \sim -\frac{1}{T} \int_{\mathbb{R}^3} \Phi(\mathbf{q}) d\mathbf{q} < 0.$$

Наоборот, при $T \rightarrow 0$ в показателе экспоненты появляется большой параметр $1/T \rightarrow \infty$, и этот интеграл вычисляется методом Лапласа,

$$\gamma_2(T, \lambda) \sim \lambda^{-3} \int_D [e^{\lambda^3 |\Phi(\mathbf{q})|/T} - 1] d\mathbf{q} > 0,$$

где $D = \{\mathbf{q} : \Phi(\mathbf{q}) < 0\}$.

Из приведенных рассуждений следует, что критическая точка существует. Покажем, что она единственна. Положим, $\lambda = 1/T$ в определении (6) функции γ_2 . Продифференцировав по λ ,

$$\frac{d}{d\lambda} \gamma_2(T, \lambda) = - \int_{\mathbb{R}^3} \Phi(\mathbf{q}) \exp(-\lambda^3 \Phi(\mathbf{q})) d\mathbf{q}. \quad (18)$$

Допустим, сначала, что интеграл

$$\int_{|\mathbf{q}| < \delta} \Phi^2(\mathbf{q}) d\mathbf{q} < \infty. \quad (19)$$

Тогда вычислим вторую производную:

$$\frac{d^2}{d\lambda^2} \gamma_2(T, \lambda) = \lambda^3 \int_{\mathbb{R}^3} \Phi^2(\mathbf{q}) \exp(-\lambda^3 \Phi(\mathbf{q})) d\mathbf{q} > 0.$$

Функция $\gamma_2(T, \lambda)$ выпукла по λ . Если интеграл (19) расходится, то приблизим потенциал $\Phi(\mathbf{q})$ последовательностью таких потенциалов, для каждого из которых этот интеграл сходится. Причем такая последовательность потенциалов строится посредством сглаживания потенциала $\Phi(\mathbf{q})$ в достаточно малой окрестности нуля. Тогда каждая из функций $\gamma_2(T, \lambda)$ полученной последовательности является выпуклой по λ . Следовательно, предельная функция, соответствующая настоящему потенциалу $\Phi(\mathbf{q})$ также является выпуклой. На основании утверждения о выпуклости получаем, что функция (18) монотонно возрастает по λ . При $\lambda = 0$ она отрицательна, а при $\lambda \rightarrow \infty$ она эквивалентна функции

$$- \int_D \Phi(\mathbf{q}) \exp(\lambda^3 |\Phi(\mathbf{q})|) d\mathbf{q} > 0.$$

Следовательно, $d\gamma_2(T, \lambda)/d\lambda$ имеет одну нулевую точку на $\mathbb{R}_+$. Тогда $\gamma_2(T, \lambda)$ имеет одну экстремальную точку. Следовательно, $\gamma_2(T, \lambda)$ имеет единственный минимум, в котором она отрицательна и выпукла, то есть имеется единственный корень $\gamma_2(T, \lambda) = 0$ относительно λ , и поэтому по T .

4. Приближение первого порядка

В этом разделе мы вычислим поправку к главному приближению при больших значениях параметра λ . Для этого нужно описать класс графиков $\mathcal{G}_1$. Граф $\langle I_n, \Psi \rangle$ назовем циклом, если Ψ состоит из такого множества пар $\{i, j\}$, $i, j \in I_n$, у которого каждый номер $k \in I_n$ входит в состав ровно двух из них.

Теорема 3. Класс $\mathcal{G}_1$ состоит из связных графиков без вершин сочленения с числом вершин $n \geq 3$, которые представляют собой циклы.

□ Графики Γ_n класса $\mathcal{G}_1$ с n вершинами обладают свойством $l(\Gamma'_n) + s_n = n$. Так как для связных графиков Γ_n без концевых вершин $s_n \geq 2$ и, ввиду того, что $l(\Gamma_n) = l(\Gamma'_n) + s_n$, для этих



графиков выполняется неравенство $n \geq 2 + l(\Gamma'_n)$. Но так как график Γ'_n с $n-1$ вершиной связанный, то $l(\Gamma'_n) \geq n-2$. Тогда, ввиду произвольности выбранной вершины, получаем, что графиков класса G_1 степени всех вершин равны 2. При этом для каждого графика Γ_n из этого класса $l(\Gamma'_n) = n-2$.

Индукцией по числу вершин доказывается, что связные графики $\Gamma'_n = \langle I_{n-1}, \Psi' \rangle$, у которых $l(\Gamma'_n) = n-2$ и степени вершин не превосходят 2, представляют собой цепочки $\Psi' = \{ \{i_1, i_2\}, \{i_2, i_3\}, \dots, \{i_{n-2}, i_{n-1}\} \}$, $i_j \in I_{n-1}$ и $i_j \neq i_k$ при $j \neq k$. При этом индукционный шаг строится следующим образом. Так как для любого связного графика Γ'_n с $n-1$ вершиной и без концевой вершины имеет место равенство $s_1 + \dots + s_{n-1} = 2l(\Gamma'_n)$ и так как $l(\Gamma'_n) = n-2$, то, в нашем случае, когда $s_j \leq 2$, найдется, по крайней мере, две концевых вершины. Отрезая эту вершину от графика Γ'_n , получаем график с числом вершин и числом ребер на 1 меньшими, то есть график того же типа.

Докажем, что справедлива следующая теорема.

Теорема 4. Имеет место равенство $|G_1| = (n-1)!/2$.

□ Вырежем из кольцевого графика Γ_n с n вершинами вершину с номером n . В результате получим график Γ'_n с $(n-1)$ вершиной, который является цепочкой. Сопоставим каждому графику-цепочке $\Gamma'_n = \langle I_{n-1}, \Psi' \rangle$, $\Psi' = \{ \{i_1, i_2\}, \{i_2, i_3\}, \dots, \{i_{n-2}, i_{n-1}\} \}$, $i_j \in I_{n-1}$ и $i_j \neq i_k$ при $j \neq k$ две последовательности $\langle i_1, i_2, \dots, i_{n-1} \rangle$ и $\langle i_{n-1}, \dots, i_2, i_1 \rangle$. Из анализа всех графиков Γ'_n видно, что каждая возможная последовательность (перестановка) из $n-1$ номеров встретится среди всех построенных таким образом последовательностей ровно 1 раз. Так как число всех перестановок над I_{n-1} равно $(n-1)!$, то отсюда получаем, что $(n-1)! = 2|G_1|$.

Рассмотрим произвольный кольцевой $\Gamma_n = \langle I_n, \Psi \rangle$ с n вершинами, у которого $\Gamma'_n = \langle I_{n-1}, \Psi' \rangle$, с отношением смежности Ψ' , указанным выше. Покажем, что вклад от каждого кольцевого графика с n вершинами в коэффициент $\gamma_n(T, \lambda)$ определяется независимым от выбора конкретного графика выражением

$$\bar{U}_n \equiv \frac{\lambda^3}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} [\bar{U}(\mathbf{k}, T)]^n d\mathbf{k}, \quad (20)$$

где $\bar{U}(\mathbf{k}, T)$ – фурье-образ функции Урселла

$$\bar{U}(\mathbf{k}, T) = \int_{\mathbb{R}^3} U(\mathbf{q}, T) \exp(-i(\mathbf{q}, \mathbf{k})) d\mathbf{q}, \quad (21)$$

которая является вещественной ввиду свойства $U(-\mathbf{q}, \lambda) = U(\mathbf{q}, \lambda)$. С этой целью преобразуем заменой нумерации векторов – переменных интегрирования:

$$\begin{aligned} \beta(\Gamma_n) &= \lambda^3 \int_{\mathbb{R}^{3(n-1)}} \left(\prod_{j=1}^{n-2} U(\mathbf{q}_{i_j} - \mathbf{q}_{i_{j+1}}, \lambda) \right) U(\mathbf{q}_{i_1}) U(\mathbf{q}_{i_{n-1}}) d\mathbf{Q}_{n-1} = \\ &= \int_{\mathbb{R}^{3(n-1)}} \left(\prod_{j=1}^{n-2} U(\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_{j+1}, \lambda) \right) U(\mathbf{q}_1) U(\mathbf{q}_{n-1}) d\mathbf{Q}_{n-1}. \end{aligned}$$

Подставим в подынтегральное выражение фурье-образы:

$$U(\mathbf{q}, \lambda) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \bar{U}(\mathbf{k}, \lambda) \exp(i(\mathbf{k}, \mathbf{q})) d\mathbf{k},$$



функций Урселла

$$\begin{aligned}\beta(\Gamma_n) &= \frac{\lambda^3}{(2\pi)^{3n}} \int_{\mathbb{R}^{3n}} \left(\prod_{j=1}^n U(\mathbf{k}_j, \lambda) \right) d\mathbf{k}_1 \dots d\mathbf{k}_n \times \\ &\times \int_{\mathbb{R}^{3(n-1)}} \exp \left(-i \sum_{j=1}^{n-2} (\mathbf{k}_{j+1}, \mathbf{q}_{j+1} - \mathbf{q}_j) + i(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}_1) + i(\mathbf{k}_n, \mathbf{q}_{n-1}) \right) d\mathbf{Q}_{n-1} = \\ &= \frac{\lambda^3}{(2\pi)^{3n}} \int_{\mathbb{R}^{3n}} \left(\prod_{j=1}^n U(\mathbf{k}_j, \lambda) \right) d\mathbf{k}_1 \dots d\mathbf{k}_n \int_{\mathbb{R}^{3(n-1)}} \exp \left(-i \sum_{j=1}^{n-1} (\mathbf{k}_{j+1} - \mathbf{k}_j, \mathbf{q}_j) \right) d\mathbf{Q}_{n-1} = \\ &= \frac{\lambda^3}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^{3n}} \left(\prod_{j=1}^n U(\mathbf{k}_j, \lambda) \right) \left(\prod_{j=1}^{n-1} \delta(\mathbf{k}_{j+1} - \mathbf{k}_j) \right) d\mathbf{k}_1 \dots d\mathbf{k}_n = \frac{\lambda^3}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} [U(\mathbf{k}, \lambda)]^n d\mathbf{k}.\end{aligned}$$

Таким образом, учитывая формулу для числа кольцевых графиков, которая дается Теоремой 4, получаем, что

$$\gamma_n(T, \lambda) = \frac{1}{2} (n-1)! \bar{U}_n.$$

Для решения окончательного выражения поправки первого приближения к уравнению состояния главного члена приближения (16) нужно просуммировать, согласно определению (1) и (7), ряд

$$\begin{aligned}-\sum_{n=3}^{\infty} \frac{\gamma_n(T, \lambda)}{n(n-2)!} \rho^n &= -\frac{1}{2} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{(n-1)(n-1)!}{n(n-2)!} U_n \rho^n = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{(n-1)^2}{n} \rho^n \frac{\lambda^3}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^{3(n-1)}} [\bar{U}(\mathbf{k}, T)]^n d\mathbf{k} = \\ &= -\frac{\lambda^3}{2(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^{3(n-1)}} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{(n-1)^2}{n} \rho^n [\bar{U}(\mathbf{k}, T)]^n d\mathbf{k}. \quad (22)\end{aligned}$$

Необходимо просуммировать при $|w| < 1$ ряд

$$\begin{aligned}\sum_{n=3}^{\infty} \frac{(n-1)^2}{n} w^n &= w^2 \frac{d}{dw} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(n-1)}{n} w^{n-1} - \frac{w^2}{2} = w^2 \frac{d}{dw} \left[\frac{1}{1-w} + \frac{1}{w} \ln(1-w) \right] - \frac{w^2}{2} = \\ &= w \frac{2w-1}{(1-w)^2} - \ln(1-w) - \frac{w^2}{2} \equiv C(w),\end{aligned}$$

который сходится при условии

$$w = \rho |\bar{U}(\mathbf{k}, T)| < 1. \quad (23)$$

Если условие (23) выполняется, то уравнение состояния в рассматриваемом приближении имеет вид

$$P/T = \rho - \frac{\rho^2}{2} \gamma_2(T) - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{2\pi} \right)^3 \int_{\mathbb{R}^3} C(\rho \bar{U}(\mathbf{k}, T)) d\mathbf{k}. \quad (24)$$

Заметим, что $\gamma_2(T, \lambda) = \lambda^{-3} \bar{U}(0, T)$. Так как $\bar{U}(\mathbf{k}, T) \rightarrow 0$ при $|\mathbf{k}| \rightarrow \infty$, то при всех плотностях ρ , для которых $\rho > [\gamma_2(T, \lambda)]^{-1} > 0$, обязательно найдутся точки $\mathbf{k}$, где имеет место $\rho |\bar{U}(\mathbf{k}, T)| = 1$, то есть для всех плотностей, больших той плотности, где происходит потеря устойчивости фазы в нулевом приближении, найденная нами поправка (24) не существует, так как расходуется определяющий ее интеграл. Обратное, вообще говоря, неверно. Поэтому, для того чтобы



найденная нами поправка имела смысл, нужно чтобы потенциал взаимодействия $\Phi(q)$ обладал свойством $\bar{U}(\mathbf{k}, T) < \bar{U}(0, T)$.

5. Заключение

Проведенное исследование показало, что даже в том случае, когда потенциал взаимодействия интегрируем и устойчив, для построения корректных приближений типа длинного радиуса взаимодействия, необходимо вводить понятие «исключенного объема», по аналогии со случаем, когда потенциал взаимодействия имеет твердую сердцевину. При этом линейные размеры исключенного объема не подлежат растяжению при стремлении радиуса взаимодействия к бесконечности.

Список литературы References

1. Майер Дж., Гепперт-Майер М. 1980. Статистическая механика. М.: Мир, 546.
Mayer J.E., Goeppert-Mayer M. 1977. Statistical mechanics. New York: John Wiley & Sons, Inc.
2. Рюэль Д. Статистическая механика. 1971. Строгие результаты. М.: Мир, 368.
3. Гейликман Б.Т. 1954. Статистическая теория фазовых превращений. М.: ГТТЛ, 120.
4. Yang C.N., Lee T.D. 1952. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions, I. Theory of Condensation. Phys. Rev. 87: 404–409.
5. Dobrushin R.L. 1967. Existence of phase transitions in models of a lattice gas. Proc. V Berk. Symp. Mat. Stat. Prob., VII A, 73–87.
6. Кас М., Uhlenbeck G.E., Hammer P.C. 1963. On the Van der Waals theory of the vapor-liquid equilibrium. I. Discussion of a one-dimensional model, II. Discussion of the distribution functions, III. Discussion of the critical region. Journal of Mathematical Physics. 4. 2.: 216–228. 1963. 4. 2.: 229–247. 1964. 5. 1.: 60–74. (Кац М., Уленбек Г.Е., Хеммер П.К. 1965. Теория Ван-дер-Ваальса о равновесии между газом и жидкостью в кн. Кац М. Вероятность и смежные вопросы в физике. М.: Мир, 408).
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. 1976. Теоретическая физика т.V. Статистическая физика, часть 1. М.: Наука, 584.
8. Вакс В.Г., Ларкин А.И., Пикин С.А. 1966. О методе самосогласованного поля при описании фазовых переходов. ЖЭТФ. 51.: 361.
9. Вакс В.Г., Ларкин А.И., Пикин С.А. 1967. Термодинамика идеального ферромагнетика. ЖЭТФ. 53.: 281.
10. Добрушин Р.Л. Гиббсовские случайные поля для частиц без твердой сердцевины. 1970. Теорет. и матем. физика. 4, No1.: 101–118.
11. Добрушин Р.Л. Исследование условий асимптотического существования конфигурационного интеграла распределения Гиббса. 1964. Теория вероятностей и ее применения. 9.: 626–643.
12. Данилова Л.П., Вирченко Ю.П. 2017. О вириальном разложении уравнения состояния одноатомных газов. Белгородский государственный университет Научные ведомости. Математика и Физика. 6(255); 46: 138–140.
Danilova L.P., Virchenko Yu.P. 2017. About virial expansion of monatomic gases state equation. Belgorod State University Scientific Bulletin. Mathematics & Physics. 6(255); 46: 138–140.
13. Вирченко Ю.П., Остапенко Л.П. 2016. Задачи перечисления графов с помеченными вершинами. Белгородский государственный университет Научные ведомости. Математика и Физика. 27(248); 45: 150–180.
Virchenko Yu.P., Ostapenko L. P. 2016. Enumeration problems of graphs with labeled vertices. Belgorod State University Scientific Bulletin. Mathematics & Physics. 27(248); 45: 150–180.



УДК 530.1:303.732.4

**О КРАЕВЫХ ЗАДАЧАХ ОПИСАНИЯ ОПЫТНЫХ ДАННЫХ
В ПРОСТРАНСТВАХ СОСТОЯНИЙ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ****ON BOUNDARY VALUE PROBLEMS OF DATABASE DESCRIPTION IN SPACES
OF DIFFICULT SYSTEMS CONDITIONS****Г.В. Аверин¹, А.В. Звягинцева¹, М.В. Шевцова¹, А.С. Хоруженко²
G.V. Averin¹, A.V. Zviagintseva¹, M.V. Shevtsova¹, A.S. Khoruzhenko²**¹Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85
¹Belgorod National Research University, 85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia²Донецкий национальный технический университет, 83001, г. Донецк, ул. Артема, 58
²Donetsk National Technical University, 58 Artema St, Donetsk, 83001

E-mail: averin@bsu.edu.ru; zviagintseva@bsu.edu.ru; shevtsova@bsu.edu.ru; and_riy@ukr.net

Аннотация

Изучена проблема описания многомерных данных, характеризующих процессы изменения состояний систем различной природы, информация о которых может быть представлена в виде темпоральных массивов опытных данных. Каждая таблица такого массива имеет структуру «объекты-показатели», а множество таблиц упорядочено во времени с определенным шагом. Предложен метод создания моделей для описания данных, основанный на применении балансовых принципов по отношению к многомерным пространствам состояний сложных систем. Особенностью подхода является идея представления пространства состояний в виде гипотетической сплошной среды, а также применение гипотезы существования эмпирической меры для данной среды в виде функции многих переменных. В качестве переменных выступают параметры свойств объектов. Показано, что, используя предложенные гипотезы и особенности изменения во времени данных опыта или наблюдения, можно свести исходные модельные задачи к решению краевых задач для некоторых уравнений математической физики. Для примера сформулирована прикладная задача описания опытных данных предложенным методом. Полученные результаты позволяют развить способы обработки и описания данных наблюдений о процессах и состояниях сложных систем.

Abstract

The problem of database description is studied where database characterize processes of changing of systems conditions. Information on data can be presented in the form of temporal arrays of experimental data. Each table of such array has structure "objects - indicators", and the set of tables is ordered in time with a certain step. The method for the creation of models for the database description is offered. This method is based on using the balance sheet principles to multidimensional spaces of difficult systems conditions. Feature of approach is the idea of data representation in the form of the hypothetical continuous information environment, and also application of a hypothesis of empirical measure existence for this environment in the form of multivariable function. Parameters of object properties are variables. It is shown that using the offered hypotheses and features of experimental data which change in time, it is possible to reduce initial model problems to the solution of boundary value problems for some equations of mathematical physics. For an example the applied problem of experimental data description is formulated by the offered method. The received results allow to develop ways of processing and the description of these observations of processes and difficult systems conditions.

Ключевые слова: сложные системы, модели описания опытных данных, краевые задачи для пространств состояний систем, прикладные задачи.

Keywords: Difficult systems, models of the experimental data description, boundary value problems for spaces of systems conditions, applied problems.

Введение

В настоящее время в целом ряде областей знаний много внимания уделяется созданию новых методов моделирования. На повестке дня стоит разработка универсальной методологии описания систем различной природы. Решение данной проблемы возможно путем поиска перспективных направлений развития теории по отношению к различным классам объектов и явлений и целенаправленное применение общесистемных принципов по аналогии с логическими принципами, которые используются в естествознании и, в частности, в физике.

Применение естественнонаучных методов в различных предметных областях является актуальной задачей, т. к. область человеческого знания, связанная с естественными науками, наибо-



лее развита. В этом плане особо хотелось бы выделить логические принципы построения моделей в физике сплошных сред и термодинамике. Исходные положения в данных науках основаны на постулировании фундаментальных закономерностей, свойственных физическим системам и установленных опытным путем [1]. В целом, это формирует универсальный логический метод построения теорий с использованием объективного подхода при описании систем, т. е. именно того подхода, на который особо обращал внимание академик П.Л. Капица [2].

В основе построения моделей в естествознании чаще всего лежат балансовые принципы, связанные с законами сохранения массы, импульса, энергии, численности и т. д. Данные законы изначально в своей природе несут определенное феноменологическое содержание. Очень часто грань между используемыми феноменологическими моделями и теоретическими зависимостями очень сложно провести. Если исходить из термина «феноменологический» как научного результата, который основан на опыте, то, например, уравнение состояния для определенного вещества можно отнести к феноменологической модели, а закон сохранения энергии – уже нет. Любое уравнение состояния находится на основе опытных данных путем выбора некоторой эмпирической зависимости, которая порой может иметь достаточно сложный вид. В свою очередь, уравнение сохранения энергии хотя и построено на основе данных опыта, но логически обобщает особенности множества физических процессов и поэтому в своей термодинамической форме несет элементы уже сформировавшейся теории. Поэтому при анализе положений в естествознании, первое, на что следует обратить внимание – это существование двух логических подходов в построении теорий, тесно связанных между собой и включающих в себя математическое и физическое содержание той или иной предметной области.

Вторая особенность многих теорий – это объединение в одну логическую форму положений статики и динамики явлений. При этом состояния сложных систем и связанные с этим понятия и закономерности формируют статические представления, а понятия, определения и законы, относящиеся к процессам, формируют динамические представления в соответствующей предметной области. Исходя из этого, в теории обычно имеются как модели, характеризующие пространство состояний систем, так и модели, позволяющие описывать процессы в этом пространстве. Для привнесения в теорию реального предметного содержания исходные математические модели основываются на использовании величин, которые позволяют верифицировать полученные зависимости по отношению к данным опыта. Эти величины в основном носят феноменологический характер, и их использование наблюдается на всех этапах формирования аналитической теории в любой предметной области.

В целом содержание предлагаемого общесистемного подхода можно представить следующим образом. Формируется непрерывное пространство состояний сложной системы относительно ее атрибутивных показателей. Данное пространство является универсальным, так как охватывает максимально возможную область наблюдения этих показателей в опыте для многих однотипных систем при различных внешних условиях. Пространство состояний предполагается непрерывным по отношению к представленным в нем процессам и состояниям, при этом существующие опытные данные рассматриваются как ограниченная дискретная выборка из непрерывного пространства. При таком подходе состояние объекта отображается точкой многомерного пространства, а процесс изменения состояния – некоторой кривой. Применительно ко всему пространству состояний строятся математические модели, например, с использованием балансовых принципов, и определяются феноменологические величины, позволяющие адаптировать полученные модели к опытным данным.

Таким образом, массивы данных наблюдений рассматривают в целом как объект моделирования. При этом создание моделей описания данных требует разработки количественных моделей, которые представляют данные с необходимой степенью точности. В каждой научной области сегодня применяется своя теория описания данных, при этом предполагается использование свойственных только данной области предметных гипотез, теоретических положений и адаптированного математического аппарата. В целом пока отсутствуют универсальные методы, которые формально были бы применимы в самых разных областях знаний для описания данных, представленных в общем структурированном виде. Поэтому, вполне естественно возникает вопрос о возможности применения общих подходов при описании количественной информации в случае, если опытные данные рассматривать как ограниченную выборку из сплошной континуальной среды [3, 4].

Целью статьи является развитие методов моделирования сложных систем на основе представления данных наблюдений в виде гипотетической континуальной среды и использования гипотезы существования эмпирической меры для данной среды в виде функции многих переменных. Предполагается, что это позволит формулировать краевые задачи для описания опытных данных с требуемой точностью. Актуальность данной задачи не вызывает сомнений, т.к. создание универ-



сальных методов анализа и описания данных наблюдений или опыта для объектов и систем многомерной размерности является основной целью прикладного математического моделирования.

Опытные данные и принципы их описания

Для многих сложных систем информация, характеризующая процессы изменения их состояний, может быть представлена в виде таблично-временных (темпоральных) массивов данных. Подобные данные имеют структуру таблиц в виде матриц «объекты – показатели», причем множество таблиц упорядочено во времени (t). Такая логическая структура данных может быть применена к множеству простых случаев и имеет непосредственное отношение к многомерным пространствам состояний, в которых атрибуты объектов в виде показателей соответствуют атрибутивным переменным в принятых системах координат. В свою очередь, при совершении объектами процессов время выступает общим параметром по отношению к данным переменным. Структура темпоральных опытных данных, характеризующих многие сложные системы, в виде «объекты-показатели-время» показана на рисунке.

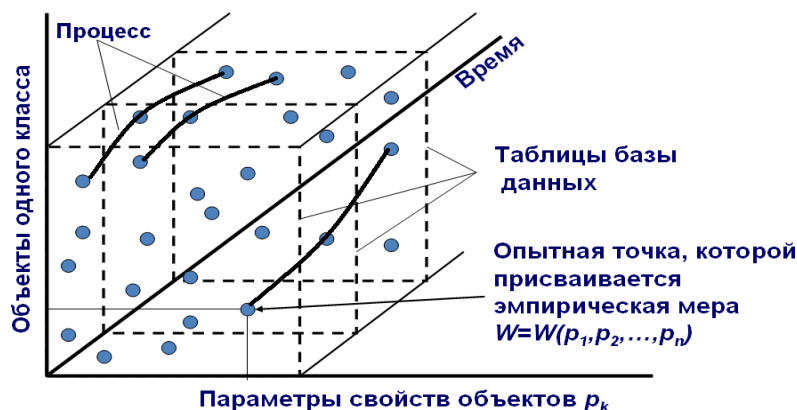


Рис. Структура темпоральных массивов опытных данных

Fig. Structure of temporal arrays of experimental data

В физике в качестве объектов могут выступать вещества, физические тела и т. д., а атрибутами – свойства этих объектов. В биологии аналогичными объектами могут быть виды животных и растений, биологические организмы, популяции и т. д., а атрибутивными переменными – характеристики и показатели биологических объектов.

При проведении формализации задачи предположим, что определенное множество однородных объектов в количестве m характеризуется n показателями $p_1, p_2, \dots, p_n$. Тогда в n -мерном пространстве координат $H^n\{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ каждому изучаемому объекту будет соответствовать n значений координат p_k . Определим H^n как пространство наблюдаемых состояний для изучаемого множества объектов. Таким образом, каждый объект в определенный момент наблюдения находится в некотором состоянии и характеризуется совокупностью показателей $p_1, p_2, \dots, p_n$, которые изменяются с течением времени. Поэтому состояние любого объекта в n -мерном пространстве в каждый момент времени будет отображаться точкой $M = M(p_1, p_2, \dots, p_n)$, процесс изменения состояния объекта во времени – многомерной кривой, которая описывается точкой M в пространстве H^n .

Введем понятие эмпирической меры W пространства состояний H^n . Будем рассматривать эту меру как скалярную функцию пространства H^n , которая комплексно отражает состояние каждой точки M по отношению ко всей группе изучаемых объектов или в сравнении с некоторыми эталонными (опорными) объектами. Считаем, что величина W однозначно характеризует состояния объектов, зависит от их показателей $p_1, p_2, \dots, p_n$ и не может быть одним из этих показателей.

Для построения моделей описания данных, информация о которых может быть представлена в описанном выше виде, используем следующие принципы моделирования [3, 4]. Континуальный принцип представления опытных данных в пространстве H^n , который позволяет учитывать закономерности, свойственные изучаемой предметной области, и рассматривать имеющиеся данные как некоторую дискретную выборку из сплошной непрерывной среды. Принцип феноменологического описания массивов опытных данных позволит создавать модели континуального пространства в целом, исходя из учета связей эмпирической меры $W = W(M)$ с атрибутивными по-

казателями объектов. Как следствие, предполагаем непрерывность пространства H^n , а также возможность существования в этом пространстве непрерывного скалярного поля эмпирической меры W , которое может быть математически описано.

Для построения общей модели описания данных предположим, что в области H^n можно задать некоторую функцию многих переменных $\theta(M) = \theta(p_1, p_2, \dots, p_n)$, которая будет выступать в виде аналитической среды моделирования. Данная функция позволяет сформировать скалярное поле величины $\theta(p_1, p_2, \dots, p_n)$ и может быть получена на основе использования различных методов. В работе [5] вид аналитических функций для описания среды моделирования задавался априори, при этом феноменологические модели определялись с учетом закономерностей формирования эмпирической меры в пространстве состояний. Для этого в любом процессе l вблизи произвольной точки M постулировалась связь вида $dW = c_l \cdot d\theta$, где c_l – феноменологические величины, которые определяются по опытным данным [5]. Другой метод описания данных может быть основан на использовании дифференциальных уравнений в частных производных, характеризующих особенности пространства состояний H^n , и применении балансовых закономерностей, которые свойственны всему пространству в целом.

Дифференциальные уравнения для формирования сред моделирования

Получим дифференциальные уравнения для определения функций, характеризующих среду моделирования и позволяющих описывать опытные данные, исходя из связи скалярных полей величин $W = W(M)$ и $\theta = \theta(M)$, а также особенностей формирования процессов в пространстве состояний H^n . Эмпирическая мера, также как и параметры свойств, изменяется с течением времени, т. е. справедливо соотношение $W(t) = W(p_1(t), p_2(t), \dots, p_n(t))$. Исходя из гипотезы полевого представления эмпирической меры в окрестности произвольной точки M , дифференциал величины W зависит от вектора направления процесса l в пространстве H^n . Примем гипотезу, что в точке M для любого процесса l и момента времени t существует связь между скалярными полями величин W и θ вида:

$$\frac{\partial W}{\partial l} = \text{grad}_l W(M) = \lambda(M) \cdot \text{grad}_l \theta(M), \quad (1)$$

где $\lambda(M) = \lambda(p_1, p_2, \dots, p_n)$ – коэффициент пропорциональности как функция точки пространства H^n , который определяет феноменологическую связь между величинами. Таким образом рассматривается потенциальное векторное поле градиента, для которого скалярная функция эмпирической меры является потенциалом поля. Справедливость закономерности (1) должна оцениваться в каждом конкретном случае исходя из имеющихся опытных данных. Отметим, что в той или иной форме закономерность (1) широко используется в физике сплошных сред.

Если представить замкнутую поверхность σ многомерного объема v , выделенного в области H^n , то за время dt через элемент поверхности $d\sigma$ поток вектора $\text{grad } W(M)$ по направлению единичного вектора $\vec{n}$ будет равен:

$$dP = dt \cdot \iint_{(\sigma)} \lambda \cdot \text{grad}_n \theta d\sigma. \quad (2)$$

Для величины P можно выдвинуть разные гипотезы об ее изменении во времени, которые будут связаны с сущностью этой величины. Например, для процессов, когда параметры свойств объектов не изменяются во времени, можно рассматривать стационарные краевые задачи. В свою очередь, для медленно протекающих процессов возможна формулировка краевых задач для параболических дифференциальных уравнений, а для быстропротекающих процессов – краевых задач для гиперболических или смешанных уравнений и т. д.

Предположим, что имеется опытная информация о поведении объектов, параметры свойств которых медленно меняются во времени. Пусть поток вектора P в пространстве состояний H^n подчиняется закону сохранения, тогда, используя балансовый метод, будем иметь:

$$dP = dt \cdot \iiint_{(v)} \beta \cdot \frac{\partial \theta}{\partial t} dv = dt \cdot \iint_{(\sigma)} \lambda \cdot \text{grad}_n \theta d\sigma, \quad (3)$$



где β – некоторая эмпирически определяемая функция пропорциональности, зависящая от значений параметров $p_1, p_2, \dots, p_n$.

Применяя к уравнению (3) формулу Остроградского-Гаусса, получим уравнение параболического типа для нахождения функции $\theta(p_1, p_2, \dots, p_n)$, характеризующей среду моделирования:

$$\beta \cdot \frac{\partial \theta}{\partial t} = \text{div}(\lambda \cdot \text{grad } \theta) \quad \text{или} \quad \beta \cdot \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_1} \left(\lambda \cdot \frac{\partial \theta}{\partial p_1} \right) + \dots + \frac{\partial}{\partial p_n} \left(\lambda \cdot \frac{\partial \theta}{\partial p_n} \right). \quad (4)$$

Данное дифференциальное уравнение аналогично нестационарному уравнению конвективной диффузии при его обобщении на n -мерный случай.

Решения дифференциального уравнения (4) и данные опыта или наблюдения в виде темпоральных массивов информации позволят проверить исходные гипотезы и изучить возможность определения феноменологических величин $\lambda(M)$ и $\beta(M)$. Поэтому в данном случае задача описания данных опыта или наблюдения сводится к решению обратных краевых задач для уравнения параболического типа и определению искомых величин по данным, которые собраны при наблюдении за процессами изменения параметров свойств объектов во времени.

Аналогичным образом, используя разные гипотезы по отношению к процессам изменения величин во времени, можно приходить к различным краевым задачам математической физики и осуществлять проверку адекватности теоретических моделей по отношению к данным наблюдений для систем различной природы.

Пример формулировки краевой задачи для пространства состояний сложной системы

Существует множество темпоральных баз данных, которые несут информацию о различных классах природных и биологических объектов. Есть примеры создания подобных баз данных в физике и химии [5, 6], климатологии и метеорологии [7], астрономии [8], глобалистике [9, 10], токсикологии [11], в области изучения биоразнообразия [12] и т. д.

При формулировке краевых задач описания данных в пространствах состояний сложных систем основная проблема связана с выбором величин в качестве эмпирических мер. В общем случае удобно для этой цели использовать вероятностные методы, которые позволяют любые наблюдения рассматривать в виде событий. Состояния каждого объекта могут характеризоваться не только показателями $p_1, p_2, \dots, p_n$, но и некоторыми наблюдаемыми событиями, которые отражают характерные изменения в изучаемой системе и объектах этой системы. Рассмотрим сложное совместное событие одновременного наблюдения нескольких показателей. Определим, что состояние каждого объекта может также оцениваться данным наблюдаемым событием. Обозначим данное событие как «событие j », и будем считать, что оно позволяет характеризовать в целом состояние объекта в определенный момент времени. Найдем статистическую вероятность этого события на основе опытных данных, которые имеются в базе данных, с использованием алгоритмов сортировки, группировки и подсчета частот благоприятных событий. Примем данную вероятность в качестве эмпирической меры пространства состояний системы. Данная величина является универсальной характеристикой для комплексной оценки состояния объектов, так как статистическая вероятность события j может быть оценена по отношению ко всей группе изучаемых объектов по опытным данным. Для оценки вероятности совместного события используются методы алгоритмического определения вероятностей [3, 4]. С этой целью статистическая вероятность w находится через относительные частоты событий j путем разбиения всего пространства H^n на многомерные параллелепипеды, исходя из заданного количества интервалов группирования для каждой переменной p_k (обычно одинакового для всех p_k). После этого подсчитываются относительные частоты событий, которые равны отношению количества опытных точек, попадающих в заданные области группирования, к общему числу всех наблюдаемых точек. Статистическая вероятность принимается в виде кумулятивных относительных частот изучаемых событий. Таким образом, статистические вероятности события j оцениваются вычислительным методом путем непосредственного подсчета вероятностей. Это позволяет каждому элементу пространства H^n присвоить эмпирическое значение статистической вероятности наблюдения объекта с определенными значениями показателей в данной области пространства. С другой стороны, для скалярного поля вероятности событий может быть принята модель в виде краевой задачи описания опытных данных (4). Поэтому использование данных о состоянии и динамике систем, а также непосредственный алгоритмический расчет вероятностей событий, связанных с наблюдением показателей, позволит установить феноменологические закономерности для изучаемого класса систем. Таким образом,

определить эмпирическую меру можно путем оценок статистических вероятностей событий, характеризующих местоположение опытной точки относительно всей группы изучаемых объектов (всего облака опытных точек).

Для реализации предлагаемых методов в качестве примера рассмотрим базу данных биологических характеристик и показателей позвоночных животных [12], которая представляет собой результат большой работы многих ученых. Последняя версия базы включает структурированные и достоверные сведения о 4083 видах позвоночных и охватывает количественные характеристики рыб, амфибий, рептилий, птиц и млекопитающих. В базу внесены данные о максимальной продолжительности жизни, массе тела при рождении и во взрослом состоянии, скорости роста и размножения, времени полового созревания, продолжительности беременности, интенсивности метаболизма, а также некоторые другие характеристики (всего более 25 показателей). Имеется также полная информация о систематике биологических видов позвоночных животных. Такая база данных позволяет сформировать многомерное информационное пространство для исследований характеристик биологических видов и получения новых закономерностей и зависимостей [13].

Для упрощения и наглядности рассмотрим биологическую систему, состояния объектов которой характеризуются двумя или тремя параметрами и одной эмпирической мерой. С этой целью из базы данных [12] сделаем выборку и создадим массив информации в виде таблицы «объекты-показатели»: объекты – биологические виды; атрибутивные показатели видов – масса тела p_1 , продолжительность жизни в неволе p_2 и интенсивность метаболизма p_3 , как наиболее изученные характеристики. В случае, если в процессе построения моделей рассматривать два показателя p_1 и p_2 , то в массив данных будет входить 2548 опытных точек, при рассмотрении трех показателей p_1 , p_2 и p_3 – 546 опытных точек [13].

Дифференциальное уравнение (4) для двух показателей p_1 и p_2 представляется в виде

$$\beta \cdot \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_1} \left(\lambda \cdot \frac{\partial \theta}{\partial p_1} \right) + \frac{\partial}{\partial p_2} \left(\lambda \cdot \frac{\partial \theta}{\partial p_2} \right), \quad (5)$$

при этом для его решения необходимо сформулировать граничные условия. Согласно формуле (1) изменение статистической вероятности W непосредственно связано со значениями модельной функции $\theta(M) = \theta(p_1, p_2)$. Для получения граничных условий воспользуемся свойствами двумерной функции распределения вероятностей. Известно, что если один из аргументов стремится к плюс бесконечности, то двумерная функция распределения вероятности W стремится к одномерной функции распределения, соответствующей другому аргументу:

$$\lim_{p_1 \rightarrow \infty} W(p_1, p_2) = W_2(p_2); \quad \lim_{p_2 \rightarrow \infty} W(p_1, p_2) = W_1(p_1). \quad (6)$$

В свою очередь, так как значения показателей массы и продолжительности жизни вида всегда больше или равны нулю, то из свойств распределения вероятностей следует, что:

$$\lim_{p_1 \rightarrow 0} W(p_1, p_2) = \lim_{p_2 \rightarrow 0} W(p_1, p_2) = 0. \quad (7)$$

Из соотношений (6) и (7) можно получить граничные условия для функции $\theta(M) = \theta(p_1, p_2)$. Учитывая также, что средние показатели биологических видов постоянны во времени (в базе данных [12] существует только одна таблица данных), приходим к стационарной краевой задаче описания опытных данных вида:

$$\frac{\partial}{\partial p_1} \left(\lambda \cdot \frac{\partial \theta}{\partial p_1} \right) + \frac{\partial}{\partial p_2} \left(\lambda \cdot \frac{\partial \theta}{\partial p_2} \right) = 0, \quad (8)$$

при следующих граничных условиях:

$$\theta(p_1, p_2) = 0 \text{ при } p_1 = 0 \text{ или } p_2 = 0; \quad \frac{\partial \theta}{\partial p_1} = 0 \text{ при } p_1 \rightarrow \infty; \quad \frac{\partial \theta}{\partial p_2} = 0 \text{ при } p_2 \rightarrow \infty. \quad (9)$$

Уравнение (8) является одним из видов дифференциальной формы общего уравнения непрерывности. Некоторые решения задачи (8) – (9) при определенных видах функции $\lambda(p_1, p_2)$ приводятся в литературе [14, 15 и др.]. Вид данной функции должен выбираться с учетом особенностей опытных данных. Дальнейшее развитие данной работы будет связано с разработкой алгоритмов описания опытных данных исходя из решения обратных краевых задач для полученных уравнений.



Выводы

Предложенный метод описания темпоральных опытных данных позволяет исследовать феноменологические закономерности, свойственные изучаемым сложным системам. Особенностью данного подхода является переход к идее представления данных опыта в виде гипотетической сплошной среды. Используя гипотезу о непрерывности пространства состояний сложных систем, принцип существования эмпирической меры и возможность ее представления в виде скалярного поля, можно применить существующий аппарат математической физики при изучении систем различной природы. При этом, учитывая особенности изменения эмпирической меры во времени, приходим к формулировке краевых задач для различных дифференциальных уравнений в частных производных.

Список литературы References

1. Гухман А.А. 1986. Об основаниях термодинамики. М., Энергоатомиздат, 383.
Gukhman A.A. 1986. Ob osnovaniyah termodinamiki [About the thermodynamics bases]. Moscow, Jenergoatomizdat, 383. (in Russian).
2. Капица П.Л. 1981. Эксперимент, теория, практика. М., Наука, 495.
Kapitsa P.L. 1981. Jeksperiment, teorija, praktika [Experiment, theory, practice]. Moscow, Nauka, 495. (in Russian).
3. Аверин Г.В. 2014. Системодинамика. Донецк, Донбасс, 405. URL: <http://www.chronos.msu.ru/ru/rrules/item/sistemodinamika-2> (30.08.16).
Averin G.V. 2014. Sistemodinamika [Systemdynamics]. Doneck, Donbass, 405. Available at: <http://www.chronos.msu.ru/ru/rrules/item/sistemodinamika-2> (accessed 5 apr 2017). (in Russian).
4. Звягинцева А.В. 2016. Вероятностные методы комплексной оценки природно-антропогенных систем / Под науч. ред. д.т.н., проф. Г.В. Аверина. М., Спектр, 257.
Zviagintseva A.V. 2016. Verojatnostnye metody kompleksnoj ocenki prirodno-antropogennyh sistem [Probabilistic methods of a complex assessment of natural and anthropogenic systems] / Pod nauch. red. d.t.n., prof. G.V. Averina. Moscow, Spektr, 257. (in Russian).
5. Звягинцева А.В., Аверин Г.В. 2016. Интегрирование отдельных многомерных уравнений Пфаффа, имеющих важное прикладное значение. Научные ведомости Белгородского государственного университета. Сер. Математика. Физика, 27 (248). Выпуск 45: 123–131.
Zviagintseva A.V., Averin G. V. 2016. Integririrovanie otdel'nyh mnogomernyh uravnenij Pfaffa, imejushhih vazhnoe prikladnoe zhanenie [Integration of the several multivariate Pfaff equations which are important in application]. Nauchnye vedomosti Belgorodskogo gosudarstvennogo universiteta. Ser. Matematika. Fizika [Scientific lists of the Belgorod state university. Mathematics. Physics, 27 (248)]. Issue 45: 123–131. (in Russian).
6. Александров А.А., Орлов К.А., Очков В.Ф. 2009. Теплофизические свойства рабочих веществ теплоэнергетики. М., МЭИ, 224.
Alexandrov A.A., Orlov K.A., Ochkov V.F. 2009. Teplofizicheskie svojstva rabochih veshhestv teplojenergetiki [Heatphysical properties of working substances of power system]. Moscow, MEI, 224.
7. Archives of the repeated analysis of climatic data of the World climatic center (AMIP/DOE Reanalysis aka NCEP/NCAR R2, ERA-Interim, MERRA, 20CR – 20 Century Reanalysis). Available at: <http://meteo.ru/data> (accessed 5 apr 2017).
8. Астрометрические звездные каталоги. URL: www.astro.spbu.ru/ (07.04.17).
Astrometric star directories. Available at: www.astro.spbu.ru/ (accessed 7 apr 2017). (in Russian).
9. Database of the World Bank. Available at: www.worldbank.org/data/icp (accessed 7 apr 2017).
10. Database of the Program of UN development. Available at: http://hdr.undp.org/reports/view_reports.cfm (accessed 7 apr 2017).
11. Вредные химические вещества. Справочник / Под ред. В.А. Филова. Л., Химия. Неорг. соед. эл-тов V-VIII групп, 1989, 592 с.; Неорг. соед. эл-тов I-IV групп, 1988, 512 с.
Harmful chemicals. The reference manual / Pod red. V.A. Filov. L., Himija. Neorg. soed. jel-tov V-VIII grupp, 1989, 592 p.; Neorg. soed. jel-tov I-IV grupp, 1988, 512 p.
12. AnAge: The Animal Ageing and Longevity Database. Available at: <http://genomics.senescence.info/species/> (accessed 7 apr 2017).
13. Аверин Г.В., Звягинцева А.В. 2016. Построение уравнений состояний сложных систем на основе событийной оценки индикативных показателей. Научные ведомости Белгородского государственного университета. Сер. Экономика. Информатика, 23 (244). Выпуск 40: 77–86.
Averin G.V., Zviagintseva A.V. 2016. Postroenie uravnenij sostojanij slozhnyh sistem na osnove sobytijnoj ocenki indikativnyh pokazatelej [Creation of the equations of difficult systems conditions on the basis of event assessment of indicators]. Nauchnye vedomosti Belgorodskogo gosudarstvennogo universiteta. Ser. Jekonomika. Informatika [Scientific lists of the Belgorod state university. Economics. Informatics], 23 (244). Issue 40: 77–86. (in Russian).
14. Кошляков И.С. 1970. Уравнения в частных производных математической физики. М., Вш. shk., 712.
Koshlyakov I.S. 1970. Uravnenija v chastnyh proizvodnyh matematicheskoj fiziki [Partial equations of mathematical physics]. Moscow, Vsh. shk, 712.
15. Лыков А.В. 1967. Теория теплопроводности. М., Вш. shk., 600.
Lykov A. V. 1967. Teorija teploprovodnosti [Theory of heat conductivity]. Moscow, Vsh. shk, 600.



УДК 620.1.72:532.783

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ И СВОЙСТВ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ НА ЕГО ОСНОВЕ

OBTAINING AND INVESTIGATION OF ELECTROCONDUCTIVITY OF $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ AND PROPERTIES OF HETEROSTRUCTURE ON ITS BASIS

В.С. Захвалинский, Ле Тхай Шон, Т.Б. Никуличева, Е.А. Пилиук
V.S. Zakhvalinskii, Le Thai Son, T.B. Nikulicheva, E.A. Piliuk

Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г.Белгород, ул. Победы, 85

Belgorod National Research University, 85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia

E-mail:zakhvalinskii@bsu.edu.ru

Аннотация

Методом твердотельного диффузионного синтеза были получены керамические объёмные образцы твёрдых растворов $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($x=0.3, 0.7$) (LCMO). Результаты синтеза подтверждены методом порошкового рентгенофазового анализа. Были исследованы температурные зависимости электропроводности и магнетосопротивления образцов LCMO ($x=0.3$) и ($x=0.7$). Установлено, что поведение сопротивления образцов в температурном диапазоне от 260 до 300 К подчиняется механизму прыжковой проводимости типа Шкловского – Эфроса с переменной длиной прыжка. В образце ($x=0.7$) отсутствует эффект колоссального магнетосопротивления. В результате анализа полученных данных были определены микропараметры для составов LCMO ($x=0.3$) и ($x=0.7$). Керамический материал (LCMO) составов ($x=0.3, 0.7$) был использован для получения гетероструктуры $\text{Ag}/n\text{-La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3/p\text{-La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3/\text{Ag}$. Плёнки $\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$ были получены методом вч-магнетронного напыления. Было проведено исследование вольт-амперных характеристик полученной гетероструктуры.

Abstract

Using conventional solid-state technology, ceramic bulk samples of solid solutions $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.3, 0.7$) (LCMO) were obtained. The synthesis results were confirmed by powder x-ray phase analysis. For LCMO samples ($x = 0.3$) and ($x = 0.7$), the temperature dependences of the electrical conductivity and magnetoresistance were investigated. It was established that the behavior of the sample resistance in the temperature range from 260 to 300 K obeys the mechanism of hopping conductivity of Shklovskii-Efros type with a variable range hopping. It was found that in the sample ($x = 0.7$) there is no effect of colossal magnetoresistance. As a result of the analysis of the obtained data, the micro parameters for the LCMO compositions ($x = 0.3$) and ($x = 0.7$) were determined. The ceramic material (LCMO) of the compositions ($x = 0.3, 0.7$) was used to obtain the heterostructure $\text{Ag} / n\text{-La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3 / p\text{-La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3 / \text{Ag}$. The films $\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$ were obtained by the rf-magnetron sputtering method.

Ключевые слова: манганит перовскит, вч-магнетронное напыление, гетероструктуры, вольт-амперные характеристики, прыжковая проводимость.

Keywords: Manganite perovskite, rf-magnetron sputtering, heterostructures, current-voltage characteristics, hopping conductivity.

Введение

Среди наиболее перспективных источников экологически чистой энергии важное место занимают фотоэлектрические полупроводниковые преобразователи (ФЭПП) солнечной энергии. К преимуществам этих устройств следует отнести безотходность и относительно простую конструкцию, что позволяет использовать их в самых разных климатических условиях. Однако высокая стоимость и низкие значения коэффициента полезного действия материалов являются основным препятствием для широкого применения ФЭПП. С 2010 года наблюдается быстрое улучшение характеристик перовскитных солнечных элементов, что делает их перспективными материалами для производства тонких поглощающих солнечную энергию слоёв в фотовольтаических структурах [1]. Обширное семейство перовскитов характеризуется сходством кристаллической структуры аналогичным структуре CaTiO_3 [2]. К этим материалам относится четверное соединение $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ (LCMO), которое обладает высоким коэффициентом поглощения света ($\sim 12\text{-}20 \text{ мкм}^{-1}$) с шириной

запрещённой зоны ~ 1.2 эВ [3, 4]. Достоинством этих материалов является низкая цена и отсутствие токсичности. Твёрдые растворы манганитов перовскитов LCMO имеют богатую диаграмму свойства-состав. Кроме эффекта колоссального магнетосопротивления (КМС), в LCMO наблюдаются: различные типы магнитного упорядочения [5, 6], фазовое расслоение [7], зарядовое упорядочение [8, 9, 10], разнообразие механизмов электропроводности [2], которые также привлекают интерес исследователей. Разнообразие свойств перовскитных манганитов во многом определяется механизмом двойного объема в комплексе $\text{Mn}^{3+}\text{--O--Mn}^{4+}$ и эффектом Яна-Теллера, связанным с присутствием ионов Mn^{3+} [11, 12]. В структурах манганитов LCMO, легированных дырками, замещение части ионов La^{3+} на двухвалентные ионы Ca вызывает модификацию длин связи Mn–O, отклонение от 180° угла Mn–O–Mn и соотношения ионов $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$, которое влияет на ферромагнитное упорядочение, связанное с механизмом двойного обмена (ДО) [13]. Для создания фотовольтаической ячейки солнечного элемента нам необходимо создать потенциальный барьер, разделяющий генерируемые светом электронно-дырочные пары. Для этого необходимо создать p - n переход в гетероструктуре Ag/ n -LCMO/ p -LCMO/Ag. В качестве материала n -типа проводимости был выбран твёрдый раствор $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$, а в качестве материала p -типа – $\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$.

В настоящей работе описана технология получения образцов $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.3, 0.7$) и приведены результаты исследования их температурных зависимостей электропроводности и магнетосопротивления. Отдельное внимание уделено исследованию вольт-амперных характеристик гетероструктуры Ag / n - $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ / p - $\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$ / Ag.

Эксперимент

Синтез образцов $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.3, 0.7$) был осуществлён методом стандартной твердотельной керамической технологии [6]. Отжигали стехиометрические смеси La_2O_3 , CaCO_3 , и MnO_2 в атмосфере воздуха при температуре 1000°C в течение 4 часов, затем 6 раз с промежуточным измельчением и гомогенизацией в течении 6-12 часов при температуре 1200°C , финальный отжиг производился при температуре 1300°C , суммарное время отжига составило $t \approx 40$ ч. Был проведен порошковый рентгенофазовый анализ образцов $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.3, 0.7$) на дифрактометре Rigaku IV на порошке, съёмка $\theta - 2\theta$, в диапазоне углов 10 - 100 град., шаг 0.04 град., скорость 2 град./мин., фильтр Ni (K_β), Cu K_α $\lambda = 1.54056$ Å, без монохроматора, в геометрии Брен Брентано. Полученная порошковая дифрактограмма приведена на рис. 1.

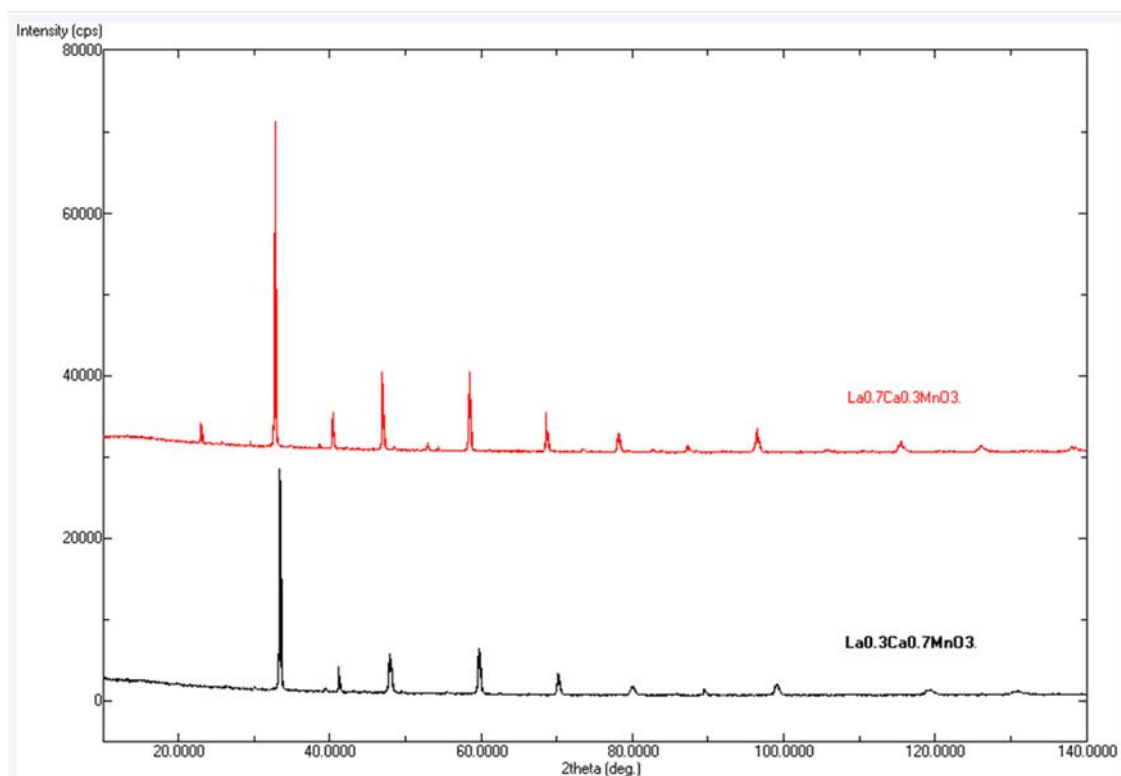


Рис. 1. Спектр порошковой дифракции образцов $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.3, 0.7$)

Fig.1. Powder diffraction spectrum of $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.3, 0.7$)

Основные пики на рис. 1 совпадают по положению и относительной интенсивности с полученными в работах [14, 15]. Температурная зависимость электропроводности была исследована традиционным четырехзондовым методом в диапазоне температур $20 < T < 320$ К в нулевом магнитном поле и в поле $B = 1$ Тл.

Результаты исследования удельного сопротивления образца при нагревании и охлаждении приведены на рис. 2.

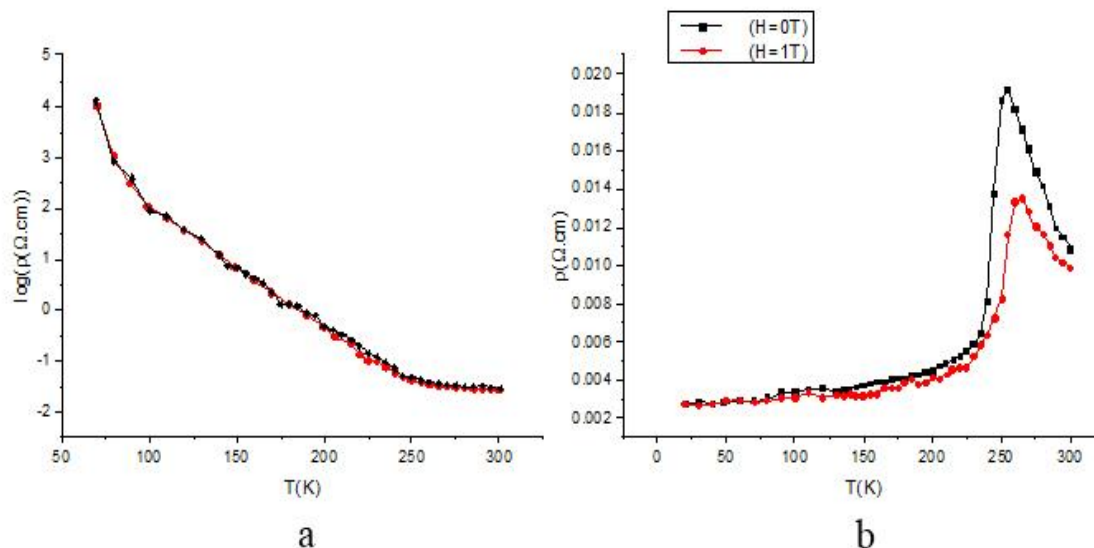


Рис. 2. Температурные зависимости удельного сопротивления: а) $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ и б) $\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$ в нулевом и магнитном поле $H = 1\text{Tл}$

Fig.2. Temperature dependence of the resistivity: а) $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ and б) $\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$ in the zero and magnetic fields $H = 1\text{T}$

Из предварительно синтезированного порошка манганита перовскита $\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$ методом прессовки под давлением 2000 кг/см^2 с последующим отжигом на воздухе при температуре 1300°C были получены подложки. На керамическую подложку n-типа $\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$ методом вч-магнетронного напыления была нанесена плёнка $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ p-типа проводимости.

Методом атомно силовой микроскопии на установке NTEGRA Aura, NT-MDT, по результатам измерения высоты на краю ступеньки (рис. 3(а,б)) было определено, что толщина плёнки $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ составила ~ 1 мкм.

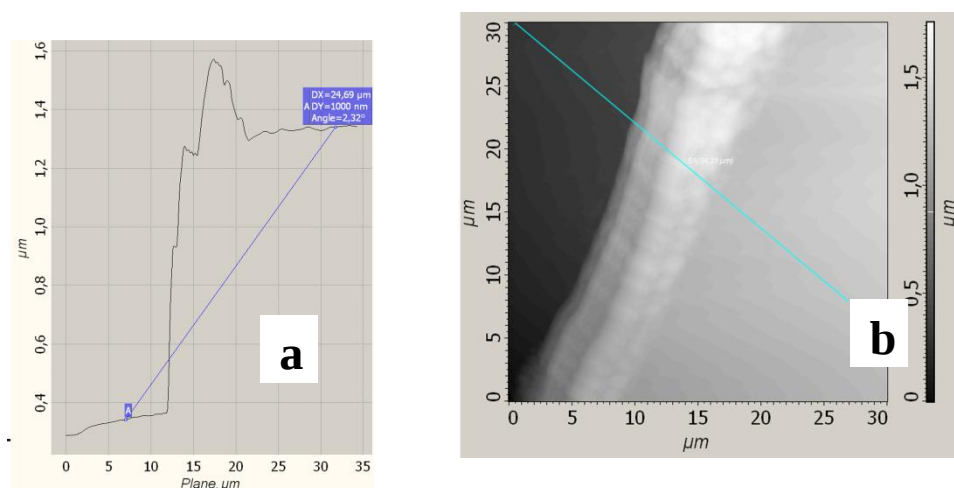


Рис. 3. Определение толщины плёнки $\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$ методом атомно силовой микроскопии

Fig. 3. Determination of thickness of a film of $\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$ by atomic force microscopy

Исследование вольт-амперных характеристик (ВАХ) гетероструктуры $\text{Ag/n-LCMO/p-LCMO/Ag}$ было проведено при температуре $T = 300$ и 280 К. На рис. 4 проведены результаты измерения (ВАХ) гетероперехода. Для обеих температур наблюдалась нелинейная ВАХ, характерная для диодной структуры.

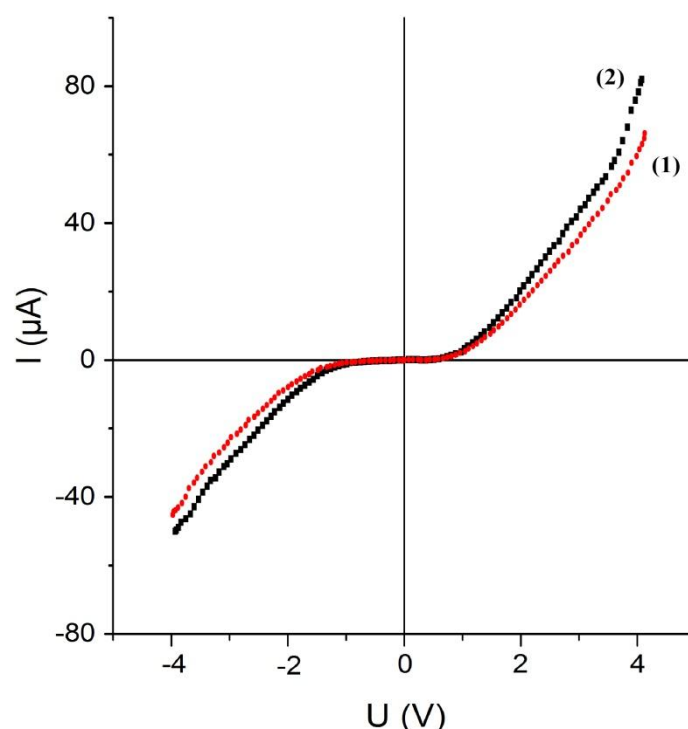


Рис. 4. Вольт-амперные характеристики гетероструктуры Ag/n-LCMO/p-LCMO/Ag. (1)- $T=280\text{ }^{\circ}\text{C}$, (2)- $T=300\text{ }^{\circ}\text{C}$

Fig. 4. Current-voltage characteristics of heterostructures Ag/n-LCMO/p-LCMO/Ag. (1)- $T=280\text{ }^{\circ}\text{C}$, (2)- $T=300\text{ }^{\circ}\text{C}$

Результаты и их обсуждение

Исследование температурной зависимости удельного сопротивления в диапазоне температур от 10 до 300 К показало наличие в образце ($x=0.3$) эффекта колоссального магнетосопротивления (КМС), проявляющегося как существенное падение электросопротивления при повышении индукции магнитного поля (рис.2б). Как известно, наличие эффекта КМС связано с механизмом двойного обмена, который схематически выражен как $Mn_{1\uparrow}^{3+}O_{2\uparrow,3\downarrow}Mn^{4+} \rightarrow Mn_{1\uparrow,3\downarrow}^{4+}O_{2\uparrow}Mn_{2\uparrow}^{3+}$, где 1, 2 и 3 – это обозначения электронов, которые принадлежат либо кислороду между ионами марганца, либо e_g - уровню ионов Mn. Двойной обмен является всегда ферромагнитным, в отличие от суперобмена, который часто приводит к антиферромагнетизму. Для образца $x=0.3$ характерно оптимальное соотношение Mn^{3+}/Mn^{4+} , способствующее эффекту КМС.

Как видно из рис. 2(а), в образце LCMO ($x = 0.7$) КМС эффекта не наблюдается. Это можно объяснить тем, что уменьшение сопротивления в образце LCMO ($x = 0.3$) связано с ростом ферромагнитного упорядочения и уменьшением сечения рассеяния при прыжках носителей заряда, действованных в механизме двойного обмена. В составе LCMO ($x = 0.7$) увеличение концентрации ионов Ca^{2+} приводит к уменьшению концентрации ионов Mn^{3+} , что уменьшает количество цепочек $Mn^{3+}-O^{2-}-Mn^{4+}$, ослабляет механизм двойного обмена и связанный с ним ферромагнетизм. Для описания механизма электропроводности в сильно легированных, неупорядоченных и аморфных полупроводниках используется выражение [16]:

$$\rho(T) = \rho_0 \exp[E_A/(kT)], \quad (1)$$

где ρ_0 – пред экспоненциальный множитель, E_A – энергия активации, k – постоянная Больцмана. Прыжковую проводимость можно описать универсальным законом [17]:

$$\rho(T) = DT^m \exp(T_0/T)^p, \quad (2)$$



где D – константа, T_0 – характеристическая температура, зависящие от механизма прыжковой проводимости. Из литературы известно, что связанные между собой пары параметров p и m соответствуют различным механизмам прыжковой проводимости (таблица 1) [18].

Таблица 1
Table 1

Величины p и m для различных режимов прыжковой проводимости (ПП) [18]
The values of p and m for different regimes of hopping conduction

Тип ПП и волновой функции	q	p	m ($\Gamma < 1$)	m ($\Gamma \gg 1$)
SE, $\psi(r) \sim \exp(-r/a)$	0	1/2	1/2	9/2
Mott, $\psi(r) \sim \exp(-r/a)$	0	1/4	1/4	25/4
SE, $\psi(r) \sim r^{-1} \exp(-r/a)$	4	1/2	-3/2	5/2
Mott, $\psi(r) \sim r^{-1} \exp(-r/a)$	4	1/4	-3/4	21/4

При $p = 1$ – прыжковая проводимость по ближайшим соседям (ППБС), $p = 1/4$ – прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка (ПППДП) типа Мотта, а $p = 1/2$ – ПППДП соответствует проводимости типа Шкловского – Эфроса (ШЭ). Результаты исследований приведены в таблице 2.

Таблица 2
Table 2

Результаты исследований механизмов прыжковой проводимости
The results of studies of the mechanisms of hopping conductivity

№	Состав LCMO	ρ_0 (Ом см)	E_A (мэВ)	D (Ом см К ^{-m})	T_0 (К)
1	x=0.7	0.0396	1.25	4.09×10^{-12}	2.09×10^4
2	x=0.3	0.00436	1.16	1.11×10^{-12}	2.35×10^4

Были определены значения Δ -ширины кулоновской щели, κ -параметр среды, отличающийся от статической диэлектрической проницаемости, $\kappa_0 = 16$, a -радиус локализации носителей заряда,

W – ширина зоны локализованных состояний, δ – ширина жёсткой щели и g (μ) – плотность локализованных состояний образцов, приведены в таблице 3.

Таблица 3
Table 3

Результаты определения микропараметров объёмных керамических образцов LCMO
The results of the determination of their bulk ceramic samples LCMO

№	состав	N_A (10^{16} см^{-3})	a (Å)	κ	Δ (мэВ)	W (мэВ)	$g(10^{16} \text{ см}^{-3} \text{ мэВ}^{-1})$	δ (мэВ)
1	x=0.7	3.61	6.58	3.4	0.22	0.44	6.05	0.049
2	x=0.3	5.98	1.85	3.4	0.42	0.7	7.12	0.055

Выводы

Таким образом, методом твердотельного диффузионного синтеза были получены керамические объёмные образцы твёрдых растворов LCMO состава (x=0.3) и (x=0.7). Результаты синтеза



подтверждены методом порошкового рентгенофазового анализа. В настоящей работе были исследованы температурные зависимости электропроводности и магнетосопротивления образцов LCMO ($x=0.3$) и ($x=0.7$). Результаты анализа этих зависимостей показывают, что поведение сопротивления образцов подчиняется механизму прыжковой проводимости типа Шкловского – Эфроса с переменной длиной прыжка. В образце ($x=0.7$) отсутствует эффект колоссального магнетосопротивления, что объясняется нарушением оптимального соотношения ионов Mn^{3+}/Mn^{4+} для эффекта КМС и подавлением механизма двойного обмена. Анализ полученных результатов позволил определить следующие микропараметры: Δ – ширина кулоновской щели, K – параметр среды, отличающийся от статической диэлектрической проницаемости, $\kappa_0 = 16$, a – радиус локализации носителей заряда, W – ширина зоны локализованных состояний, δ – ширина жёсткой щели и g (μ) – плотность локализованных состояний вблизи уровня Ферми, g_0 – плотность локализованных состояний вне кулоновской щели. Результаты согласуются с полученными ранее и опубликованными в научной печати [2,5,6]. Для получения гетероструктуры $Ag / n-La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3 / p-La_{0.3}Ca_{0.7}MnO_3 / Ag$ был использован метод вч-магнетронного напыления на установке ВН-2000. Установлено, что полупроводник р-типа LCMO ($x=0.3$) может быть использован для создания р-п перехода на основе керамической подложки n-типа LCMO ($x=0.7$). Кривые вольтамперной характеристики гетероперехода $La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3/La_{0.3}Ca_{0.7}MnO_3$ демонстрируют выраженное выпрямляющее поведение, характерное для диодных структур. Таким образом, эти материалы потенциально могут быть использованы для создания солнечных элементов.

Работа поддержана грантом РФФИ проект № 15-42-03192.

Список литературы References

1. James M. Ball et al. 2013. Low-temperature processed meso-superstructured to thin-film perovskite solar cells. *Energy Environmental Science*. Vol 6: 1739-1743.
2. Dagotto E. et al. 2001. Colossal magnetoresistant materials: the key role of phase separation, *Physics Reports* Vol. 344: 1-153.
3. Ruosi A., Raisch C., Verna A., Werner R., Davidson B. A, Fujii J., Kleiner R. and Koelle D. 2013. *Physical Review B*. 90, 12.
4. Hao Ni, Kun Zhao, Xiaojin Liu, Wenfeng Xiang, Songqing Zhao, Yu-Chau Kong and Hong-Kuen Wong. 2012. *International Journal of Photoenergy*.
5. Laiho R., Lähderanta E., Saiminen J., Lisunov K.G., Zakhvalinskii V.S. 2001. *Phys. Rev. B* 63, 094405.
6. Laiho R., Lisunov K.G., Lähderanta E., Petrenko P., Salminen J., Stamov V.N., Zakhvalinskii V.S. J. 2000. *Phys.: Condens. Matter* 12, 5751.
7. Hennion M., Moussa F., Biotteau G., Rodriguez-Carvajal J., Pinsard L., Revcollevschi A. 1998. *Phys. Rev. Lett.* 81, 1957.
8. Chen C.H., Cheong S.-W. 1996. *Phys. Rev. Lett.* 76: 4042.
9. Roy M., Mitchell J.F., Ramirez A.P., Schiffer P. 1999. *J. Phys.: Condens. Matter* 11, 4843.
10. Moritomo Y. 1999. *Phys. Rev. B*. 60, 10 : 374.
11. Millis A.J., Littlewood P.B., Shraiman B.I. 1995. *Phys. Rev. Lett.* 74, 5144.
12. Goodenough J.B. 1955. *Phys. Rev.* 100, 564.
13. Hwang H.Y., Cheong S.-W., Radaelli P.G., Marezio M., Batlogg B. 1995. *Phys. Rev. Lett.* 75, 914.
14. Sudyoasuk T., Suryanarayanan R., Winotai P., Wenger L.E. 2003. *Phys. Rev. B*.
15. Chérif W., Ellouze M., Elhalouani F., Lehlooh A.-F. *European Physical Journal Plus* 127(7).
16. Biswas A, Elizabeth S., Raychaudhuri A.K., Bhat H.L. 1999. Density of states of hole-doped manganites: a scanning tunneling-microscopy/spectroscopy *Phys. Rev. B*. 59, 5368.
17. Mott N.F. and Davis E.A. 1979. *Electron Processes in Non-Crystalline Materials*. Oxford University Press, New York.
18. Castner, T.G. 1991. *Hopping Transport in Solids* / Eds. T.G. Castner, M. Pollak, B. Shklovskii, Elsevier. Amsterdam.



УДК 620.1.72:532.783

ОБЕДНЕНИЕ КРЕМНИЯ, ИНДУЦИРОВАННОЕ ПЛЁНКАМИ НИТРИДА КРЕМНИЯ В СТРУКТУРЕ Si/Si₃N₄/НЕМАТИК/ITO

DEPLETION OF SILICON INDUCED BY NANO-DIMENSIONAL FILMS OF SILICON NITRIDE IN Si/Si₃N₄/NEMATIC/ITO STRUCTURE

С.И. Кучеев, Н.Н. Межаков, В.С. Захвалинский, Е.А. Пилюк
S.I. Kucheev, N.N. Mezhaikov, V.S. Zakhvalinskii, E.A. Piliuk

Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г.Белгород, ул. Победы, 85

Belgorod National Research University, 85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia

E-mail:kucheev@bsu.edu.ru

Аннотация

Экспериментально показано, что наноразмерные (< 10 нм) пленки нитрида кремния, полученные магнетронным напылением, изменяют порог светочувствительности МДП структуры типа Si/Si₃N₄/нематик/5СВ/прозрачный электрод. Сдвиг смещения порога светочувствительности демонстрирует пропорциональность толщине пленок на начальных этапах их напыления. Ориентация нематика на поверхности данных пленок демонстрирует переход от гомеотропной к планарной как по мере удаления от точки впуска жидкокристаллического материала в МДП структуру при ее заправке, так и при увеличении толщины пленки. Наблюдаемые закономерности в поведении порога светочувствительности МДП структуры и ориентации директора на поверхности пленок Si₃N₄ предполагается связаны с адсорбцией электрически активных (ионы, дипольные моменты) примесей в жидкокристаллическом материале.

Abstract

It is shown experimentally that the nanoscale (<10 nm) films of silicon nitride obtained by magnetron sputtering alter the photosensitivity threshold of MIS structure of Si/Si₃N₄/(nematic 5CB/ transparent electrode type. The threshold shift of photosensitivity exhibits proportionality to film thickness belonging to the initial stages of sputtering. Orientation of nematic on the films demonstrates the transition from homeotropic to planar either with increasing the distance from the inlet point of the liquid crystal material into the MIS structure during its filling or with increasing the film thickness. It is supposed that observing of such a behavior of the photosensitivity threshold of the structure and orientation of the director on the Si₃N₄ films are associated with the expected electrically active adsorption impurities (ions, dipole moments) in the liquid crystal.

Ключевые слова: нитрид кремния, магнетрон, жидкие кристаллы, МДП структура, обеднение.

Keywords: silicon nitride, magnetron, liquid crystals, MIS structure, depletion.

Введение

В основе функционирования многих типов полупроводниковых приборов лежит эффект поля в полупроводнике, который заключается в изменении поверхностной проводимости под действием электрического поля, и который, как известно, достаточно надежно реализуется в МДП структурах [1]. Оптически адресуемые жидкокристаллические модуляторы света [2] также относятся к МДП структурам с реализацией эффекта поля, в которых слой жидкого кристалла (жк), наравне со слоем твердотельного диэлектрика (в случае его наличия), электрически изолирует поверхность полупроводника и препятствует утечкам заряда, что способствует формированию приповерхностного обедненного (инверсного) слоя. Второй важной ролью жк среды является модуляция проходящего через неё света. Изменение фазы, амплитуды, плоскости поляризации световой волны осуществляется благодаря электрически управляемому двулучепреломлению жк материалов [3], которое реализуется в МДП структуре при перераспределении приложенного к модулятору напряжения между полупроводниковым и жк слоями в соответствии с распределением засветки полупроводника записывающим излучением. Исходя из принципа функционирования подобного типа жк оптических приборов вытекает, что спектр их возможностей может быть расши-



рен за счет (1) формирования желаемого «рисунка» распределения поверхностной проводимости полупроводника в плоскости модулятора, а также (2) распределения начального преднаклона молекул жк с целью задания исходных параметров модуляции световой волны. Решение первой задачи для сложной картины распределения поверхностной проводимости традиционными методами фотолитографии и легирования неизбежно приводит к образованию ступенек на границах легирования. Если в классических твердотельных МДП структурах этот факт не является существенным, то для модулятора света, для которого подразумевается освещение его когерентным излучением, наличие ступенек на границах легирования является серьезным мешающим фактором из-за дифракции света. Вторая задача, связанная с заданием преднаклона молекул жк на поверхности, остается актуальной для большого круга подложек. Задача не решена в общем случае и носит принципиальный характер, при этом основным требованием к методам ориентации, на сегодняшний день, является их неконтактный характер.

В данной работе экспериментально рассмотрена возможность использовать наноразмерные плёнки нитрида кремния (Si_3N_4) с целью (1) варьировать пороги обеднения (инверсии) в МДП структуре типа $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4$ /нематик/прозрачный электрод на основе монокристаллического кремния, и (2) варьировать ориентацию молекул нематического жк на поверхности полупроводника. Подобная структура может рассматриваться прототипом модулятора света. Отметим, что наноразмерность пленок, обусловленная малыми (несколько минут) временами напыления, обеспечивает отсутствие дифракции на ступеньках пленок.

Эксперимент

В упомянутом выше типе МДП структур зазор между поверхностью Si подложки с пленками нитрида кремния и прозрачным электродом ИТО (In_2O_3) поддерживался фторопластовыми прокладками фиксированной толщины 5 μm . Поверхность электрода ИТО покрывалась плёнкой натертого полиимида, что обеспечивало на поверхности ИТО планарную ориентацию жидкого кристалла. Поверхность кремния с нанесенными пленками Si_3N_4 дополнительной обработке не подвергалась, поэтому все изменения ориентации нематика, носящие как временной характер, так и с привязкой к месторасположению в структуре, обусловлены только влиянием поверхности пленок или открытой поверхности кремния. Заправка жк материалом (4'-пентил-цианобифенил(5CB), без дополнительной очистки), осуществлялась с одного края собранной МДП структуры за счет капиллярных сил в изотропной фазе.

В работе факт образования обедненного (инверсного) основными носителями заряда поверхностного слоя кремния в локальном месте устанавливался по наличию (отсутствию) светочувствительности структуры, которая, в свою очередь, оценивалась по реакции ориентированного нематика в исследуемой локальной области на тестирующее излучение He-Ne лазера (0,63 μm). Минимизация влияния считывающего освещения поляризационного микроскопа на неизбежную фотогенерацию неравновесных носителей заряда в кремнии осуществлялась или выбором оптимального с точки зрения наблюдения уровня освещения или рассогласованием с помощью светофильтров области фоточувствительности полупроводника и длины волны света освещения микроскопа [4]. Светочувствительность структуры определялась при прикладывании к ней переменного управляющего напряжения (U) частотой 100 кГц и варьировании постоянного напряжения смещения U_{dc} в диапазоне $\pm 6\text{В}$ относительно кремниевой подложки.

Рассматривались два варианта предварительной обработки поверхности монокристаллического кремния непосредственно перед магнетронным напылением пленок нитрида кремния. Исследовалось влияние химического травления поверхности кремния плавиковой (HF) кислотой и травления аргоновой плазмой в установке МВУ ТМ МАГНА 12. Было установлено, что в первом случае в собранных МДП структурах регистрируется факт формирования обедненного (инверсного) слоя для образцов кремния обоих типов проводимости с удельным сопротивлением около 4,5 Ом*см, тогда как в случае травления поверхности Ar плазмой (остаточное давление $\sim 0,1$ Па) режим обеднения (инверсии) поверхности в МДП структуре наблюдается только для кремния p -типа проводимости.

На рис.1, в качестве примера, демонстрируется наличие реакции нематика в МДП структуре на основе кремния p -типа проводимости на локальное освещение лазерным излучением. Переориентация нематика в области лазерного пятна подтверждает наличие в этой части МДП структуры обедненного (инверсного) приповерхностного слоя в кремнии. В данной структуре Si подложка с плёнкой SiO_2 (исходная толщина около 0,3 μm) подвергалась двум последовательным обработкам: сначала HF кислотой, а затем Ar плазмой. Кислотой было вытравлено окно круглой формы в плёнке окиси кремния (рис. 1а, Ch – граница окна). Области травления Ar плазмой представляли собой полосы (1) и (2), рис. 1а. Иллюстрация на рис. 1а соответствует состоянию МДП

структуры с подключенным управляющим напряжением. Видно, что участки структуры, соответствующие разным толщинам окисла, не декорируются жидким кристаллом. Локальной переориентацией нематика (отмечено стрелками, рис. 1а) декорируются только границы между кремнием без окисла (полоска (1)) и полосками (0) и (2), которые соответствуют исходному окислу и окислу, травленному плазмой соответственно.

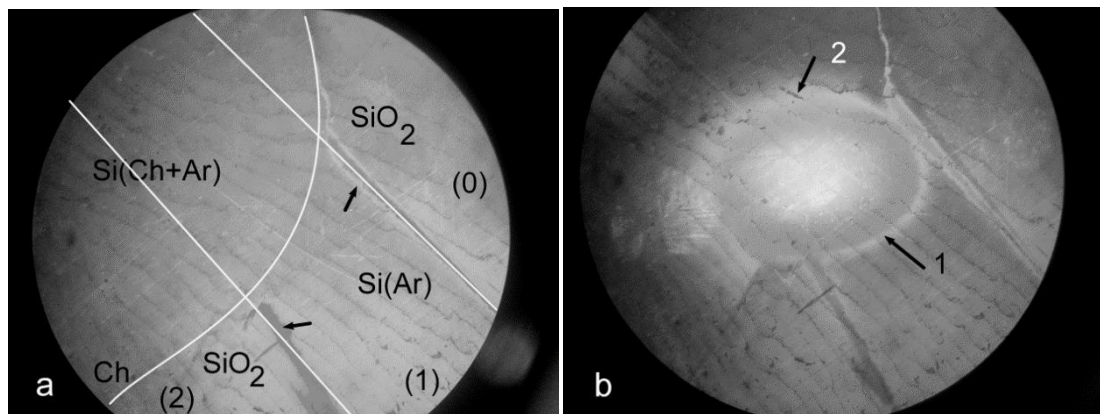


Рис.1. Реакция нематика в МДП структуре на освещение He-Ne лазером. Управляющее напряжение $U = 3\text{В}$, $U_d = 0\text{В}$, частота 100 кГц. а – Области травления HF и Ar плазмой поверхности Si/SiO₂. Ch – граница вскрытого в SiO₂ окна. Время травления Ar плазмой полосок, мин: (0) – 0, (1) – 8, (2) – 6. б – Переориентация нематика в окрестности лазерного пятна на поверхности кремния

Fig.1. The reaction of the nematic in the MIS structure to the illumination of the He-Ne laser. Control voltage $U = 3\text{В}$, $U_d = 0\text{В}$, frequency 100 kHz. а – Areas of etching the Si/SiO₂ surface by HF and Ar plasma. Ch - the border of the window opened in SiO₂. Time of etching by Ar plasma strips, min: (0) - 0, (1) - 8, (2) - 6. б - Reorientation of the nematic in the vicinity of the laser spot on the silicon surface

Реакция нематика на краях области переориентации, обусловленная лазерным освещением, демонстрирует разный контраст (стрелки 1, 2, рис. 1б), что доказывает разную степень обеднения участков кремния, которые подверглись разной обработке. Более размытая граница области переориентации [5] (стрелка 2, рис. 1б) указывает на большую ширину обедненного слоя в кремнии, который был последовательно обработан HF и плазмой (Si(Ch+Ar), рис. 1а) по сравнению с шириной обеднения в кремнии, который обработан только плазмой (Si(Ar), рис.1а). Все выше приведенные результаты позволяют сделать вывод, что обработка Ar плазмой кремния обоих типов проводимости приводит к формированию положительно заряженного слоя на поверхности кремния в собранных МДП структурах. Далее, учитывая выше отмеченное, в работе подложками в МДП структурах служили образцы монокристаллического кремния p – типа проводимости, протравленные HF кислотой.

Плёнки нитрида кремния Si₃N₄ в виде полосок шириной ~ 1 mm и длиной ~ 2 cm напылялись на поверхность кремния, в магнетроне ВН – 2000. Время напыления полосок было 1, 3, 5 и 7 минут соответственно, при этом часть исходной поверхности кремния оставлялась не напыленной и служила референтной поверхностью. Между актами напыления каждой плёнки в вакуумную камеру напускался воздух до атмосферного давления. При заправке МДП структуры направление движения потока жк материала совпадало с длинной стороной полосок Si₃N₄.

На рис. 2а,б представлены кривые, демонстрирующие зависимость порога исчезновения светочувствительности МДП структуры в зависимости от её времени жизни, длительности напыления (толщины) пленок нитрида кремния и места расположения точек измерения светочувствительности в структуре. В ходе измерения порога светочувствительности МДП структуры, с целью учета явления гистерезиса, связанного с накоплением в жидком кристалле ионного заряда, смещение U_{dc} плавно изменялось в одну сторону, а именно, от максимального отрицательного значения (-6В) в сторону положительных значений, что схематически отмечено стрелкой на графиках. Кривые 1, 2, 3 (рис. 2а) соответствуют разным временам жизни МДП структуры после её сборки и заправки жк материалом. Хорошо видно, что в течении нескольких суток пороги светочувствительности структуры изменяются, причем проявляется тенденция к их увеличению. Для свежезаправленной жк материалом МДП структуры зависимость порога от толщины пленки практически отсутствует (рис.2а, кривая 1). Такая зависимость проявляется через несколько суток (рис. 2а, кривые 2, 3), причем наблюдается пропорциональность от толщины пленок, за исключением наиболее толстой, соответствующей 7 минутам напыления.

Принимая во внимание, что толщина аморфных пленок Si_3N_4 лежит в диапазоне до 10 nm, связывать изменение порогов светочувствительности с вариацией их изоляционных свойств обусловленных толщиной по все видимости не следует. Предполагаемое в таком случае уменьшение утечек заряда при утолщении пленки приводило бы к противоположному результату, а именно, к уменьшению порога, что не наблюдается в эксперименте. Учитывая, что аморфная поверхность пленок нитрида кремния может иметь повышенную адсорбционную способность, вследствие её развитости, наблюдаемое различие в порогах светочувствительности можно связать с процессами адсорбции некоторых компонент жк материала, примесей, являющимися ионами или имеющими дипольный момент.

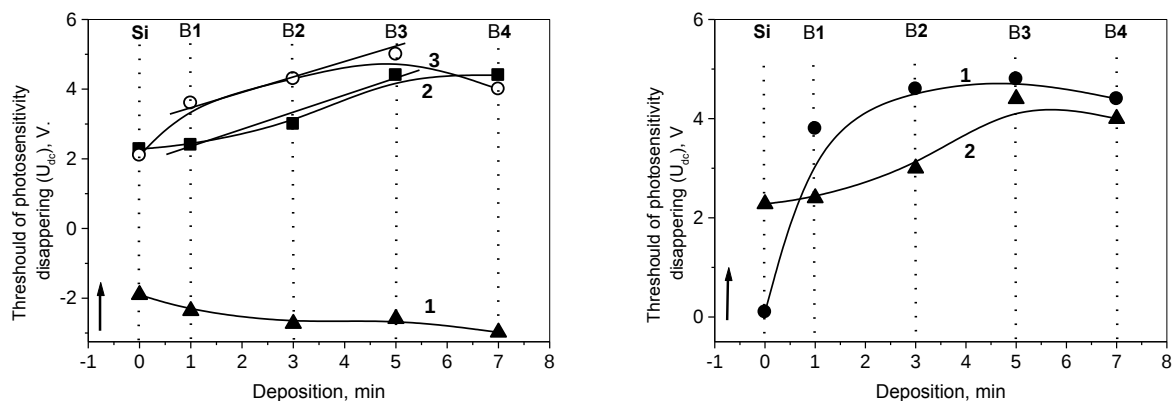


Рис. 2. Порог исчезновения светочувствительности структуры $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/5\text{CB}/\text{ITO}$. $U=2\text{V}$. а – Зависимость порога светочувствительности от толщины (времени напыления) пленок (полоски B1, B2, B3, B4 соответственно) в средней части структуры. Время жизни структуры (1) ~ 1 час, (2 и 3) – 2, 3 суток соответственно. б – Зависимость порога светочувствительности от толщины пленок в окрестности впуска (1) жк материала и на расстоянии ~ 1,5 см (2)

Fig. 2. The threshold for the disappearance of the photosensitivity of the $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/5\text{CB}/\text{ITO}$ structure. $U = 2\text{V}$. a – Dependence of the threshold of photosensitivity on the thickness (time of deposition) of films (strips B1, B2, B3, B4, respectively) in the middle part of the structure. The lifetime of the structure is (1) ~ 1 hour, (2 and 3) – 2, 3 days, respectively. b – Dependence of the threshold of photosensitivity on the thickness of films in the vicinity of the inlet of the LC material (1) and at a distance of ~ 1.5 cm (2)

Исходя из наблюдаемой зависимости порога от толщины пленок можно допустить, что количество адсорбированных электрически активных примесей увеличивается пропорционально толщине пленки по крайней мере на первоначальных этапах её роста. Заметим, что выше отмеченный временной дрейф порогов светочувствительности структуры (рис. 2а) в сторону увеличения косвенно не противоречит предполагаемому процессу адсорбции электрически активных компонентов из жк материала на поверхности пленок Si_3N_4 .

На рис. 2б представлены кривые, соответствующие порогам исчезновения светочувствительности над пленками в окрестности заправки (1) и на противоположной стороне структуры приблизительно на расстоянии 1,5 см (2). Хорошо видно, что вблизи заливки жк материала в структуру пороги выше, чем на противоположной стороне, причем такое соотношение между порогами сохраняется для всех полосок нитрида кремния по отдельности. Такое поведение также не противоречит предположению, что имеет место адсорбция ионов или дипольных моментов, при этом наиболее интенсивная адсорбция имеет место в окрестности ввода жк материала в структуру.

Рассмотрим особенности ориентации нематика в вышеуказанной структуре как в собранном виде (рис. 3 а,б,с) так и без электрода ИТО (рис. 3 д,е,ф). На рис. 3 а,б,с представлены изображения фрагментов МДП структуры в окрестности её заправки жк материалом. По изменению интерференционных цветов можно сделать вывод, что в направлении утолщения пленок Si_3N_4 , т. е. в ряду Si, 1, 2, 3, 4 директор демонстрирует тенденцию ориентироваться от гомеотропного к планарному состоянию. Без покровного стекла, которое ранее навязывало планарную ориентацию жк в структуре, ориентация на пленках разной толщины (для центральной части структуры) аналогичная, рис 3 д, е, ф, где также отчетливо наблюдается исчезновение интерференционного цвета по

мере увеличения толщины пленки нитрида кремния, что явно указывает на увеличение «оптической толщины» двулучепреломляющего слоя жидкого кристалла.

Рассмотрим стационарную, после нескольких суток выдержки, ориентацию нематика вдоль направления движения жк материала при его заправке в МДП структуру. В этом эксперименте использовался образец кремния с двумя полосками нитрида кремния (2, 3), рис. 4, с временем их напыления 5 и 8 минут соответственно. После заправки жк материалом и выдержки структуры несколько суток покровное стекло ИТО было удалено.

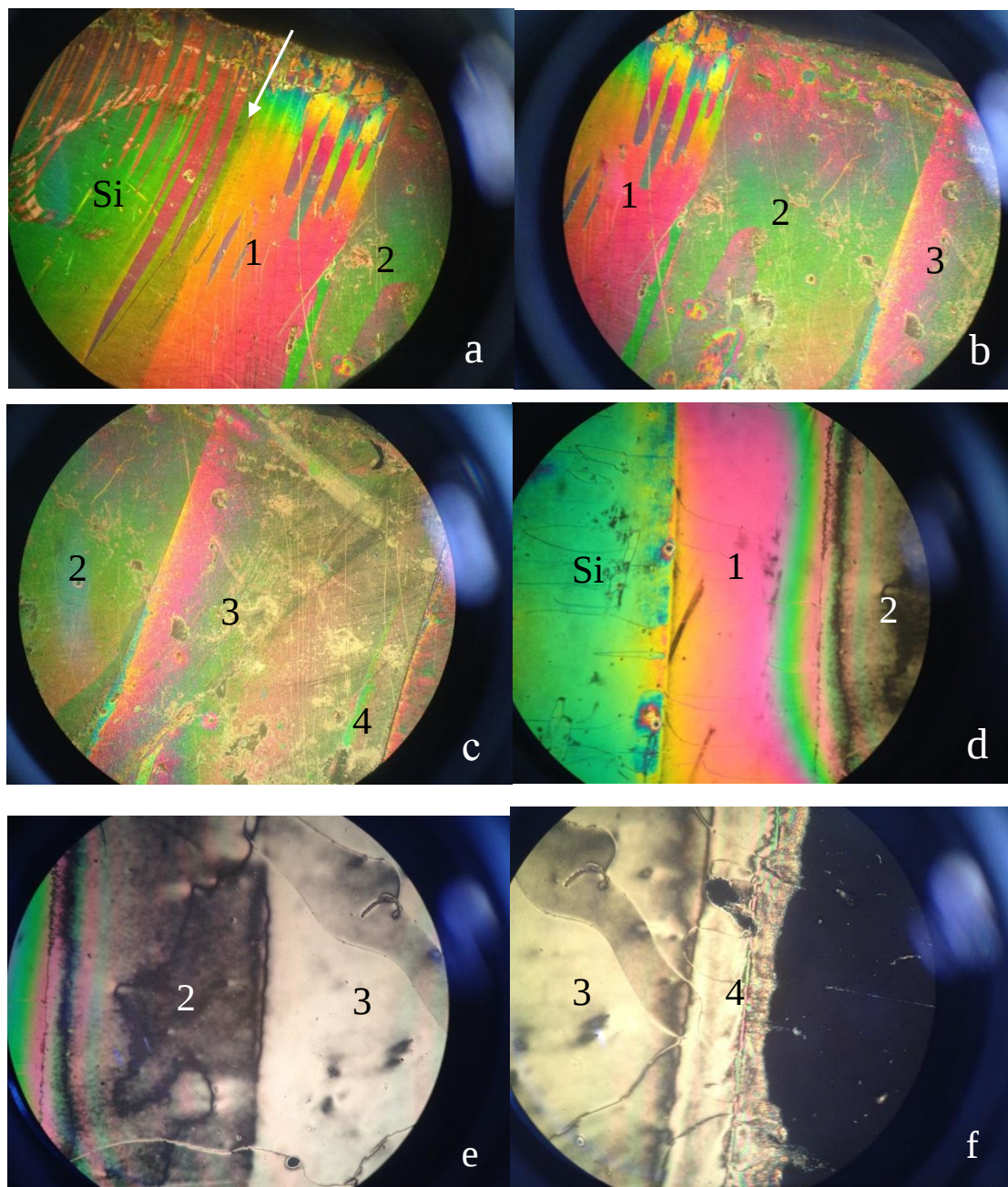


Рис.3. Поляризационные микрофотографии фрагментов МДП структуры с пленками Si_3N_4 на поверхности Si (Si, 1, 2, 3, 4 – кремний и полоски нитрида кремния соответственно). а, b, с – МДП структура в области заправки жк материалом. Стрелка – направление движения фронта заправки жк материалом. d, e, f – Центральная область МДП структуры без прозрачного электрода ИТО

Fig.3. Polarization microphotographs of fragments of the MIS structure with Si_3N_4 films on the Si (Si, 1, 2, 3, 4 - silicon and silicon nitride bands, respectively). а, b, с – MIS structure in the area of filling with a LC material. Arrow - the direction of the front of LC material flow. d, e, f – The central region of the MIS structure without the transparent electrode ITO

На рис. 4 представлены фрагменты структуры без покровного стекла. Хорошо видно, что по мере продвижения (отмечено стрелкой) линии фронта жк материала ориентация нематика на пленках нитрида кремния (2,3) меняется от гомеотропной к наклонной с тенденцией к планарной. Хорошо виден контраст в поведении ориентации нематика на поверхности кремния (1), где изменений на всей дистанции продвижения жк материала практически нет. Последний факт указывает на более интенсивную адсорбцию примесей на пленках нитрида кремния по сравнению с поверхностью монокристаллического кремния.

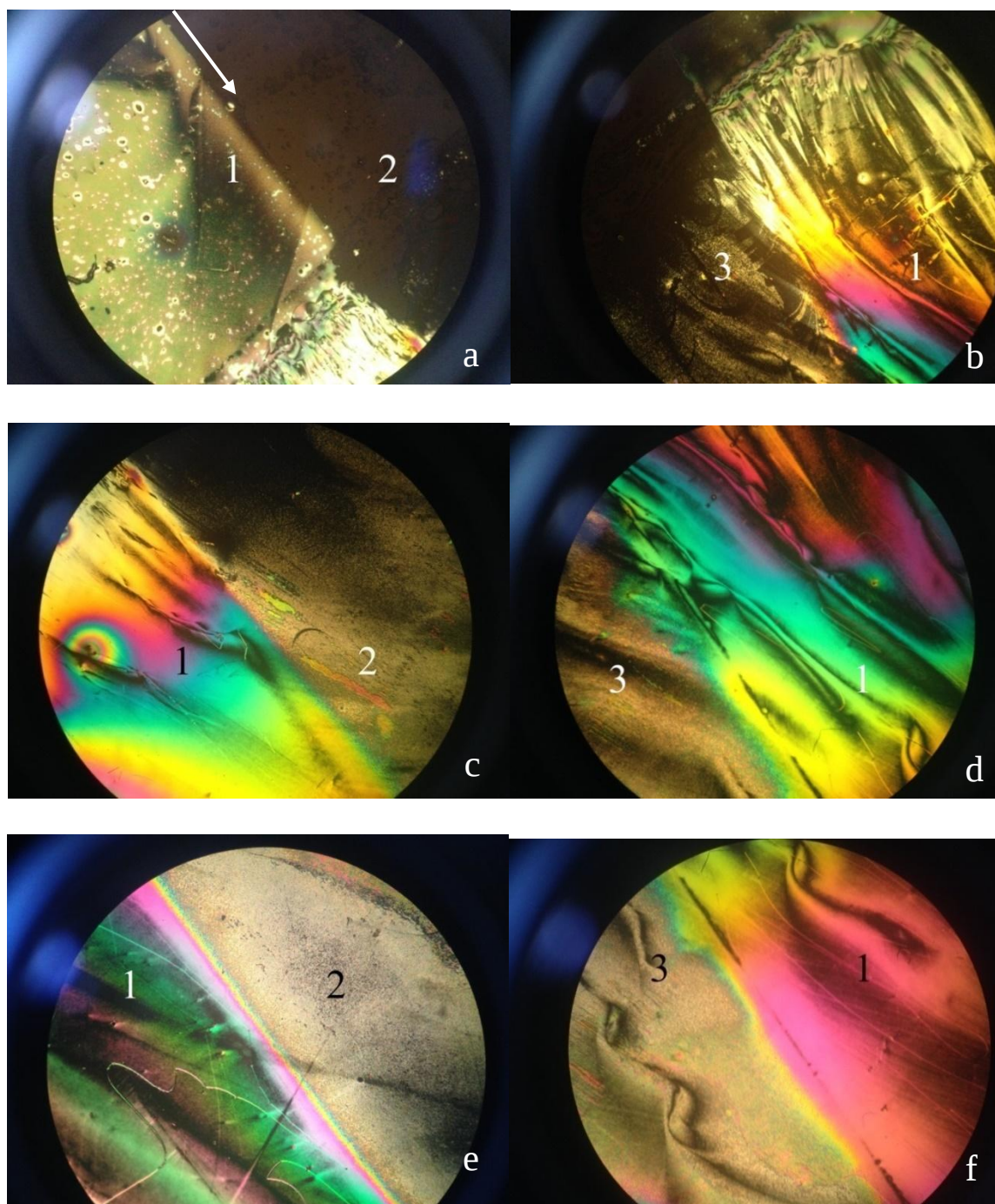


Рис. 4. Изменение ориентации нематика вдоль полосок Si_3N_4 (2,3) и поверхности Si (1). Стрелка – направление движения линии фронта заправки жк материалом

Fig. 4. Change in the orientation of the nematic along the Si_3N_4 (2,3) strips and the Si (1) surface. Arrow - the direction of the front of the LC material flow at filling

Выводы

Таким образом, наноразмерные пленки нитрида кремния, напыленные на монокристаллический кремний р – типа проводимости магнетронным методом, эффективно изменяют пороги светочувствительности МДП структуры, заключающееся в дополнительном обеднении поверхности кремния по сравнению с необработанной поверхностью кремния. Пороги обеднения возрастают с увеличением толщины пленок нитрида кремния, причем пропорциональность наблюдается для пленок, которые соответствуют первоначальным этапам их роста. Ориентация нематика на этих плёнках демонстрирует (1) тенденцию изменения от гомеотропной в окрестности ввода жк материала в структуру к планарной по мере удаления от точки заправки, и (2) аналогичное поведение при утолщении пленки. Предполагается, что наблюдаемые закономерности изменения порогов светочувствительности и ориентации нематика на пленках нитрида кремния могут быть связаны с процессами адсорбции электрически активных компонент жк материала, в качестве которых могут выступать ионы или электрические диполи.

Работа поддержана грантом РФФИ, проект № 15-42-03192.

Список литературы References

1. Muller R., Kamins T. 2003. Device electronics for integrated circuits. New York, Wiley: 530.
2. G. Lasarev, A. Hermerschmidt, S. Kruger, S. Osten LCOS Spatial Light Modulators: Trends and Applications/Optical Imaging and Metrology/ <http://www.beck-shop.de>
3. Блинов Л.М. 1978. Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. М.: Наука: 384.
Blinov L.M. 1978. Electro and magneto- optics of liquid crystal. M.: Nauka: 384.
4. Васильев А.А., Касасент Д., Компанец И.Н., Парфёнов А.В. 1987. Пространственные модуляторы света М.: Радио и связь, 320.
Vasiliev A.A., Kasasent D., Kompanez I.N., Parfenov A. V. 1987. Space modulators of light. M.: Radio&Svaz, 320.
5. Кучеев С.И., Тучина Ю.С. 2011. Электрооптика нематической ячейки на основе кремния, обработанного плазмой. Научные ведомости БелГУ, Серия Физика. Математика № 11(106), вып.23: 44-51.
Kucheev S.I., Tuchina Yu.S. 2011. Electrooptics of a nematic cell based on silicon treated with plasma. Belgorod State University Scientific Bulletin, Mathematics & Physics, 11 (106), issue 23: 44-51.



УДК 620.1.72:532.783

ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ ПЛЁНОК SiO_2 ХОЛЕСТЕРИЧЕСКИМИ ЖИДКИМИ КРИСТАЛЛАМИ**DETECTION OF DEFECTS OF SiO_2 FILMS BY CHOLESTERIC LIQUID CRYSTALS****С.И. Кучеев, Е.И. Омельченко, В.В. Ченцова**
S.I. Kucheev, E.I. Omelchenko, V.V. Chenzova

Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г.Белгород, ул. Победы, 85

Belgorod National Research University, 85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia

E-mail:kucheev@bsu.edu.ru

Аннотация

Экспериментально показано, что дефекты типа пор в диэлектрической пленке на кремнии могут быть обнаружены с помощью электрооптических эффектов, присущих холестерическим жидким кристаллам в стандартной жидkokристаллической ячейке. В постоянных электрических полях локальные утечки заряда через поры диэлектрической плёнки в жидком кристалле регистрируются появлением текстуры «масляные бороздки». Регистрация дефектов плёнки, рассеивающей свет конфокальной текстурой при действии на ячейку переменным напряжением с частотой, исключающей перенос ионов в жидkokристаллическом материале, требует предварительного действия постоянным напряжением. Область деформации поля директора после действия постоянным напряжением становится локальным источником начала роста конфокальной текстуры. Холестерико-нематический переход использован для обнаружения токов утечек через границу жидкий кристалл/кремний в порах диэлектрической плёнки. Из-за утечек, при соответствующем напряжении, приложенном к ячейке, в окрестности дефекта нарушается формирование обеднённого основными носителями заряда приповерхностного слоя в кремнии, что понижает в данном месте порог раскрутки холестерической спирали в гомеотропное состояние, тогда как над бездефектными участками плёнки, где имеет место обеднение поверхности кремния, наблюдается конфокальная текстура.

Abstract

It has been experimentally shown that pore-type defects in a dielectric film on silicon can be detected with the help of electro-optical effects inherent in cholesteric liquid crystals in a standard liquid crystal cell. In constant electric fields, local leakage of charge through the pores of a dielectric film in a liquid crystal is detected by the appearance of a texture of "oil grooves". The detection of film defects by a scattering light confocal texture when the cell is exposed to an alternating voltage with a frequency that excludes ion transport in a liquid crystal material requires a preliminary action by a constant voltage. The deformation of the director field after the action of a constant voltage becomes a local source of the beginning of the growth of the confocal texture. Cholesteric-nematic transition used to detect leakage currents across the liquid crystal/silicon interface in the pores of a dielectric film. Because of leaks, at the voltage applied to the cell, in the vicinity of the defect, the formation of the depleted layer by the main charge carriers is disrupted and the threshold for the untwisting of the cholesteric helix into the homeotrope state lowers here, whereas over the defect-free areas of the film, where the surface of silicon is depleted, a confocal texture is observed.

Ключевые слова: холестерик, дефект плёнки, обеднение кремния, МДП структура.**Keywords:** cholesteric, defect of film, depletion of silicon, MIS structure**Введение**

Тонкие диэлектрические плёнки являются неотъемлемым функциональным элементом полупроводниковых приборов. В МДП структурах плёнки выполняют (1) изолирующую функцию, благодаря которой электрическое поле затвора (полевой электрод), посредством эффекта поля, может изменять поверхностную проводимость в широких пределах от обогащения до инверсии и (2) роль среды для хранения заряда в энергонезависимых приборах памяти [1]. Поэтому к электрофизическим свойствам и качеству диэлектрических пленок предъявляются высокие требования, одним из которых является отсутствие в плёнках дефектов типа сквозных или глухих (закрываемых) пор. Сквозные поры вызывают электрические замыкания между полупроводником и металлическим затвором при его напылении. Утонченный окисел в глухих порах остается потенциально ненадежным и дающим отказ в жестких границах функционирования готовых микросхем. В основе методов контроля открытых пор диэлектрических пленок обычно лежит регистрация токов утечек через поры, например визуализация продуктов гидролиза воды в области повышенной плотности тока или электрохимическое экспонирование фотоматериалов в окрестности токов утечек с

последующим их проявлением стандартными фотографическими методами. Очевидно, что такие широко распространенные методы исследования электрофизических свойств пленок, как растровая электронная микроскопия, атомная силовая микроскопия, и ряд других, для обнаружения такого типа дефектов плёнок малоэффективны. Получить этими методами информацию о распределении дефектов по большой площади, сравнимой с площадью кремниевых пластин, т. е. выполнить картирование плёнки окисла на разных этапах изготовления микросхем, практически невозможно. Более того, для глухих пор методы, основанные на регистрации токов утечек в самой регистрируемой среде тоже становятся неэффективными. Для выявления глухих (закрытых) пор в таких случаях необходимо послойное травливание исходного окисла для их вскрытия, что усложняет эти методы и переводит их из неразрушающих в разрушающие. Поэтому поиск неразрушающих экспресс методов контроля дефектности плёнок для эффективного картирования на больших площадях остается актуальной задачей. К таким методам относится использование нематических жидких кристаллов [2, 3]. В основе метода лежит переориентация молекул нематика в окрестности дефекта плёнки, что достаточно легко регистрируется оптическим микроскопом в поляризованном свете. Метод позволяет обнаруживать единичные дефекты с линейными размерами около 1 мкм на площади в несколько квадратных сантиметров [2, 3].

Холестерические жидкие кристаллы, по сравнению с нематиками, обладают расширенным набором электрооптических эффектов, поэтому потенциально могли бы быть регистрирующими средами с более функциональными возможностями в дефектоскопии пленок и подложек. В отличие от нематиков, для которых порог Фредерикса [4] практически не поддается управлению, в холестериках электрооптические эффекты, включая эффекты памяти, зависят от шага холестерической спирали, которая за счет изменения концентрации оптически активной добавки может изменяться в широких пределах [4]. Это позволяет подгонять пороги электрооптических эффектов к процессам, протекающим в полупроводнике или диэлектрической пленке. Другим важным свойством электрооптических эффектов в холестериках является возможность регистрировать их протекание неполяризационными оптическими микроскопами, что значительно удешевляет метод дефектоскопии. В предлагаемой работе рассмотрена возможность регистрации дефектов пленки окиси кремния на кремнии с помощью нескольких электрооптических эффектов, присущих холестерическому жидкому кристаллу.

Эксперимент

Холестерические ячейки для контроля дефектности диэлектрической плёнки представляли собой «сэндвич», в котором нижней подложкой служили образцы монокристаллического кремния с пленкой окиси кремния, в которой присутствовали дефекты типа сквозных пор. Верхним электродом служил прозрачный электрод окиси индия (ITO) на стекле. Для задания планарной ориентации холестерика, в которой ось холестерической спирали перпендикулярна поверхностям ячейки, поверхности пленки окиси кремния и ITO электрода покрывались полиимидной пленкой. В качестве холестерического жидкого кристалла, который заправлялся в капилляр между плёнкой SiO_2 и электродом ITO толщиной 20 мкм, выступала смесь нематического жидкого кристалла (жк 1289) и оптически активной добавки, структурная формула которой приведена в работе [5]. Шаг спирали определялся методом клина Кано и составлял около 6 мкм.

При прикладывании к вышеописанной жк ячейке постоянного напряжения с полярностью «–» У относительно кремниевой подложки в окрестности дефектов пленки окиси кремния происходит локальная деформация исходного поля директора. Деформация оптически выглядит как некоторое просветление, рис. 1а, похожее на деформацию поля директора ориентированного нематика, но с некоторым отличием. Деформация нематика, как известно, имеет вид симметричного «коноскопического креста» [6], тогда как в картине деформации холестерика имеет место замена двух диагональных светлых лепестков «креста» на затемненные, рис. 1а. На светлом фоне планарной текстуры холестерика визуальное проявление локальной деформации представляет собой малоконтрастную картинку, поэтому малоприспособна для целей дефектоскопии пленок. При выключении напряжения деформированное поле директора холестерика релаксирует в исходное состояние без проявления эффектов памяти.

В случае дальнейшего увеличения напряжения в окрестности дефектов плёнки наблюдается возникновение характерной для холестериков текстуры «масляные бороздки». «Масляные бороздки» образуются в области интенсивного потока жк материала в виде вытянутых петель, один край которых остается «закрепленным» в окрестности дефекта, а противоположная сторона потоками увлекается на периферию. Ионный поток от дефекта плёнки через слой жк к плоскому электроду ITO можно рассматривать как своего рода электрогидродинамический насос, увлекающий жк материал. В центральной области фрагменты петель запутываются друг с другом вследствие

турбулентного движения жк материала и формируют плотное образование, рассеивающее свет, рис. 1b (стрелка 1). Отбрасываемые жк потоком на периферию «масляные бороздки» складываются друг с другом, образуя фрагменты, напоминающие текстуру «отпечатки пальцев», рис. 1b (стрелка 2). По мере действия напряжения область «масляных бороздок» приобретает некоторую выраженную кольцеобразную форму со стационарными границами. Наличие такой границы, по-видимому, указывает на достижение равновесия между давлением потока жк материала, вытекающего из области дефекта и упругостью «масляных бороздок». При выключении напряжения в первую очередь релаксирует центральная область, а затем периферийная, соответствующая текстуре «отпечаткам пальцев». Релаксация заключается в исчезновении каждой «масляной бороздки» по отдельности вплоть до последней (рис. 1d, единичная «масляная бороздка»). Поскольку процесс релаксации длится несколько минут, то с точки зрения дефектоскопии больших площадей плёнок этот факт представляется преимуществом.

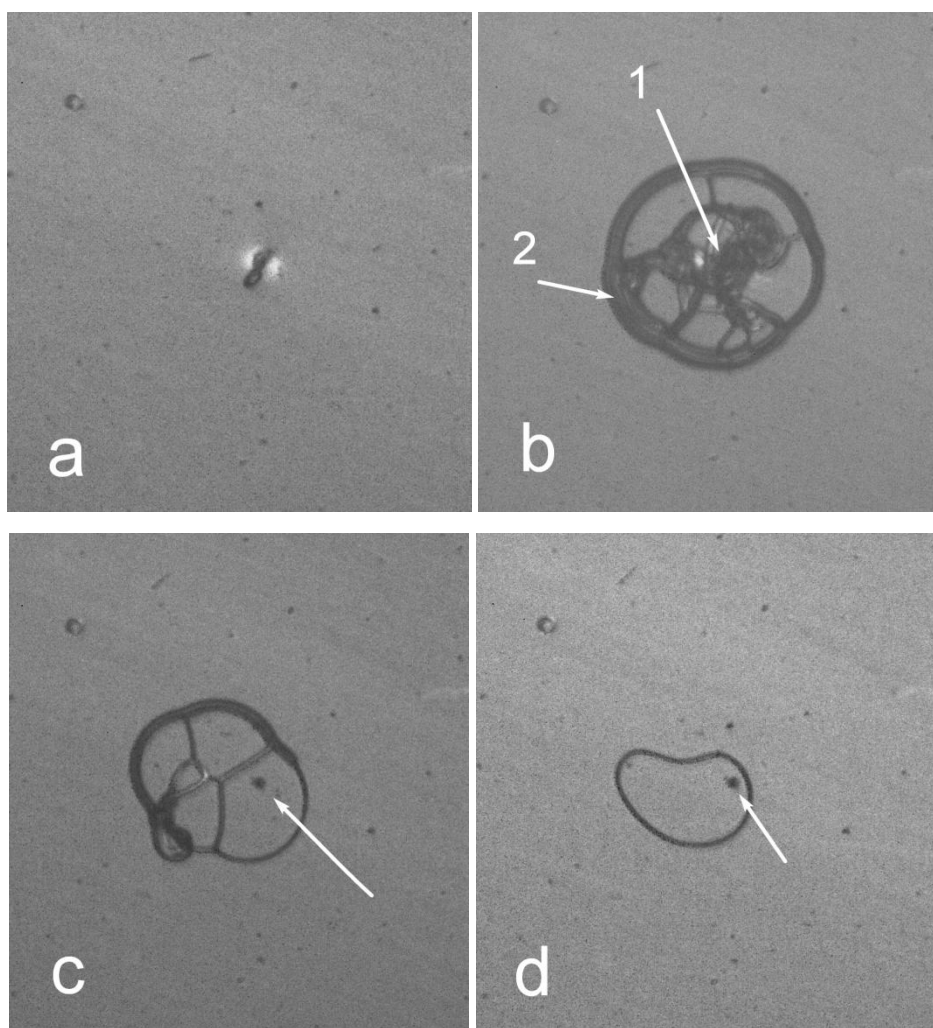


Рис. 1. Планарный холестерик в окрестности дефекта пленки окиси кремния. а – Деформация поля директора холестерика в окрестности дефекта пленки при действии постоянного напряжения. $U = 7$ В. б – Рассеивающая свет текстура (1) и фрагменты текстуры «отпечатков пальцев» (2). Постоянное напряжение $U = 13$ В. в, д – Релаксация области «масляных бороздок» в окрестности дефекта (отмечен стрелкам). $U = 0$

Fig. 1. Planar cholesteric in the vicinity of a defect of a silicon oxide film. а – Deformation of the field of the director of the cholesteric in the vicinity of the defect of the film under the action of a constant voltage. $U = 7$ V. б – Light-scattering texture (1) and fragments of the "fingerprints" texture (2). Constant voltage $U = 13$ V. в, д – Relaxation of the "oil grooves" region in the vicinity of the defect (indicated with the arrows). $U = 0$

Рассмотрим возможность использования других фаз холестерико-нематического перехода при действии на жк ячейку переменным напряжением. С целью исключения переноса носителей заряда в объеме жк материала используется переменное напряжение с частотой выше 1 кГц. В общем слу-

чае, независимо от конкретного вида холестерического жк, первым электрооптическим эффектом, который появляется по мере увеличения напряжения, является текстура «сетка» [4], которая представляет собой упругую двумерную деформацию исходной планарной текстуры холестерика. Текстура «сетка» не обладает памятью и быстро релаксирует к исходной планарной в случае выключения напряжения. Появление текстуры «сетка» при соответствующем пороговом напряжении начинается по всей жк ячейке и не локализуется в окрестности дефектов плёнки, поэтому служить для целей обнаружения дефектов не может. Текстура «сетка» является неустойчивой, поэтому при продолжении действия напряжения на её фоне начинает появляться текстура «отпечатков пальцев» переходящая в конфокальную текстуру. Физически появление этих текстур связано с опрокидыванием холестерической спирали из вертикального состояния, причем в конфокальной текстуре оси фрагментов холестерической спирали в отдельных доменах разбросаны по разным направлениям и в большей степени, чем в текстуре «отпечатки пальцев», поэтому демонстрирует большее рассеяние света и проявление эффекта памяти. Появление конфокальной текстуры зависит от величины отношения шага спирали к толщине слоя жк и величины превышения приложенного напряжения над порогом текстуры «сетка».

Появление и рост конфокальной («отпечатков пальцев») текстуры начинается в окрестности неоднородностей ориентации исходной планарной текстуры холестерика. В качестве примера такой неоднородности ориентации можно привести границу воздушного пузырька в слое планарного холестерика. Рис. 2а демонстрирует, что происходит после включения переменного напряжения. Хорошо видно, что от границы пузырька (рис. 2а, нижний левый угол стрелка 2) по текстуре «сетка» наблюдается рост сильно рассеивающей конфокальной текстуры. Дефект пленки из-за микроскопических размеров не является источником неоднородности исходной холестерической спирали, поэтому затравочным местом для начала роста конфокальной текстуры служить не может. Однако локализовать появление, и соответственно, рост конфокальной текстуры в окрестности дефекта при действии переменного напряжения можно, создав предварительно деформацию (неоднородность) в холестерике в данном месте. Это можно осуществить за счет кратковременного включения постоянного напряжения, при котором в области дефекта появится деформация поля директора, описанная выше (рис. 2б).

После переключения на переменное напряжение конфокальная текстура начинает расти в окрестности дефекта пленки, рис. 2с, на фоне текстуры «сетка». Из-за эффекта памяти регистрация области, охваченной конфокальной текстурой, может осуществляться несколько минут после выключения действующего напряжения (рис. 2д), при этом текстура «сетка», как указывалось выше, на участках не охваченных конфокальной текстурой релаксирует в планарную текстуру (Р, рис. 2д) практически без задержки и, следовательно, не мешает регистрации дефектов. Отметим, что влияние деформации холестерика, которая была вызвана действием постоянного напряжения, сохраняется в течении 30-40 секунд после выключения постоянного напряжения. Это указывает на скрытую напряженность в холестерической спирали, возможно, связанную с накопленным ионным зарядом в жк слое в окрестности дефекта плёнки. Отметим, что величина постоянного напряжения, необходимого для минимальной деформации холестерика в окрестности дефекта с целью зарождения конфокальной текстуры при действии переменным напряжением значительно меньше напряжения образования «масляных бороздок». Поэтому загрязнение (неизбежное) продуктами электрохимического разложения жк материала на поверхности пленки при визуализации дефектов конфокальной текстурой будет меньше, чем при их обнаружении методом «масляных бороздок».

Третьей по счету, при увеличении напряжения приложенного к холестерической ячейке, идет фаза раскрутки холестерической спирали. Для холестерика с большим шагом спирали корреляции между месторасположением дефектов плёнки и появлением участков гомеотропной ориентации установить затруднительно из-за размытых границ областей холестерика в нематическом состоянии. Однако при варьировании шага спирали, что равносильно варьированию порогового напряжения раскрутки холестерической спирали, появляется другая возможность обнаружения как открытых, так и, возможно, глухих пор плёнок окиси кремния на кремнии. Такая возможность уже не базируется на регистрации эффектов, связанных с протеканием ионных токов в самом жк материале, а связана с процессами возникновения и нарушения обедненного (инверсного) приповерхностного слоя в кремнии. В случае формирования обеднённого слоя в кремнии [1], общая емкость последовательно соединенных емкостей обедненного слоя и плёнки диэлектрика меньше емкости соответствующей только плёнки диэлектрика. В окрестности дефекта плёнки из-за утечки заряда в полупроводник, обедненный слой не формируется, следовательно, емкость этого участка больше соседних бездефектных участков, где обеднённый слой в кремнии образуется. Поэтому в окрестности дефекта на слой жк будет падать большее напряжение, чем на жк на участках безде-

фектной пленки. Подгонкой шага спирали можно добиться ситуации, когда при соответствующем напряжении, приложенном к ячейке, выполняются одновременно два условия: (1) на участках бездефектной плёнки в кремнии формируется обедненный слой и (2) достигается фаза конфокальной текстуры. В этом случае в окрестности дефектов пленки, где обеднение отсутствует, начинается следующая фаза холестерико-нематического перехода, а именно, переход из конфокальной в гомеотропную.

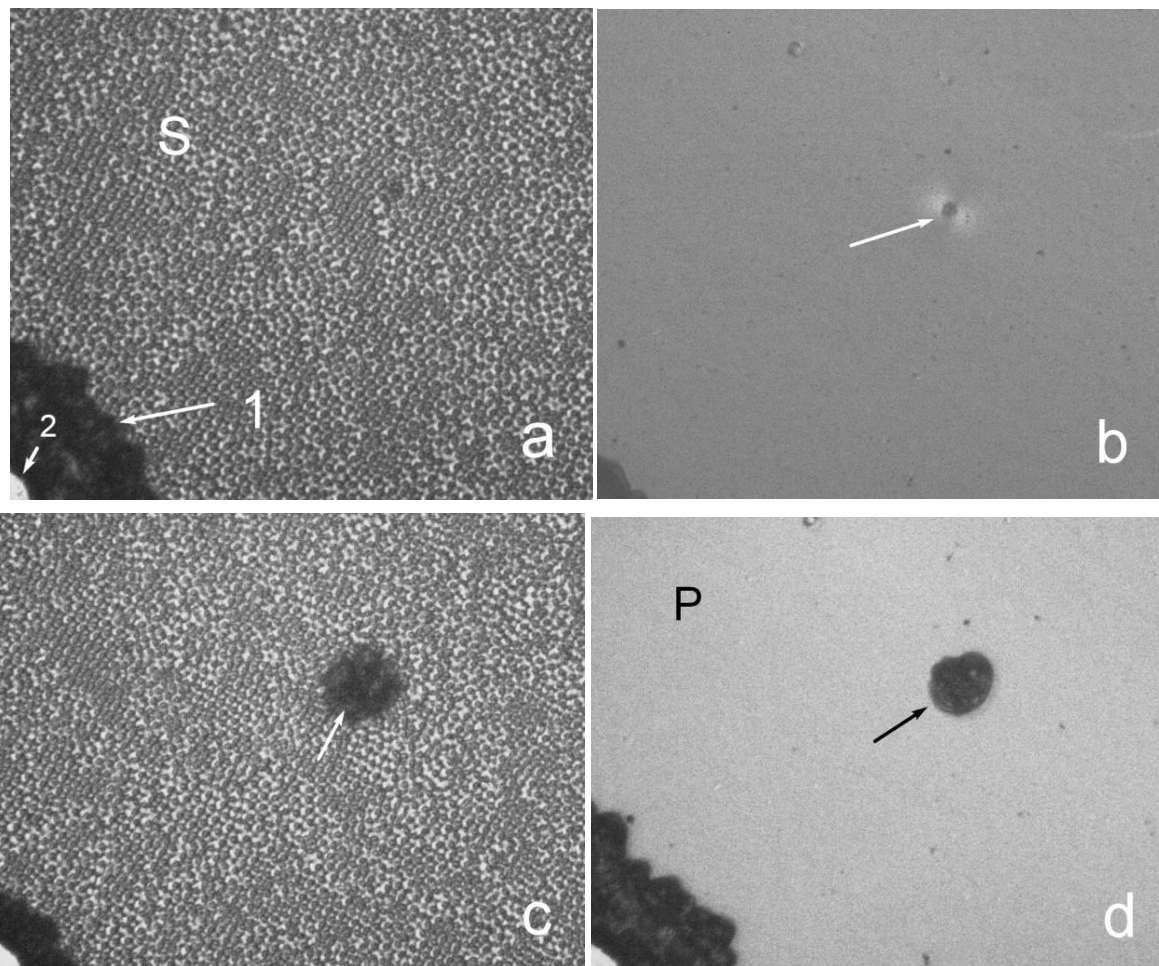


Рис. 2. Фазы холестерико-нематического перехода в окрестности дефекта диэлектрической плёнки. а – Рост конфокальной текстуры (стрелка 1) на фоне текстуры «сетка» (S) от границы воздушного пузырька (стрелка 2). Переменное напряжение 10 В. Частота 1 кГц. б – Деформация планарного холестерика в окрестности дефекта (отмечен стрелкой). Постоянное напряжение 6 В. в – Рост конфокальной текстуры в окрестности дефекта пленки (отмечено стрелкой). Переменное напряжение 10 В. Частота 1 кГц. д – Конфокальная текстура в окрестности дефекта (отмечено стрелкой). Релаксация в исходное состояние. $U = 0$. Поляроиды на (а, с, д) параллельны, на (b) скрещены

Fig. 2. Phases of a cholesteric – nematic transition in the vicinity of a defect in a dielectric film. а – Growth of the confocal texture (arrow 1) on the "grid" texture (S) from the boundary of the air bubble (arrow 2). The alternating voltage is 10 V. The frequency is 1 kHz. б – Deformation of the planar cholesteric in the vicinity of the defect (marked by an arrow). Constant voltage 6 V. в – Growth of the confocal texture in the vicinity of the defect of the film (marked with an arrow). The alternating voltage is 10 V. The frequency is 1 kHz. д – Confocal texture in the vicinity of the defect (marked by an arrow). Relaxation to the initial state. $U = 0$. The polaroids on (а, с, д) are parallel, on (b) they are crossed

Рис. 3 демонстрирует описанную выше ситуацию. В тех местах, где дефекты отсутствуют, хорошо наблюдается конфокальная текстура (С, рис. 3), а в тех местах, где есть дефекты плёнки (стрелка указывает на местоположение одного из дефектов), видны круглые области гомеотропной (Н) ориентации. Характерное отличие этого третьего варианта визуализации дефектов плёнки от вариантов визуализации нематиками [2, 3, 6] и двумя способами, описанными выше, заключается в том, что наблюдается большой диапазон размеров областей с гомеотропной ори-

ентацией, рис. 3. Принимая во внимание, что в основу механизма визуализации положен факт утечки носителей заряда из жк материала в приповерхностный обедненный слой, можно допустить, что такие утечки могут осуществляться не только благодаря непосредственному электрическому контакту жк/Si в открытых порах, но и за счет переноса носителей через тонкий диэлектрик в глухих порах, например, по туннельному механизму.

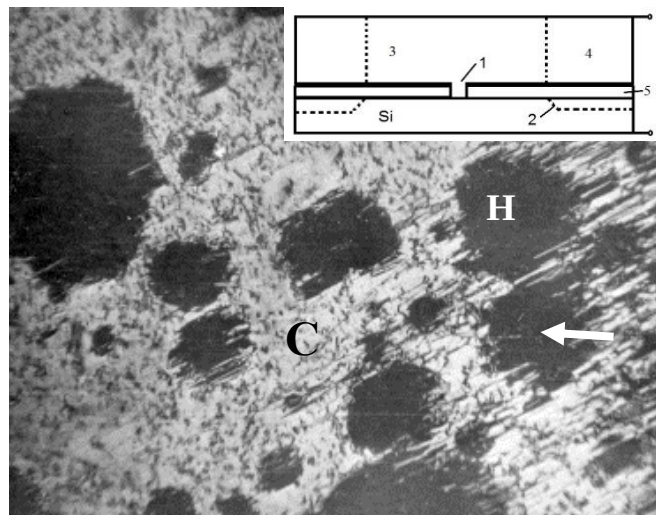


Рис. 3. Раскрутка холестерической спирали в гомеотропное состояние в окрестности дефектов плёнки окиси кремния. Переменное напряжение 54 В Частота 2 кГц. Толщина плёнки SiO_2 0,1 мкм. Удельное сопротивление Si 4,5 Ом*см. Концентрация оптически активной добавки ~ 14%. Вставка: Схематическое представление ХНП в окрестности дефекта плёнки (1), 2 – граница обеднения в кремнии, 4 – конфокальная текстура, 3 – гомеотропная текстура, 5 – плёнка SiO_2

Fig. 3. Untwisting of a cholesteric helix into a homotropic state in the vicinity of defects in a silicon oxide film. Alternating voltage 54 V. Frequency 2 kHz. The thickness of the SiO_2 film is 0.1 μm . Specific resistance of Si is 4.5 Ohm * cm. The concentration of the optically active additive is ~ 14%. Insert: Schematic representation of the ChNT in the vicinity of the defect of the film (1), 2 – the boundary of depletion in silicon, 4 – confocal texture, 3 – homeotropic texture, 5 – SiO_2 film

Выводы

Таким образом, в работе экспериментально показано, что обнаружение (детектирование) дефектов пленки окиси кремния типа открытых пор (допускается и глухих (закрытых)) может выполняться с помощью электрооптических эффектов, имеющих место в холестерических жидких кристаллах. В постоянных электрических полях в окрестности дефекта имеет место деформация поля директора, аналогичная деформации нематика, тогда как для более высоких напряжений, приложенных к холестерической ячейке, имеет место появление текстуры «масляные бороздки». Последняя зарождается потоком жк материала, который, в свою очередь, обусловлен ионным током через жк материал из поры к плоскому электроду. В переменных электрических полях с частотой, исключающей перенос ионов в жк материале, детектирование дефектов возможно при последовательном включении постоянного, а затем переменного напряжения. Кратковременное действие постоянным напряжением, величиной меньше зарождения «масляных бороздок», необходимо для создания начальной деформации холестерической спирали в окрестности дефекта, которая далее инициирует рождение конфокальной, хорошо рассеивающей свет текстуры при действии переменного напряжения. Вариация шага спирали холестерика и напряжения, приложенного к холестерической ячейке (МДП структура), приводит к формированию обедненного основными носителями заряда приповерхностного слоя в кремнии. В окрестности дефектов пленки окиси кремния из-за утечек носителей заряда из жк материала в приповерхностный слой кремния, обедненный слой в кремнии не образуется. Поэтому, благодаря разнице в емкостях (плёнки окиси кремния и последовательно соединенных плёнки окиси кремния с обедненным слоем в кремнии), при соответствующем напряжении над бездефектными участками плёнки окиси кремния наблюдается конфокальная рассеивающая свет текстура, а в окрестности дефектов плёнки – слабо рассеивающая свет гомеотропная текстура.

**Список литературы****References**

1. Muller R., Kamins T. 2003. Device electronics for integrated circuits. New York, Wiley: 530.
2. Gritsenko N.I., Kucheev S.I., Moshel N.V. 1990. Mol.Cryst.Liq.Cryst. 193: 43-46.
3. Невская Г.Е., Чигринов В.Г., Тихомиров И.В., Дзенис С.Ф., Береснев Г.А. 1989. Электрофизика структуры ЖК-Д-полупроводник. Известия АН СССР. сер.физ. 53(10): 2044-2058.
Nevskaya G.E., Chigrinov V.G., Tikhomirov I.V., Dzenis S.F., Beresnev G.A. 1989. Electrophysics of LC-D-semiconductor structure. Izvestiya AN SSSR. iss. phys. 53(10): 2044-2058.
4. Блинов Л.М. 1978. Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. М.: Наука: 384.
Blinov L.M. 1978. Electro and magneto- optics of liquid crystal. M.: Nauka: 384.
5. Gritsenko M.I., Kucheev S.I., Litvin P.M., Tkach V.M., Yelshansky V.B. 2006. Micropatterning in bistable cholesteric device with Bragg's reflection. Semicond. Phys., Quant.Elect. & Optoelect. 9(2): 61-64.
6. Кучеев С.И., Малай Н.В., Тучина Ю.С. 2014. Визуализация потока нематика в окрестности дефекта диэлектрика в структуре Si/SiO₂/нематик/электрод. Научные ведомости БелГУ, Серия Математика. Физика. 5 (176), вып. 34: 191-195.
Kucheev S.I., Malai N.V., Tuchina Yu.S. 2011. Visualization of the nematic flow in the vicinity of a dielectric defect in the Si/SiO₂/nematic/electrode structure. Belgorod State University Scientific Bulletin, Mathematics & Physics. 5 (176), iss. 34: 191-195.



МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ MATHEMATICAL PHYSICS. MATHEMATICAL MODELING

УДК 519.7

ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ВЗАМОДЕЙСТВИЯ ЖИДКОСТИ И ДЕФОРМИРУЕМЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

FEATURES OF THE SOLUTION FOR FLUID-STRUCTURE INTERACTION MATHEMATICAL MODELS

О.А. Гальцева, О.В. Гальцев
O.A. Galtseva, O.V. Galtsev

Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

Belgorod National Research University, 85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia

E-mail: galtseva@bsu.edu.ru, galtsev_o@bsu.edu.ru

Аннотация

В данной работе рассматриваются известные подходы к решению задач однородных однофазных жидкостей. Проводится их модификация и адаптация для использования в решении задач взаимодействия двухфазных жидкостей и упругих тел. С помощью преобразования рассматриваемых уравнений в конечно-элементный вид и проведения пространственной и временной дискретизации было разработано научно-исследовательское программное обеспечение, позволяющее как оценивать напряжение на общей границе «жидкость-упругое тело», так и отслеживать поведение свободной границы раздела жидкостей с учетом структурных деформаций.

Abstract

In the paper, we consider well-known approaches for solving problems of homogeneous single-phase liquids. Its modification and adaptation for use in solving two-phase fluid-structure interaction problems is carried out. Transforming equations into a finite-element form and carrying out spatial and temporal discretization, was developed a research software, that allows to estimate the tension on the common boundary "liquid-elastic body", and to trace the behavior of the free interface taking into account the structural deformations.

Ключевые слова: гидродинамическое моделирование, флюидопотоки, жидкостно-структурное взаимодействие.
Keywords: hydrodynamic modeling, fluid flows, fluid-structure interaction.

Введение

При численном моделировании процесса вытеснения одной жидкостью другой в упругой пористой среде широко использовалось понятие кинематики. Под кинематикой понимается геометрическое описание движения. Тело определяется как совокупность материальных точек, где точка есть абстрактный геометрический объект с некоторыми физическими свойствами. Определим тело β в некотором состоянии k как β_k , где текущее состояние есть состояние тела до деформации. Этот объект β можно определить с помощью функции деформации χ . Положение материальной точки в k обозначим как X , а положение точки в деформированном состоянии (пространственная точка) как x . Функция деформации χ переносит точку X в пространственную точку x (рис. 1).

Можно определить движение по времени как

$$\chi(X, t) = x(X, t) = X + w, \quad (1)$$

где w – вектор перемещения:

$$w = x(X, t) - X. \quad (2)$$

Так как решаемая задача содержит жидкость и твердое тело, то необходимо учесть особенности вектора перемещений. Область жидкостно - структурного взаимодействия (Fluid-

Structure Interaction, FSI) можно определить как единую область, состоящую из твердой и жидкой подобласти $\Omega = \Omega_s \cup \Omega_f$, где Ω_s – твердое тело, Ω_f – жидкость. Поверхность между ними – Γ . Вектор перемещений $w = w_s \in \Omega_s$ и $w = w_m \in \Omega_f$, где w_s – перемещение твердого тела, w_m – перемещение жидкой подобласти. Эти перемещения равны на общей границе «жидкость-твердое тело».

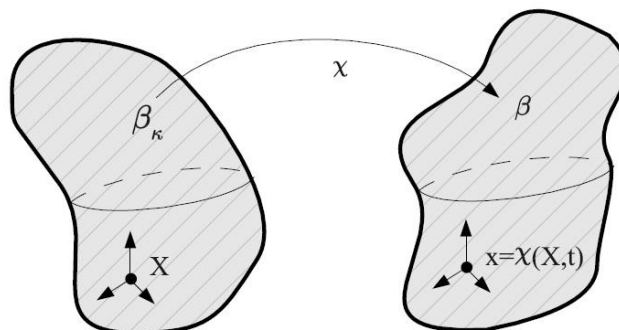


Рис. 1. Состояния тела
Fig. 1. Body conditions

Градиент деформации определим следующим образом

$$F = \nabla' \chi = \nabla' w + \mathbb{I}, \quad (3)$$

где $\mathbb{I}$ – единичный тензор. Оператор дифференцирования по X обозначим как ∇' , а градиент по x как ∇ . Детерминант (определитель) F есть

$$J = \det(F). \quad (4)$$

Подавляющее большинство численных исследований жидкостно-структурного взаимодействия базируются на лагранжевом, эйлеровом и лагранжево-эйлеровом (Arbitrary Lagrangian-Eulerian, ALE) [3, 4] описании тел. В лагранжевом описании (обычно используется для описания упругого тела) отслеживается движение материальных точек в пространстве через границы эйлеровой ячейки (рис. 2).

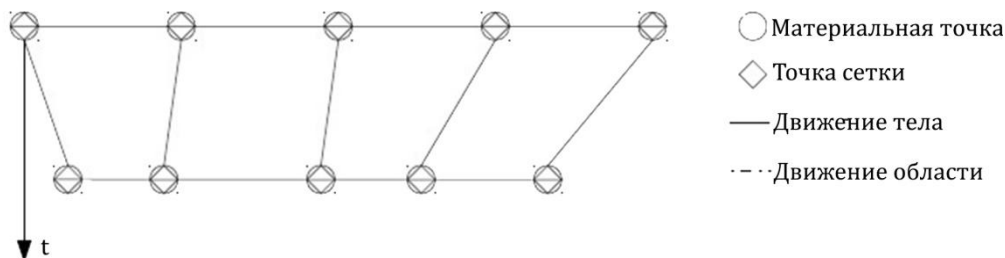


Рис. 2. Одномерная демонстрация лагранжевого описания. Точки сетки движутся вместе с материальными точками

Fig. 2. One-dimensional demonstration of the Lagrangian description. The grid points move along with the material points

В эйлеровом описании (обычно используется для описания жидкости) определяется, насколько материальные точки сдвинулись с течением времени по отношению к узлам сетки (рис. 3).

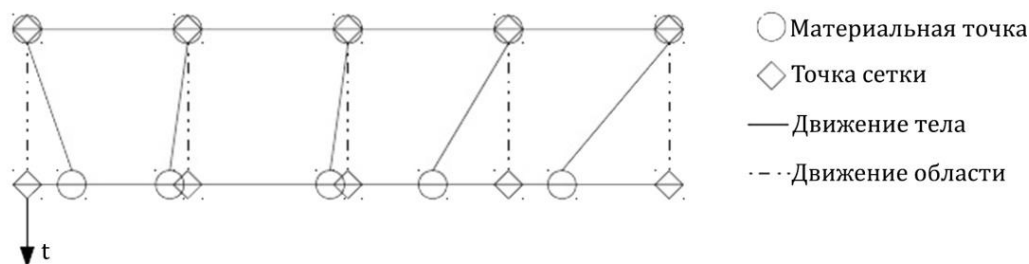


Рис.3. Одномерная демонстрация эйлерового описания. Точки сетки остаются неподвижными в то время, как материальными точками перемещаются

Fig. 3. One-dimensional demonstration of the Euler description. The grid points remain stationary while the material points are moving

Задачи жидкостно-структурного взаимодействия требуют общего описания для уравнений, описывающих движение жидкости и твердого тела. Нами была выбрана третья формулировка, которая объединяет две предыдущие и позволяет расчетной сетке деформироваться в ответ на структурные изменения, а главным преимуществом является способность сохранять высокую точность вблизи границы раздела упругого тела и жидкости (рис. 4).

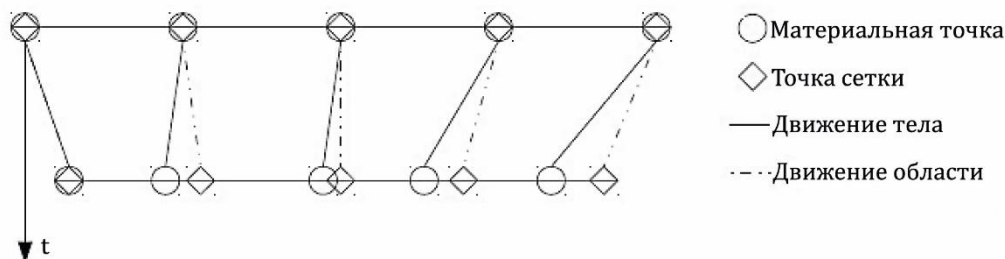


Рис. 4. Одномерная демонстрация произвольного лагранжево-эйлерового описания. Точки сетки перемещаются произвольно вместе с материальными точками

Fig. 4. One-dimensional demonstration of an arbitrary Lagrangian-Euler description. The grid points move arbitrarily along with the material points

В этом подходе некоторые точки могут совпадать с материальными точками, некоторые остаются без изменений, а остальные находятся между ними.

Основные уравнения основываются на законе баланса или сохранения с некоторыми дополнениями для конкретных веществ и кинематических отношений. Эти законы применяются для некоторой пространственной области R , изменение массы в области равно массе на входе и выходе, изменение линейных импульсов в области равно результирующей силе, действующей на область.

Первый закон – это закон баланса (сохранения) массы:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0, \quad (5)$$

где $\rho(x, t)$ – плотность вещества, $v(x, t)$ – его скорость.

Второй закон – баланс импульса:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \nabla \cdot T + \rho g, \quad (6)$$

где $g(x, t)$ – массовая сила, Dv/Dt – производная по времени

$$\frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v, \quad (7)$$

$$T(x, t) = 2\mu \mathbb{D}(v) - p\mathbb{I}.$$

В эйлеровой формулировке

$$T = T^T.$$

Твердое вещество рассматривается как упругое тело, а жидкость есть вязкая и несжимаемая.

Рассматриваемые уравнения

Основное уравнение для упругого тела записывается в лагранжевой формулировке [2]:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} - \nabla \cdot (2\lambda \mathbb{D}(w) - p\mathbb{I}) + \rho g = 0, X \in \Omega_s, \quad (8)$$

где v – поле скоростей, а $\mathbb{D}(w)$ – симметричный тензор второго порядка вида

$$\mathbb{D}(w) = \frac{1}{2} (\nabla' w + (\nabla' w)^T). \quad (9)$$

Введение второго поля (перемещения) требует условия на скорость и перемещение, чтобы замкнуть систему уравнений

$$\frac{\partial w}{\partial t} - v = 0, X \in \Omega_s. \quad (10)$$

Подставив (10) в (8), получим уравнение для w :

$$\rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - \nabla \cdot (2\lambda \mathbb{D}(w) - p\mathbb{I}) + \rho g = 0, X \in \Omega_s. \quad (11)$$

Для численного решения задачи совместного движения жидкости и упругого тела используются обе формулировки, как формулировка двух функций (w, v) – уравнений (8) и (10), так и формулировка одной функции (w) – уравнение (11).

Приведем две формулировки уравнений для жидкой компоненты. Первая – эйлерово (естественное) описание жидкости, вторая – свободная лагранжево-эйлерова формулировка (ALE).



ALE-описание необходимо для моделирования жидкостно-структурного взаимодействия и позволяет связать граничные условия жидкости и упругого тела.

Для вязкой несжимаемой жидкости система уравнений состоит из уравнения Стокса в эйлеровой формулировке [1]:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} - \nabla \cdot (2\mu \mathbb{D}(v) - p\mathbb{I}) + \rho g = 0, x \in \Omega_f(t), \quad (12)$$

где $\Omega_f(t)$ – текущая деформируемая область жидкости, v – поле скоростей жидкости, p – давление, μ – вязкость, а $\mathbb{D}(v)$ – симметричный тензор второго порядка вида

$$\mathbb{D}(v) = \frac{1}{2}(\nabla v + (\nabla v)^T) \quad (13)$$

и условия несжимаемости

$$\nabla \cdot v = 0, x \in \Omega_f(t). \quad (14)$$

Как говорилось ранее, произвольная лагранжево-эйлерова формулировка необходима для описания жидкостно-структурного взаимодействия в виде единой системы. Для этого перепишем уравнения (12) и (14), используя следующие отношения:

$$\nabla v = \nabla' v_k F^{-1}, \quad (15)$$

и

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial v_k}{\partial t} - v_m \cdot (\nabla' v_k F^{-1}), \quad (16)$$

где k – индекс, обозначающий переменные в ALE формулировке, v_m – скорость области жидкости, которая определяется как $v_m = \partial \chi / \partial t$. Таким образом, уравнение (12) примет вид

$$\rho \frac{\partial v_k}{\partial t} - \nabla \cdot (2\mu \mathbb{D}(v_k) - p_k \mathbb{I}) + \rho g_k = 0, X \in \Omega_f(0), \quad (17)$$

и

$$(F^{-1} : \nabla' v_k^T) = 0, X \in \Omega_f(0), \quad (18)$$

где $\Omega_f(0)$ – рассматриваемая область, занятая жидкостью. Тензор напряжения будет иметь вид

$$\mathbb{D}(v_k) = \frac{1}{2}(\nabla' v_k F^{-1} + F^{-T}(\nabla' v_k)^T). \quad (19)$$

Теперь, когда система уравнений Стокса записана в произвольной лагранжево-эйлеровой формулировке, возможно совместить ее с уравнениями для упругого тела и решить задачу жидкостно-структурного взаимодействия.

Двухфазное течение можно реализовать различными способами, например, методом установления уровня жидкости (level-set метод) или методом объема жидкости (volume of fluid). В обоих методах решается транспортное уравнение:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + v \cdot \nabla \phi = 0, x \in \Omega_f, \quad (20)$$

где ϕ – транспортная функция. В методе установления уровня поверхность между двумя жидкостями определяется как заданная изоповерхность. Следовательно на каждом шаге по времени фаза в каждой расчетной ячейке определяется простым скалярным сравнением.

Для уравнения (20), как и для уравнения (17), необходима ALE-формулировка для поиска значений деформированной расчетной области

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + (v_k - v_m) \cdot \nabla \phi = 0, X \in \Omega_f, \quad (21)$$

где $v_m = (x(t_{n+1}) - x(t_n))/\Delta t$ – скорость расчетной сетки и Δt есть шаг по времени.

Следует отметить, что уравнения (17), (18) и (21) представляют собой связанную систему, где существует взаимное влияние level-set функции на поле скоростей жидкости и наоборот. Если эта задача дополняется третьей фазой (упругое тело), то жидкости будут влиять на перемещения упругого тела [5], а тело в свою очередь будет действовать на сетку жидкой подобласти (рис. 5).

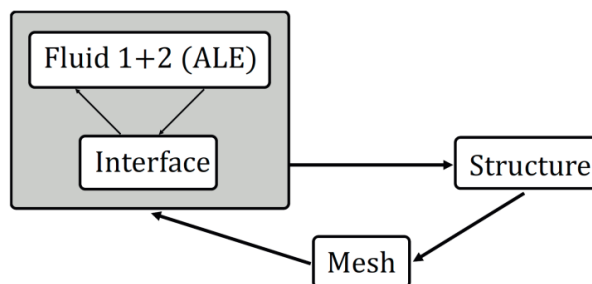


Рис. 5. Взаимодействие двухфазной жидкой компоненты и упругого тела. Fluid – жидкость, Structure – упругое тело, Mesh – сетка, Interface – граница раздела жидкостей

Fig. 5. Interaction of a two-phase liquid component and an elastic body. Fluid – the liquid, Structure – the elastic body, Mesh – the mesh, Interface – the interface of liquids

Граничные и начальные условия

В области $\Omega_f = \Omega_f^+ \cup \Omega_f^- \cup \gamma$, где γ – граница раздела областей Ω_f^+ и Ω_f^- , численно решалась задача, состоящая из системы уравнений (12)–(14), (20) в Ω_f (рис. 6).

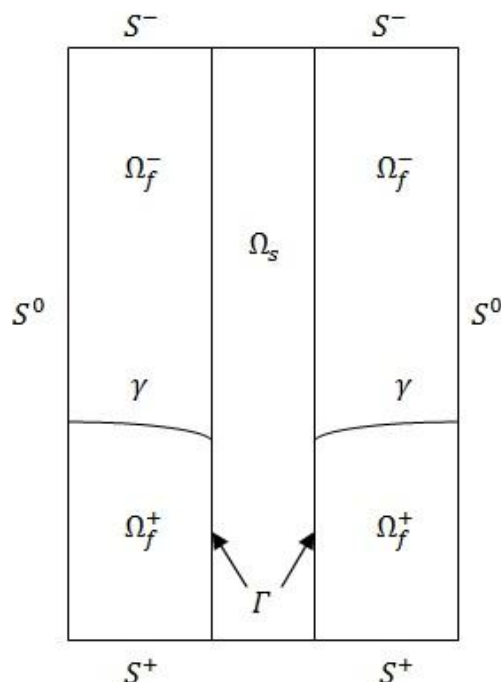


Рис. 6. Рассматриваемая область, граничные условия и системы уравнений (8), (9) в Ω_s , дополненных граничными условиями

Fig.6. The considered region, boundary conditions and systems of equations (8), (9) in Ω_s supplemented by the boundary conditions

$$(2\mu \mathbb{D}(v) - p\mathbb{I})n = -p^\pm n, x \in S^\pm, \quad (22)$$

$$(2\mu \mathbb{D}(v) - p\mathbb{I})n = (\lambda \mathbb{D}(w) - p\mathbb{I})n, x \in \Gamma, \quad (23)$$

$$v^f \cdot n = 0, \quad n \cdot (2\mu \mathbb{D}(v^f) - p^f \mathbb{I})n = 0, x \in S^0, \quad (24)$$

где S^0 – граница симметрии.

Система (8), (9), (12), (14), (20) дополняется начальными условиями:

$$w|_{t=0} = 0, \quad x \in \Omega, \quad v|_{t=0} = 0, \quad x \in \Omega, \quad \varphi|_{t=0} = 0, \quad x \in \Omega_f. \quad (25)$$

Перемещение упругого тела определяет перемещение расчетной сетки на поверхности раздела жидкость-упругое тело:

$$w_m = w_s, x \in \Gamma, \quad (26)$$

где w_m – перемещение расчетной сетки.

Метод конечных элементов

Метод конечных элементов [6, 7, 8] используется для решения начально-краевых задач, записанных в частных производных, предварительно преобразованных в алгебраические уравнения, которые аппроксимируют начальные уравнения. Метод взвешенных невязок используется для преобразования дифференциальных уравнений в интегральный вид (слабая формулировка). Пространственная дискретизация слабой формулировки позволяет получить систему обыкновенных дифференциальных уравнений во времени (полудискретная форма). Временная дискретизация этих полудискретных уравнений приводит к полностью дискретной системе алгебраических уравнений [9, 10]. Если она нелинейна, то ее необходимо линеаризовать.

Для записи слабой формулировки необходимо умножить рассматриваемые уравнения на произвольную пробную функцию вида $w \in H_0^1(\Omega^f(0))$ и проинтегрировать каждое слагаемое по области.

Таким образом слабая форма уравнения упругости будет иметь следующий вид:

$$\int_{\Omega_s} \rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \cdot w - \int_{\Omega_s} \text{div}(2\mu \mathbb{D}(w) - p\mathbb{I}) \cdot w - \int_{\Omega_s} \rho g \cdot w = 0. \quad (27)$$

Используя интегрирование по частям, тензор напряжений примет вид:

$$\int_{\Omega_s} \text{div}(2\mu \mathbb{D}(w) - p\mathbb{I}) \cdot w = \int_{\partial\Omega_s} t \cdot w - \int_{\Omega_s} (\mathbb{D}(w) - p\mathbb{I}) \cdot \nabla w, \quad (28)$$



где $t \equiv (\mathbb{D}(w) - p\mathbb{I}) \cdot n$. Подставив (28) в (27), получим:

$$\int_{\Omega_s} \rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \cdot w + \int_{\Omega_s} (2\mu \mathbb{D}(w) - p\mathbb{I}) : \mathbb{D}(w) - \int_{\Omega_s} \rho g \cdot w - \int_{\partial\Omega_s} t \cdot w = 0, \quad (29)$$

Прделаем такую же процедуру для уравнений (8) и (10), взяв пробные функции v и w соответственно:

$$\int_{\Omega_s} \rho \frac{\partial v}{\partial t} \cdot v + \int_{\Omega_s} (2\mu \mathbb{D}(w) - p\mathbb{I}) : \mathbb{D}(v) - \int_{\Omega_s} \rho^s g \cdot v - \int_{\partial\Omega_s} t \cdot v = 0. \quad (30)$$

$$\int_{\Omega_s} \frac{\partial w}{\partial t} \cdot w - \int_{\Omega_s} v \cdot w = 0, \quad (31)$$

В слабой формулировке система уравнений Стокса будет иметь вид

$$\int_{\Omega_f} \rho \frac{\partial v}{\partial t} \cdot v + \int_{\Omega_f} 2\mu \mathbb{D}(v) : \mathbb{D}(v) - \int_{\Omega_f} p \operatorname{div} v = \int_{\Omega_f} \rho g \cdot v + \int_{\partial\Omega_f} t \cdot v, \quad (32)$$

$$\int_{\Omega_f} \hat{p} \operatorname{div} v = 0, \quad (33)$$

где $\hat{p}$ – пробная функция давления.

Для формы записи ALE процедура будет такая же, за исключением того, что необходимо учесть переход от эйлерового вида в ALE форму

$$\int_{\Omega_f(t)} f(x) dx = \int_{\Omega_f(0)} f_k(X) dX. \quad (34)$$

Далее $\Omega_f \equiv \Omega_f(0)$. Взяв такую же пробную функцию, как и для уравнений в эйлеровой формулировке, получим слабую формулировку уравнений (17) и (18)

$$\int_{\Omega_f} J \rho \frac{\partial v_k}{\partial t} \cdot v + \int_{\Omega_f} J (2\mu \mathbb{D}(v_k) - p_k \mathbb{I}) F^{-T} : \mathbb{D}(v) - \int_{\Omega_f} J \rho g_k \cdot v - \int_{\partial\Omega_f} J t_k \cdot v = 0, \quad (35)$$

$$\int_{\Omega_f} (J F^{-1} : \nabla' v_k^T) \cdot \hat{p} = 0. \quad (36)$$

Пространственная дискретизация

Смысл дискретизации состоит в разбиении ограниченной области на отдельные кусочно-непрерывные подобласти. Совокупность таких элементов определяется как сетка или триангуляция, которая является моделью исходной области. Основные переменные аппроксимируются узловыми значениями, умноженными на базисный вектор, который необходим для интерполяции внутри элемента. Наша аппроксимация будет иметь следующий вид:

$$w \approx \sum_{j=1}^n w_j W_j, v \approx \sum_{j=1}^n v_j V_j, p \approx \sum_{j=1}^n \hat{p}_j P_j, \quad (37)$$

где w_j, v_j и $\hat{p}_j$ – j -е базисные вектора, n – количество узлов, а W_j, V_j и P_j – j -е значения в узлах, связанные с первичными переменными. В методе Галеркина набор базисных векторов берется такой же, как и набор взвешенных векторов. Таким образом, взвешенные функции можно определить следующим образом:

$$w = \sum_{i=1}^n w_i \widehat{W_i}, v = \sum_{i=1}^n v_i V_i, \hat{p} = \sum_{i=1}^n \hat{p}_i P_i. \quad (38)$$

Узловые значения, связанные со взвешенными функциями, являются произвольными, поэтому ими можно пренебречь.

Временная дискретизация

Для аппроксимации по времени рассматриваемых уравнений используются конечные разности. Общее уравнение после пространственной дискретизации будет иметь вид:

$$\frac{dv(t)}{dt} = g(t). \quad (39)$$

Интегрируя обе части по временному шагу

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{dv(t)}{dt} dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} g(t) dt. \quad (40)$$

Первый интеграл можно записать как

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{dv(t)}{dt} dt = v^{n+1} - v^n. \quad (41)$$

а второй интеграл можно аппроксимировать только используя среднее значение для некоторого времени τ :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} g(t) dt \approx g(\tau) \Delta t, \quad (42)$$

где $t_n \leq \tau \leq t_{n+1}$. Тогда явная левая и неявная правая эйлерова аппроксимация будут иметь вид

$$\frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} = g(t_{n+1}), \quad \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} = g(t_n). \quad (43)$$

Для того, чтобы совместить левый и правый эйлеровы методы, воспользуемся θ – методом:

$$\frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} = \theta g(t_{n+1}) + (1 - \theta) g(t_n), \quad (44)$$

где $\theta = 1$ или $\theta = 0$. Особый случай, когда $\theta = 0.5$, можно аппроксимировать как

$$\frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} = 0.5(g(t_{n+1}) + g(t_n)), \quad (45)$$

чтобы удовлетворить условие второго порядка точности по времени.

Используя θ -метод, перепишем уравнения 30 и 31 в следующем виде:

$$\int_{\Omega_s} \rho \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} \cdot v = \theta \left(- \int_{\Omega_s} T_R^{n+1} \cdot v + \int_{\partial\Omega_s} t^{n+1} \cdot v \right)$$



$$+(1-\theta)\left(-\int_{\Omega_s} T_R^n \cdot v + \int_{\partial\Omega_s} t^n \cdot v\right), \quad (46)$$

$$\int_{\Omega_s} \rho \frac{w^{n+1}-w^n}{\Delta t} \cdot w = \theta \int_{\Omega_s} v^{n+1} \cdot w + (1-\theta) \int_{\Omega_s} v^n \cdot w, \quad (47)$$

где $T_R = 2\mu\mathbb{D}(v) - p\mathbb{I}$. Здесь для краткости не дискретизированны по времени, однако производные по времени находятся с использованием θ -метода.

Уравнения жидкостно-структурного взаимодействия

Систему уравнений жидкостно структурного взаимодействия можно представить в следующем виде:

$$\begin{bmatrix} J_{w_s w_s} & J_{w_s v_s} & J_{w_s v_f} & J_{w_s p_f} & J_{w_s w_m} \\ J_{v_s w_s} & J_{v_s v_s} & J_{v_s v_f} & J_{v_s p_f} & J_{v_s w_m} \\ J_{v_f w_s} & J_{v_f v_s} & J_{v_f v_f} & J_{v_f p_f} & J_{v_f w_m} \\ J_{p_f w_s} & J_{p_f v_s} & J_{p_f v_f} & J_{p_f p_f} & J_{p_f w_m} \\ J_{w_m w_s} & J_{w_m v_s} & J_{w_m v_f} & J_{w_m p_f} & J_{w_m w_m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W_s \\ V_s \\ V_f \\ P_f \\ W_m \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} R_{w_s} \\ R_{v_s} \\ R_{v_f} \\ R_{p_f} \\ R_{w_m} \end{bmatrix},$$

где переменные упругой компоненты обозначаются индексом s , жидкой компоненты – f , а сеточные переменные m . Нелинейные члены линейризуются с помощью метода Ньютона-Рафсона, основанного на определении якобиана:

$$J_{hk} \equiv \frac{\partial R_h}{\partial K}, \quad (48)$$

где R_h есть h -й остаток и K – некоторая неизвестная.

Эта система возникает путем нахождения остатков дискретизованных уравнений (ошибок дискретизации) и применения разложения в ряд Тейлора этих остатков.

Твердое тело исследуется в формулировках двух переменных уравнений упругости, где остатки находятся как

$$R_{w_s}^i = \int_{\Omega_s} \frac{\partial w_s}{\partial t} \cdot w_s^i - \int_{\Omega_s} v_s \cdot w_s^i, \quad (49)$$

$$R_{v_s}^i = \int_{\Omega_s} \rho_s \frac{\partial v_s}{\partial t} \cdot v_s^i + \int_{\Omega_s} (2\mu \mathbb{D}(w_s) - p\mathbb{I}) : \mathbb{D}(v_s^i) - \int_{\Gamma} t_s \cdot v_s^i. \quad (50)$$

Положение границы <<жидкость-упругое тело>> определяется нормальным напряжением

$$t_s = (\mu_f(\nabla' v_k F^{-1} + F^{-T} \nabla' v_k^T) - p_k \mathbb{I}) \cdot (J F^{-T} n). \quad (51)$$

Жидкость описывается системой уравнений Стокса в ALE формулировке со следующими остатками:

$$R_{v_f}^i = \int_{\Omega_f} \left(J \rho_f \frac{\partial v_k}{\partial t} \cdot v_f^i \right) + \int_{\Omega_f} (J(\mu_f(\nabla' v_k F^{-1} + F^{-T} \nabla' v_k^T) - p_k \mathbb{I}) F^{-T}) \nabla' v_f^i, \quad (52)$$

и

$$R_{p_f}^i = \int_{\Omega_f} (J F^{-1} : \nabla' v_k^T) \cdot \hat{p}^i, \quad (53)$$

где индекс k указывает на принадлежность к области ALE. Остаток для расчетной сетки:

$$R_{w_m}^i = \int_{\Omega_f} \mu_m (\nabla' w_m + \nabla' w_m^T) \nabla' w_m^i. \quad (54)$$

Используя эти определения и применив уравнение (48), можно определить якобианы. Многие якобианы в общей системе равны нулю:

$$\begin{bmatrix} J_{w_s w_s} & J_{w_s v_s} & 0 & 0 & 0 \\ J_{v_s w_s} & J_{v_s v_s} & J_{v_s v_f} & J_{v_s p_f} & J_{v_s w_m} \\ 0 & 0 & J_{v_f v_f} & J_{v_f p_f} & J_{v_f w_m} \\ 0 & 0 & J_{p_f v_f} & 0 & J_{p_f w_m} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & J_{w_m w_m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W_s \\ V_s \\ V_f \\ P_f \\ W_m \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} R_{w_s} \\ R_{v_s} \\ R_{v_f} \\ R_{p_f} \\ R_{w_m} \end{bmatrix}.$$

Для удобства обозначим $()' \equiv \partial()/\partial W_m$. При оценке якобиана необходимы следующие тождества:

$$J' = J \text{tr}(F' F^{-1}), \quad (55)$$

$$(F^{-T})' = ((F^{-1})')^T, \quad (56)$$

$$(F^{-1})' = -F^{-1} F' F^{-1}, \quad (57)$$

$$F' = \nabla' w_m^j. \quad (58)$$

Аппроксимируем скорость движения сетки в жидкой компоненте как $v_m \approx (\chi - \chi^n)/\Delta t$, следовательно

$$v_m' = \frac{w_m^j}{\Delta t}. \quad (59)$$

Якобианы твердой части будут иметь вид:



$$J_{w_s w_s}^{ij} = \int_{\Omega_s} \frac{\partial w_s^j}{\partial t} \cdot w_s^i, \quad (60)$$

$$J_{w_s v_s}^{ij} = - \int_{\Omega_s} v_s^j \cdot w_s^i, \quad (61)$$

$$J_{v_s w_s}^{ij} = \int_{\Omega_s} T_R^j \nabla' v_s^i, \quad (62)$$

$$J_{v_s v_s}^{ij} = \int_{\Omega_s} \rho_s \frac{\partial v_s^j}{\partial t} \cdot v_s^i, \quad (63)$$

где

$$T_R^j = \nabla' w_s^j (2\mu_s \mathbb{D}(w_s) + p_s \mathbb{I}) + (\mathbb{I} + \nabla' w_s) (2\mu_s \mathbb{D}(w_s^j) + p_s \mathbb{I}). \quad (64)$$

Якобианы жидкости будут иметь следующий вид:

$$J_{v_f p_f}^{ij} = - \int_{\Omega_f} J \hat{p}_f^j F^{-T} \nabla' v_f^i, \quad (65)$$

$$J_{p_f v_f}^{ij} = \int_{\Omega_f} (J F^{-1} : \nabla' v_f^j) \hat{p}_f^i, \quad (66)$$

$$J_{v_f v_f}^{ij} = \int_{\Omega_f} J \rho_f \frac{\partial v_f^j}{\partial t} \cdot v_f^i + \int_{\Omega_f} J \rho_f v_f^j (\nabla' v_k F^{-1}) \cdot v_f^i + \\ + \int_{\Omega_f} (J \mu_f \nabla' v_f^j F^{-1} F^{-T}) \nabla' v_f^i + \int_{\Omega_f} (J \mu_f F^{-T} \nabla' v_f^j F^{-T}) \nabla' v_f^i. \quad (67)$$

Якобиан расчетной сетки

$$J_{w_m w_m}^{ij} = \int_{\Omega_f} \mu_m (\nabla' w_m^j + \nabla' w_m^{jT}) \nabla' w_m^i, \quad (68)$$

И якобианы взаимодействия жидкости и расчетной сетки будут иметь вид

$$J_{v_f w_m}^{ij} = \int_{\Omega_f} J' \rho_f \frac{\partial v_k}{\partial t} \cdot v_f^i - \int_{\Omega_f} (J' p_k F^{-T}) \nabla' v_f^i - \int_{\Omega_f} (J p_k (F^{-T})') \nabla' v_f^i + \\ + \int_{\Omega_f} (J' \mu_f \nabla' v_k F^{-1} F^{-T}) \nabla' v_f^i + \int_{\Omega_f} (J \mu_f \nabla' v_k (F^{-1})' F^{-T}) \nabla' v_f^i + \\ + \int_{\Omega_f} (J \mu_f \nabla' v_k F^{-1} (F^{-T})') \nabla' v_f^i + \int_{\Omega_f} (J' \mu_f F^{-T} \nabla' v_k^T F^{-T}) \nabla' v_f^i + \\ + \int_{\Omega_f} (J \mu_f (F^{-T})' \nabla' v_k^T F^{-T}) \nabla' v_f^i + \int_{\Omega_f} (J \mu_f F^{-T} \nabla' v_k^T (F^{-T})') \nabla' v_f^i, \quad (69)$$

$$J_{p_f w_m}^{ij} = \int_{\Omega_f} (J' F^{-1} : \nabla' v_k^T) \cdot \hat{p}^i + \int_{\Omega_f} (J (F^{-1})' : \nabla' v_k^T) \cdot \hat{p}^i. \quad (70)$$

Ключевым моментом здесь является то, что пробные функции также должны быть непрерывными, так как они определены с использованием таких же базисных векторов, как и для скоростей и перемещений. Это означает, что $v_f - v_s|_{\Gamma} = 0$. Перемещение твердого тела определяет смещение сетки на границе <<жидкость – твердое тело>>

$$w_m - w_s|_{\Gamma} = 0, \quad (71)$$

и скорость твердого тела определяет скорость жидкости на этой же границе

$$v_f - v_s|_{\Gamma} = 0. \quad (72)$$

Численные алгоритмы решения задачи жидкостноструктурного взаимодействия в упругих пористых средах

Реализовать описанную выше конечно-элементную формулировку можно четырьмя различными способами:

- однонаправленной связью;
- частичной связью;
- монолитной связью;
- частично-монолитной связью упругой и жидкой компонент.

Алгоритм частичной связи упругой и жидкой компонент

В данном алгоритме жидкая компонента определяется после задания начальных и граничных условий (рис. 7). Условие 72 означает, что на границе раздела Γ скорости должны быть равными. Если это первая FSI-итерация по времени, скорость упругого тела берется с последнего временного шага, в противном случае – с предыдущей итерации. Далее находятся остатки и якобианы. Это необходимо для выполнения условия нелинейности несжимаемости жидкости. Для первой итерации Ньютона оценка берется с предыдущего шага по времени. Норму невязки l^∞ рассчитывается для определения сходимости и, при необходимости, система решается повторно для обновления решения. Здесь для сходимости необходимо $l^\infty < e - 14$. Если решение не сходится, система уравнений Стокса решается с помощью прямого линейно-алгебраического решателя. Действия повторяются, пока одно из условий сходимости не будет удовлетворено.



Рис. 7. Блок-схема жидкостно-структурного взаимодействия с частичной связью упругой и жидкой компонент

Fig. 7. Block diagram of the liquid-structural interaction with the partial coupling of the elastic and liquid components

Далее происходит переход к решению системы уравнений Ламе, которое также начинается с применения граничных условий. Условия для упругой компоненты на границе раздела «жидкость–твёрдое тело» соблюдаются в слабой форме и их необходимо добавить в остаток. Остатки и якобианы упругой компоненты получаются с границы Γ из уравнения (51). Так как используется нелинейная деформация, то необходимо использовать итерации Ньютона для достижения сходимости, как для жидкой компоненты. Условие для этого базируется на разности перемещений упругого тела на границе Γ между текущей и предыдущей FSI-итерацией. Для первой общей FSI-итерации решение предыдущего временного шага используется в нахождении решения предыдущей FSI-итерации. Далее берется норма разности L^2 по границе. Если $L^2 > \epsilon - 8$, то решение считается не сходящимся и необходимы дополнительные FSI-итерации. Если необходимо, то можно воспользоваться методом релаксации для обеспечения сходимости.

Далее, следуя алгоритму, происходит определение перемещения расчетной сетки. У движения сетки есть строгие условия на поверхности Γ , что перемещение сетки и упругого тела здесь равны (71). В отличие от жидкости и упругого тела, движение сетки основано на системе линейных уравнений и это означает, что данное решение сходится на первой итерации каждой общей итерации. Далее процесс повторяется, пока не будет достигнуто определенное условие окончания расчетов.

Алгоритм монолитной связи упругой и жидкой компонент

Отличительной чертой данного подхода является то, что граничные условия здесь определены глобально (рис. 8). Также, как можно видеть на рисунке 8, нахождение неизвестных для жидкости, упругой части и расчетной сетки происходит последовательно и, если необходимо удовлетворить условие сходимости, произвести итерации Ньютона. И уже после достижения сходимости можно перейти на следующий временной слой.

Алгоритм частично-монолитной связи упругой и жидкой компонент

Используемый нами алгоритм частично-монолитной связи упругой и жидкой компонент получается из двух вышеописанных. Граничные условия так же, как и в алгоритме с монолитной связью, определяются глобально. Этот алгоритм решает уравнения Стокса и Ламе только монолитно, но после нахождения решения и проверки на сходимость, как в алгоритме частичной

связью жидкости и упругого тела. Эти два процесса повторяются в общих FSI-итерациях, пока параметры общей сходимости не будут достигнуты (рис. 9).

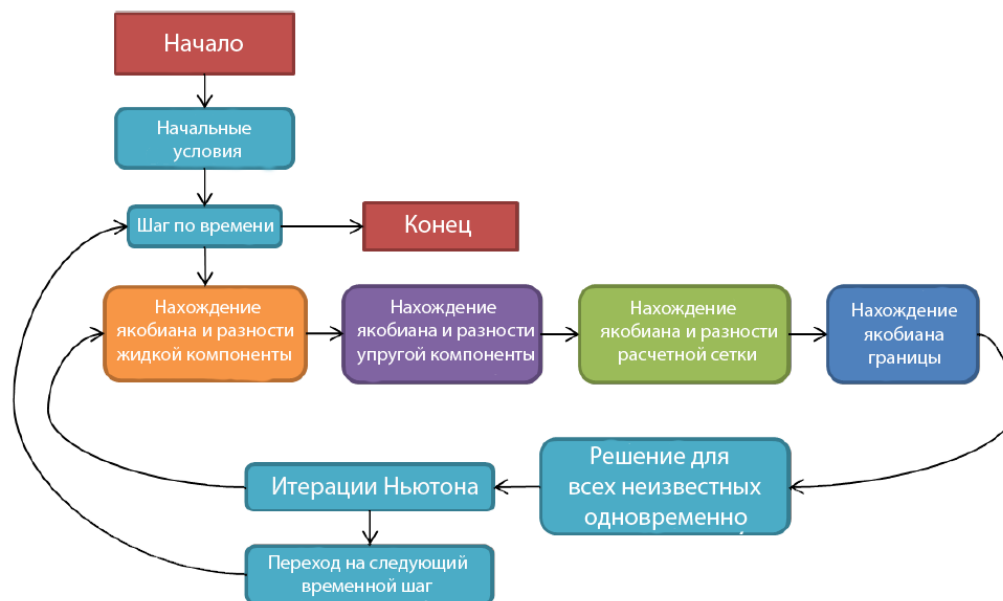


Рис. 8. Блок-схема жидкостно-структурного взаимодействия с монолитной связью упругой и жидкой компонент

Fig. 8. Block diagram of the liquid-structural interaction with the monolithic relation of the elastic and liquid components

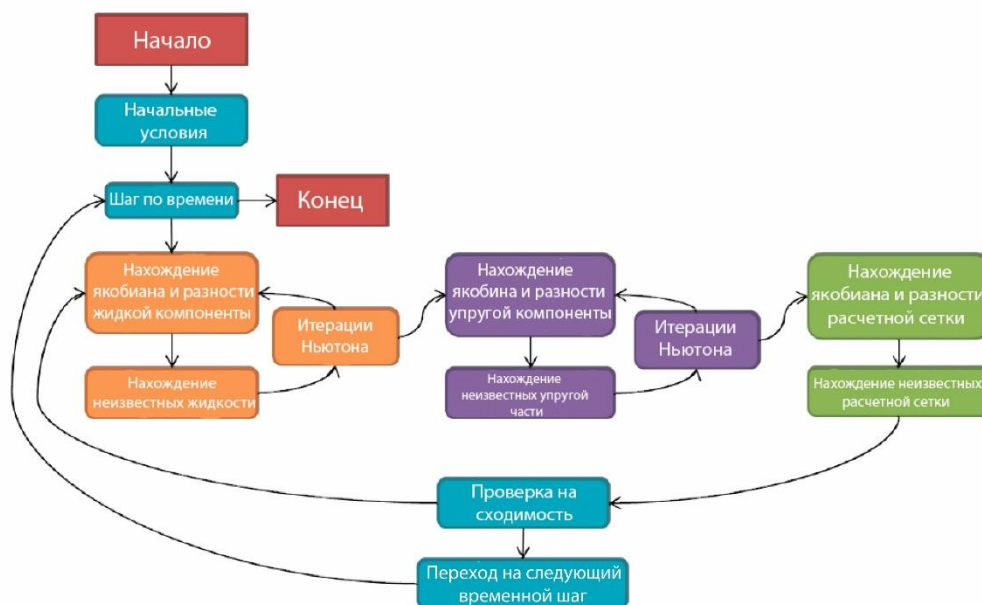


Рис. 9. Блок-схема жидкостно-структурного взаимодействия с частично-монолитной связью упругой и жидкой компонент

Fig. 9. Block diagram of the liquid-structural interaction with a partially-monolithic relation of the elastic and liquid components

Апробация разработанных алгоритмов решения математических моделей совместного движения неоднородных жидкостей

Описанные выше алгоритмы использовались при численном моделировании процесса вытеснения нефти водой в упругом поровом пространстве.

На рисунке 10 и 11 представлены графики, отражающие изменение позиции границы раздела жидкостей с течением времени для различных коэффициентов упругости Ламе без учета поверхностного натяжения.

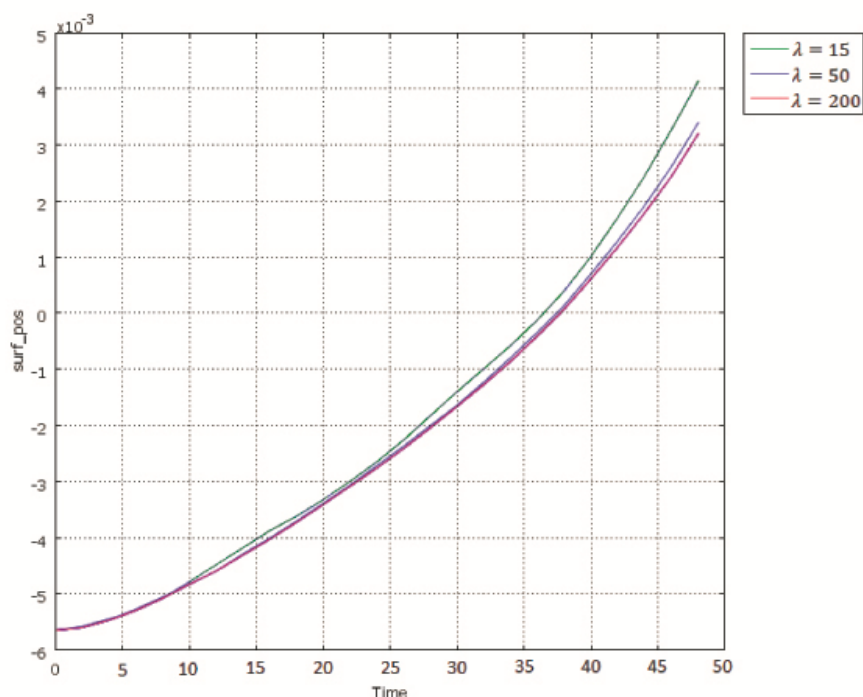


Рис. 10. График изменения позиции свободной границы с течением времени для различных значений λ

Fig. 10. The graph of changing the position of the free boundary with the passage of time for different values of λ

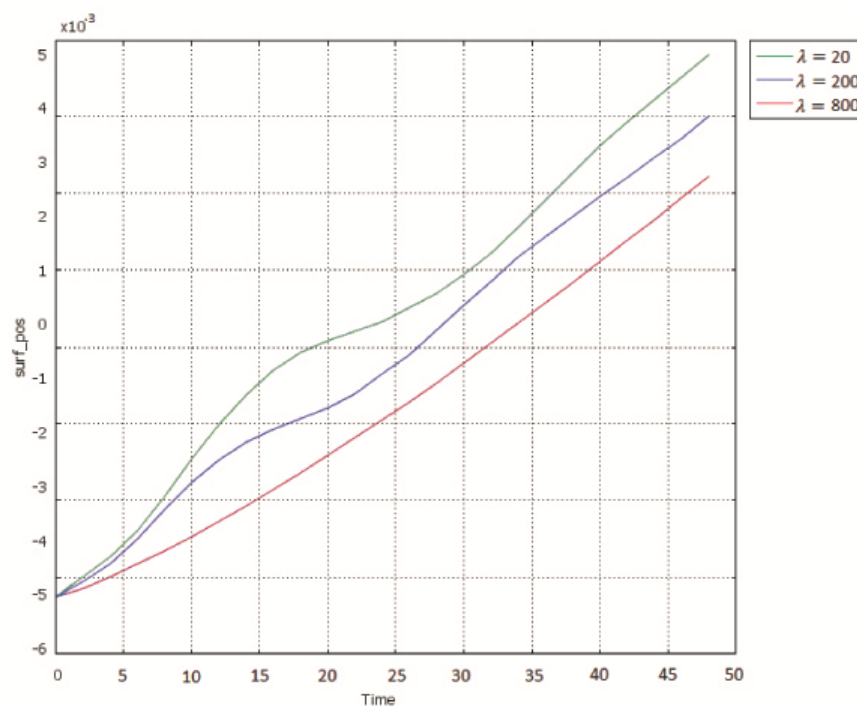


Рисунок 11. График изменения позиции свободной границы с течением времени для различных значений λ

Figure 11. The graph of changing the position of the free boundary with the passage of time for different values of λ

Разработанный алгоритм был протестирован для геометрии порового пространства в виде несвязных элементов упругого скелета (рис. 12 и рис. 13).

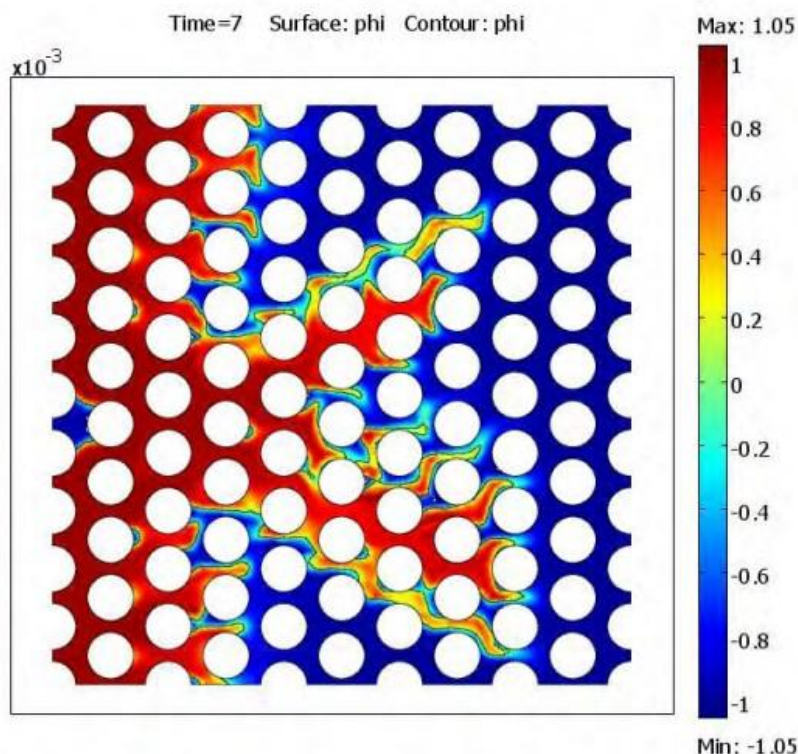


Рис.12. Вытеснение нефти водой в упругом пористом скелете в виде несвязных элементов
Fig. 12. The displacement of oil by water in an elastic porous skeleton in the form of disconnected elements

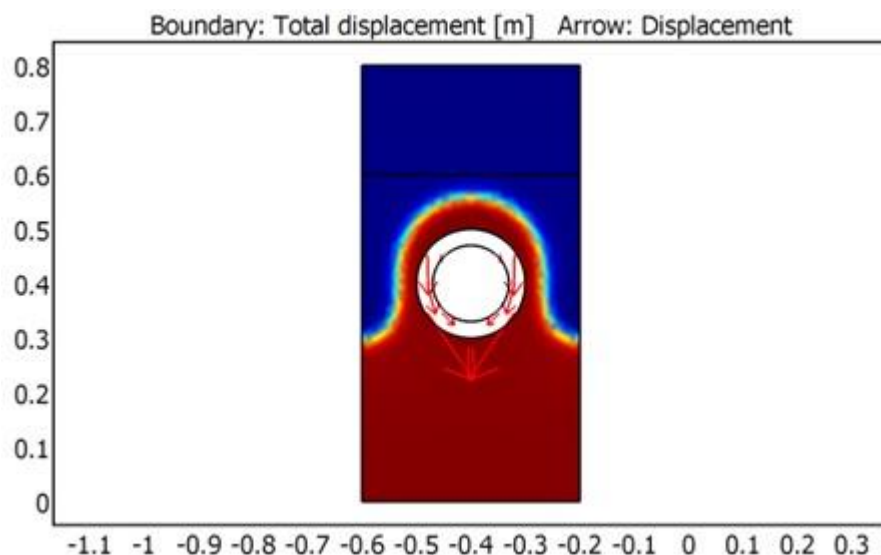


Рис. 13. Обтекание водой упругого элемента пористой среды
Fig. 13. Water flow around an elastic element of a porous medium

Заклучение

В настоящей работе разработаны новые алгоритмы моделирования процесса вытеснения одной жидкости другой с учетом взаимодействия с упругим телом. Используя полученные алгоритмы, разработано научно-исследовательское программное обеспечение, позволяющее решать совместно уравнения Стокса для жидкостей и Ламе для упругого скелета в поровом пространстве различной геометрией: капилляры и несвязные элементы упругого скелета. При

этом сами уравнения могут быть как стационарными, так и нестационарными, и описывать как сжимаемую, так и несжимаемую жидкость.

Список литературы References

1. Batchelor G. K. 1967. An Introduction to Fluid Dynamics, Cambridge University Press.
2. Meirmanov A. 2014. Mathematical models for poroelastic flows, Atlantis Press, Paris.
3. Dahong Chen. 1997. "Numerische Simulation von Strömungsvorgängen mit der "Arbitrary Lagrangian-Eulerian method" (ALE-Methode)" Aachen: Mainz, XVII, 139 S. ISBN 3-89653-610-9.
4. Hirt, C.W., Amsden, A.A., and Cook, J.L. 1974. An Arbitrary Lagrangian-Eulerian Computing Method for all Flow Speeds, J. Comp. Phys., 14: 227.
5. Gong, K., Shao, S., Liu, H. et al. 2016. (2 more authors) . Two-phase SPH Simulation of Fluid-Structure Interactions. Journal of Fluids and Structures, 65: 155-179.
6. Галлагер Р. 1984. Метод конечных элементов. Основы: Пер. с англ. — М.: Мир.
Gallager R. 1984. Metod konechnykh elementov. Osnovy: Per. s angl. — М.: Mir.
7. Деклу Ж. 1976. Метод конечных элементов: Пер. с франц. М.: Мир, 1976.
Deklu Zh. 1976. Metod konechnykh elementov: Per. s frants. М.: Mir.
8. Зенкевич О. 1975. Метод конечных элементов в технике. М.: Мир.
Zenkevich O. 1975. Metod konechnykh elementov v tekhnike. М.: Mir.
9. Зенкевич О. 1986. Морган К. Конечные элементы и аппроксимация: Пер. с англ. М.: Мир.
Zenkevich O., Morgan K. 1986. Konechnye elementy i approksimatsiya: Per. s angl. — М.: Mir.
10. Серерлинд Л. 1979. Применение метода конечных элементов — М.: Мир: 392.
Segerlind L. 1979. Primenenie metoda konechnykh elementov. М.: Mir: 392.



УДК 539.3:534.1

ФЛАТТЕР ПЛАСТИНЫ ПЕРЕМЕННОЙ ТОЛЩИНЫ, СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ЧАСТЬ ПОВЕРХНОСТИ ТОНКОГО КЛИНА

FLUTTER OF RECTANGULAR PLATE WITH VARIABLE THINNESS, AS A PART OF THIN WEDGE SURFACE

Б.Ю. Кудрявцев
B.U. Kudryavtsev

Московский политехнический университет, Россия, Москва, 107023, ул. Б. Семеновская, 38

Moscow Polytechnic University, 38 B.Semenovskaya st., Moscow, 107023, Russia

E-mail: abit7@yandex.ru

Аннотация

В линейной постановке исследована задача об устойчивости в сверхзвуковом потоке газа пластины переменной толщины, составляющей часть поверхности тонкого клина. Пластина имеет шарнирное опирание по краям, вектор скорости потока направлен по оси клина. С применением метода Бубнова-Галеркина найдена критическая скорость при различных значениях параметров (соотношениях длин сторон пластины, способах распределения толщины и т.д.). Проведено сравнение результатов, полученных с использованием основного и некоторых упрощенных уравнений колебаний пластины.

Abstract

The article reveals stability of a plate with variable thickness, placed in the supersonic gas flow, and analyzed with application of linear case definition. The plate is a part of the thin wedge surface with hinged edges. Gas flow velocity vector directs along the wedge. Critical velocity of the flow at different parameters of the plate (different aspect ratio of the plate, different methods of plate thickness distributions etc.) was obtained with application of Bubnov-Galerkin method. There was undertaken a comparison of the results, obtained by the use of the main and some simplified equations of plate oscillations.

Ключевые слова: флаттер, сверхзвуковой поток газа, пластина переменной толщины, устойчивость.

Keywords: flutter, supersonic gas flow, plate of variable thickness, stability.

Введение

Достаточно большое число статей по панельному флаттеру объясняется разнообразием краевых условий и механических свойств пластин, вариантами постановки задачи и т. д. [1-4]. Однако работ, где исследовалась бы пластина переменной толщины относительно немного, и применяется там, в основном, линейная поршневая теория [5-7]. В данной статье содержится решение задачи линейного флаттера пластины, составляющей часть поверхности клина. При этом она имеет конечные размеры и переменную толщину.

Основные результаты

Пусть имеется пластина, которая находится на поверхности тонкого клина и в плоскости ОХУ занимает область $G = \{(x, y), x_0 \leq x \leq x_0 + s, 0 \leq y \leq 1\}$. Кромки пластины шарнирно оперты. Вектор скорости потока направлен по оси клина. Следуя [1,6], запишем линейное уравнение колебаний в виде

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} (h_1^3 (\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \nu \frac{\partial^2 w}{\partial y^2})) + 2(1-\nu) \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} (h_1^3 \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y}) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} (h_1^3 (\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \nu \frac{\partial^2 w}{\partial x^2})) + A_2 x (M^2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + 2 \frac{M}{c_0} \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial t} + \frac{1}{c_0} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}) + A_1 M^2 \frac{\partial w}{\partial x} + A_0 M \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \cdot h_1 = 0$$

с соответствующими граничными условиями



$$w|_{x=x_0} = \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \Big|_{x=x_0} = w|_{x=x_0+s} = \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \Big|_{x=x_0+s} = 0,$$

$$w|_{y=0} = \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \Big|_{y=0} = w|_{y=1} = \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \Big|_{y=1} = 0.$$

Здесь

$$A_0 = \frac{8k\sqrt{3(1-v^2)}pl^2}{(k+1)c_0h_0^2\sqrt{E\rho}}tg\beta(1+2\eta-\eta a^*(tg\beta)),$$

$$A_1 = \frac{48k(1-v^2)pl^3}{Eh_0^3(k+1)}tg\beta(1+2\eta-\eta a^*(tg\beta)),$$

$$A_2 = \frac{12k(1-v^2)pl^3}{Eh_0^3}tg(\beta)(1-\eta\frac{12a^*(tg\beta)}{k(1+k)}),$$

$$a^* = 1 + 2/((k-1)M^2tg^2\beta), \quad \eta = \frac{k-1}{k+1},$$

w – прогибы пластины, $h = h_0 \cdot h_1(x, y)$ и l – ее толщина и ширина, ρ – плотность материала, E – модуль Юнга, ν – коэффициент Пуассона, K – показатель политропы, M – число Маха, p и c_0 – давление и скорость звука в невозмущенном потоке, α – угол полураствора клина, наклон ударной волны β определяется из уравнения

$$tg\beta = tg\alpha + \eta a(tg\beta)tg\beta.$$

Решения уравнения колебаний представим в виде

$$w = \exp(i\omega t) \sin \pi y (c_1 \sin \frac{\pi(x-x_0)}{s} + c_2 \sin \frac{2\pi(x-x_0)}{s}), c_1, c_2 \in R, \omega \in C.$$

Используя метод Бубнова-Галеркина, получим систему двух уравнений с двумя неизвестными. Приравняв ее определитель к нулю, найдем критическую скорость потока $M_{кр}$ как наименьшее значение M , при котором комплексная частота ω переходит в правую полуплоскость.

В качестве примера рассмотрим металлическую пластину, находящуюся в потоке воздуха, при следующих значениях параметров:

$$h_0 = 0,001 \text{ м}, p = 10^5 \text{ Па}, \kappa = 1,4, c_0 = 330 \text{ м/с}, \alpha = 10^\circ.$$

Возьмем $h_1(x, y) = 1 + \varepsilon f(y)$, а функцию f зададим в виде: $f(y) = \cos(2\pi y)$. При таком выборе площадь сечения пластины плоскостью $x = \text{const}$ останется постоянной при любом ε .

В таблице 1 представлены значения критической скорости для алюминиевой пластины ($E = 6,7 \cdot 10^{10} \text{ Па}$, $\rho = 2,7 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $\nu = 0,36$, $x_0 = 1$) при различных соотношениях длин сторон и вариантах распределения толщины. В таблицах 2 и 3 содержатся аналогичные результаты для стальной пластины ($E = 2 \cdot 10^{11} \text{ Па}$, $\rho = 8 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $\nu = 0,3$) для $x_0 = 1$ и $x_0 = 0$ соответственно.

Таблица 1
Table 1

Значения критической скорости для алюминиевой пластины
The values of the critical velocity for aluminum plate

	$l=0,375, s=2/3$	$l=0,25, s=1$	$l=0,25, s=1,5$
$\varepsilon=0,4$	8,47	8,53	7,85
$\varepsilon=0$	8,43	8,46	7,74
$\varepsilon=-0,4$	8,48	8,50	7,70

Таблица 2
Table 2

Значения критической скорости для стальной пластины
The critical speed for the steel plate

	$l=0,375,s=2/3$	$l=0,25,s=1$	$l=0,25,s=1,5$	$l=0,25,s=2$
$\varepsilon = 0,4$	8,44	8,62	7,61	7,02
$\varepsilon = 0$	8,50	8,69	7,54	6,90
$\varepsilon = -0,4$	8,78	8,83	7,65	6,93

Таблица 3
Table 3

Значения критической скорости для стальной пластины
The critical speed for the steel plate

	$l=0,375,s=2/3$	$l=0,25,s=1$	$l=0,25,s=1,5$
$\varepsilon = 0,4$	3,95	4,37	3,64
$\varepsilon = 0$	4,14	4,33	3,58
$\varepsilon = -0,4$	4,75	4,85	3,84

Из таблиц видно, что поведение критической скорости для пластины конечных размеров оказалось неоднозначным и существенно зависящим от многих параметров задачи. Для стальной удлиненной поперек потока пластины утолщение к середине повышает значения критической скорости, а концентрация материала ближе к кромкам наоборот способствует снижению динамической устойчивости. В случае квадратной или вытянутой вдоль направления потока пластины минимальная стабилизация достигается при постоянной толщине. Для алюминиевой пластины характер зависимости критической скорости от удлинения меняется на противоположный. Этот эффект, вероятно, связан со значением коэффициента Пуассона ν , и принципиальным образом зависит от того, $\nu < 1/3$ или нет. Подобное влияние этого параметра уже было отмечено в [6].

Представляет интерес оценка влияния двух последних слагаемых в скобке при коэффициенте A_2 в уравнении колебаний. Отбросив их, найдем значения $M_{кр}$ в условиях таблицы 2 и составим таблицу 4.

Таблица 4
Table 4

Значения критической скорости для стальной пластины
The critical speed for the steel plate

	$l=0,375,s=2/3$	$l=0,25,s=1$	$l=0,25,s=1,5$	$l=0,25,s=2$
$\varepsilon = 0,4$	9.98	10.01	9.56	9.21
$\varepsilon = 0$	10.00	10.01	9.56	9.19
$\varepsilon = -0,4$	10.04	10.05	9.57	9.20

Основные зависимости остались теми же, хотя и менее выраженными. Но величина критической скорости оказалась заметно завышенной, разница достигала порядка 20 процентов ([8]).

Рассмотрим случай, когда ε достаточно мало. Тогда с точностью до бесконечно малых высшего порядка уравнение колебаний можно представить в упрощенном виде (дополнительные слагаемые тоже отсутствуют):

$$(1 + 3\varepsilon \cdot f(y)) \left(\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 w}{\partial y^4} \right) + 6\varepsilon \cdot f'(y) \left(\frac{\partial^3 w}{\partial y^3} + \frac{\partial^3 w}{\partial x^2 \partial y} \right) + 3\varepsilon \cdot f''(y) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \nu \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) + A_2 M^2 x \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + A_1 M^2 \frac{\partial w}{\partial x} + A_0 M \frac{\partial w}{\partial t} + (1 + \varepsilon \cdot f(y)) \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0.$$

Будем находить критическую скорость, проводя вышеописанную процедуру. В таблице 5 приведены результаты вычислений при тех же параметрах, что и в таблице 2.

При сравнении полученных таблиц (а также [8]), можно заметить, что линеаризация уравнения колебаний по ε оказывает ощутимое разнонаправленное влияние на результаты.



Таблица 5
Table 5

Значения критической скорости для стальной пластины
The critical speed for the steel plate

	$l=0,25,s=1$	$l=0,25,s=1,5$
$\varepsilon = 0.4$	8.30	7.66
$\varepsilon = 0$	8.38	7.68
$\varepsilon = -0.4$	8.45	7.70

Список литературы
References

1. Алгазин С.Д., Кийко И.А. 2006. Флаттер пластин и оболочек.- М.: Наука, 2006. 248 с.
Algazin S.D., Kijko I.A. Flatter plastin i obolochek. Moscow: Nauka.
2. Лавит И.М. 2015. Краткий обзор работ И.А. Кийко по исследованию сверхзвукового панельного флаттера. Известия ТулГУ. Естественные науки. № 4: 153-157.
Lavit I.M. 2015. Kratkij obzor rabot I.A. Kijko po issledovaniju sverkhzvukovogo panel'nogo flattera. Izvestija TulGU. Estestvennye nauki. № 4: 153-157.
3. Кийко И.А., Кудрявцев Б.Ю. 2011. Флаттер прямоугольной панели, составляющей часть поверхности тонкого клина. Вестн. МГУ. Сер. 1: Мат. Мех. 2011. № 2: 59-62.
Kijko I.A., Kudryavtsev B.U. 2011. Flatter prjamougol'noj paneli, sostavljajushhej chast' poverhnosti tonkogo klina. Vestnik MGU. Ser. 1: Mat. Mech. № 2, 59-62.
4. Кудрявцев Б.Ю. 2004. Нелинейные аэроупругие колебания пластины. Проблемы машиностроения и надежности машин. № 4: 16-19.
Kudryavtsev B.U. 2004. Nelinejnye ajerouprugie kolebanija plastiny. Problemy mashinostroenija i nadezhnosti mashin. № 4: 16-19.
5. Кадыров А.К., Кийко И.А. 2005. Флаттер упругой полосы переменной толщины. Изв. ТулГУ. Сер. Мат. Мех. Инф. Т.11. Вып.2.мех.,Тула: изд. ТулГУ: 46-52.
Kadyrov A.K., Kijko I.A. 2005. Flatter uprugoj polosy peremennoj tolshhiny. Izvestija TulGU. Ser. Mat. Mech. Inf. V.11. Iss.2. mech.: 46-52.
6. Кийко И.А., Кудрявцев Б.Ю. 1997. Флаттер упругой полосы переменной жесткости. Депонир. в ВИНИТИ: 1103-B97.
Kijko I.A., Kudryavtsev B.U. 1997. Flatter uprugoj polosy peremennoj zhestkosti. Deponir. v VINITI. 1997. № 1103, V97.
7. Кудрявцев Б.Ю. 2014. Задача оптимизации распределения толщины пластины в исследовании проблемы панельного флаттера. Известия МГТУ МАМИ. Т. 4. № 1(19): 77-82.
Kudryavtsev B.U. 2014. Zadacha optimizacii raspredelenija tolshhiny plastiny v issledovanii problemy panel'nogo flattera. Izvestija MGTU MAMI. V. 4. № 1(19): 77-82.
8. Кудрявцев Б.Ю. 2011. Задача о флаттере пластины переменной толщины в уточненной и дополненной постановке. Известия МГТУ МАМИ. № 1: 231-234.
Kudryavtsev B.U. 2011. Zadacha o flattere plastiny peremennoj tolshhiny v utochnennoj i dopolnennoj postanovke. Izvestija MGTU MAMI. № 1: 231-234.



УДК 537.9 538.911

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМОВ ТИТАНА И ХРОМА С ТОЧЕЧНЫМИ
ДЕФЕКТАМИ В ОЦК ВАНАДИИ****TI, CR INTERACTION WITH BCC VANADIUM POINT DEFECTS**

**А.О. Боев, Д.А. Аксенов, В.Н. Максименко, И.В. Неласов, А.И. Картамышев,
А.Г. Липницкий**
**A.O. Boev, D.A. Aksyonov, V.N. Maksimenko, I.V. Nelasov, A.I. Kartamyshev,
A.G. Lipnitskii**

Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

Belgorod National Research University, 85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia

E-mail: boev.anton.olegovich@gmail.com

Аннотация

В данной работе мы детально исследуем взаимодействие атомов титана с собственными точечными дефектами ОЦК ванадия с помощью теории функционала электронной плотности. Так мы восполняем имеющийся пробел по энергиям взаимодействия титана с межузельными атомами ванадия. Также мы рассчитываем энергии связи титана с вакансией и получаем, что имеющиеся в литературе данные должны быть существенно скорректированы в верхнюю сторону. Для обоснования полученных значений мы проводим анализ электронной структуры. Для наглядности мы повторяем все расчеты для хрома и устанавливаем различия с титаном. Не ограничиваясь простыми случаями, мы добавляем в наше рассмотрение трех частичные комплексы и показываем, что в случае титана, они должны играть существенную роль. Наконец, для наглядного сравнения с экспериментом, мы используем математические модели для прогнозирования распухания с использованием рассчитанных энергий связи, на основании чего показываем, что известный механизм подавления распухания, ранее не рассматривавшийся применительно к сплавам ванадий-титан, может играть важную роль в подавлении распухания.

Abstract

In this paper, we examine in detail the interaction of titanium atoms with their own point defects bcc vanadium using density functional theory. So we fill a gap in energy cooperation with interstitial titanium vanadium atoms. We also look forward to the energy of titanium due to vacancy and obtain that data available in the literature should be substantially adjusted to the upside. To justify the obtained values we conduct a detailed analysis of electronic structure. For clarity, we repeat all the calculations for chromium and establish differences with titanium. Not limited to simple cases, we add to our consideration of three partial complexes and show that in the case of titanium, they should play a significant role. Finally, for visual comparison with experiment, we use mathematical models to predict the swelling by using the calculated binding energies, on the basis of which show that the known mechanism of suppression of swelling, not previously considered in relation to the vanadium-titanium alloys, can play an important role in suppressing the swelling.

Ключевые слова: ванадий-титан-хром, точечные дефекты, «первые принципы», радиационное распухание, комплексы титан-вакансия.

Keywords: vanadium-titanium-chromium, point defects, ab initio, radiation swelling, titanium-vacancy complexes.

Введение

Начиная с 1970-х годов в России, США и Японии ведутся разработки радиационно-стойких сплавов на основе ванадия для применения в термоядерной энергетике. Выбор ванадия в качестве основы для таких сплавов обусловлен в первую очередь наименьшими значениями остаточной радиоактивности изотопов ванадия среди всех металлов. К 2000-ым годам большинство исследователей пришли к выводу, что наиболее оптимальным составом обладает сплав V-4Ti-4Cr.[1,2], и что он может быть использован для построения первой защитной стенки термоядерного реактора. Не уступая ферритным и аустенитным сплавам по остаточной радиоактивности, механическим свойствам и коррозионной стойкости, этот сплав имеет меньший коэффициент термического расширения. Это обеспечивает снижение термических напряжений, возникающих в первой стенке под действием большого градиента температур, и продлевает срок её службы[3].

Ключевой характеристикой сплавов для термоядерной энергетике является устойчивость к нейтронному облучению, одним из аспектов которой является стойкость к радиационному



распуханию при повышенных температурах, т.е. процессу объединения точечных дефектов в комплексы и поры, которые приводят к разрушению материала. Достоверно установлено, что в случае ванадия, существенное снижение радиационного распухания достигается легированием титаном при его концентрации 4-5%. Добавление хрома, в некоторой степени, отрицательно сказывается на радиационном распухании, однако оно нужно для обеспечения необходимой высокотемпературной прочности и низкой ползучести [4].

Несмотря на большое число работ по сплаву V-4Ti-4Cr[5-7] механизм влияния титана и хрома на радиационное распухание до сих пор является плохо изученным. Авторы работы[8] выдвинули гипотезу, что атомы замещения большего размера, по сравнению с атомами матрицы, захватывают избыточные вакансии, и увеличение концентрации вакансий приводит к увеличению доли рекомбинации. А увеличение рекомбинации точечных дефектов и медленная миграция вакансий являются причиной подавления зарождения пор. Таким образом, в результате добавления титана существенно снижается количество образующихся пор, которые приводят к радиационному распуханию и разрушению материала.

В этой статье мы, используя расчеты “из первых принципов”, исследовали взаимодействие двух вакансий в чистом ванадии в зависимости от расстояния между ними и определили энергию связи дивакансии. Также мы провели расчеты энергий образования и объемов образования точечных дефектов, изучили взаимодействие вакансий и межузельного атома в ванадии с атомами примеси титана и хрома.

Детали расчетов

Расчеты проводились с помощью теории функционала электронной плотности[9] в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA)[10] для обменно-корреляционного потенциала с функционалом вида PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof)[10], с использованием программного пакета VASP[18].

Энергия обрезания базиса плоских волн составила 350 эВ. Сетка k-точек в обратном пространстве задавалась по Гамма-центрированной схеме с расстоянием между k-точками $0.15 \text{ \AA}^{-1}$. Для размывания энергии на уровне Ферми использован метод Methfessel-Paxton[12] с шириной размывания 0.20 эВ.

Для расчета энергий образования вакансий и межузельных атомов использованы PAW (присоединенные плоские волны) потенциалы[13] ванадия с 5 ($4s^2 3d^3$) и 13 ($3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$) валентными электронами, соответственно. Для титана был использован потенциал с 12 электронами ($3p^6 4s^2 3d^4$), а для хрома с 14 электронами ($3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$).

Для расчетов энергий образования точечных дефектов и комплексов применен метод сверхячеек с периодическими граничными условиями (ПГУ)[14]. Для всех случаев релаксация положений атомов проводилась до сил менее $25 \text{ мЭВ/\AA}$.

Для ячейки, состоящей из N атомов, энергия образования моновакансии была рассчитана по формуле:

$$E_f^{Vac} = E^{Vac}(V_{N-1}) - [(N-1)/N]E(V_N), \quad (1)$$

энергия образования межузельного атома:

$$E_f^{SIA} = E^{SIA}(V_{N+1}) - [(N+1)/N]E(V_N), \quad (2)$$

Энергия растворения Ti/Cr:

$$E_s^X = E^X(V_{N-1} + X) - \left[\frac{(N-1)}{N} \right] E(V_N) - E(X), \quad (3)$$

где $E(V_N)$ - энергия идеальной ячейки, состоящей из N атомов, $E^{Vac}(V_{N-1})$ - энергия ячейки, состоящей из (N-1) атомов ванадия и содержащей одну вакансию, $E^{SIA}(V_{N+1})$ - энергия ячейки, состоящей из (N+1) атомов ванадия и содержащей один межузельный атом, $E^X(V_{N-1} + X)$ - энергия ячейки, состоящей из (N-1) атомов ванадия и содержащей один атом примеси замещения, $E(X)$ - энергия одного атома примеси (X-Ti в ГПУ решетке, Cr в ОЦК решетке).

Энергия связи между A и B (A и B могут быть атомами замещения, межузельными атомами или вакансиями) определяется как:

$$E_b^{(A,B)} = E^A(V_{N-1} + A) + E^B(V_{N-1} + B) - E^{A+B}(V_{N-2} + A + B) - E(V_N), \quad (4)$$



где $E(V_N)$ - энергия идеальной ячейки, состоящей из N атомов ванадия, $E^{Vac}(V_{N-1})$ - энергия ячейки, состоящей из $(N - 1)$ атомов ванадия и содержащей одну вакансию, и $E^A(V_{N-1} + A)$ или $E^B(V_{N-1} + B)$ - энергии ячеек, состоящих из $(N-1)$ атомов ванадия и содержащих дефекты A и B соответственно; $E^{A+B}(V_{N-2} + A + B)$ -- энергия ячейки, состоящей из $(N-2)$ атомов ванадия и содержащей два дефекта A и B . Положительная энергия связи означает притяжение двух дефектов, а отрицательная - отталкивание.

Расчет объема образования вакансии проводился по формуле:

$$\Omega_f^{Vac} = \Omega^{Vac}(V_{N-1}) - [(N - 1)/N]\Omega(V_N), \quad (5)$$

где $\Omega(V_N)$ - объем идеальной ячейки, состоящей из N атомов ванадия, $\Omega^{Vac}(V_{N-1})$ - объем ячейки, состоящей из $(N-1)$ атомов ванадия и содержащей вакансию.

Расчет объема растворения атомов замещения и объема образования межузельного атома в решетке ванадия:

$$\Omega_s^X = \Omega^X(V_{N-1} + X) - \Omega(V_N), \quad (6)$$

$$\Omega_f^{SIA} = \Omega^{SIA}(V_{N+1}) - \left[\frac{(N+1)}{N} \right] \Omega(V_N). \quad (7)$$

где $\Omega(V_N)$ - объем идеальной ячейки, состоящей из N атомов ванадия, $\Omega^X(V_{N-1} + X)$ - объем ячейки, состоящей из $(N-1)$ атомов ванадия и одного дефекта X (X = вакансия, Ti, Cr).

Точечные дефекты в ванадии

Рассчитанные нами параметры решётки для чистого ОЦК ванадия и ОЦК хрома составляют 2.98 Å и 2.85 Å, что находится в хорошем согласии с экспериментальными значениями 3.03 Å[15] при 300 К и 2.88 Å[16] при 300 К (при 20 К отличие в 3 знака не сильное), соответственно. Для чистого титана мы получили a и c 2.94 Å и 4.65 Å, что также хорошо согласуется с экспериментом 2.95 Å и 4.69 Å[17] при 300 К.

Прежде чем перейти к изучению комплексов дефектов, мы рассмотрели вакансию, межузельный атом и примеси замещения Ti и Cr в сверхячейках ОЦК ванадия, детально исследуя сходимость энергий образования в зависимости от размера сверхячеек, содержащих 54, 128, 250 и 432 атома (см. таблицу).

Мы получили, что энергия образования вакансии (E_f) слабо зависит от размера ячейки; адекватное значение даёт даже самая маленькая сверхячейка (разброс 140 мэВ). При этом в согласии с другими теоретическими данными, рассчитанные E_f выше экспериментального значения 2.1-2.2 эВ[18] на 0.4-0.5 эВ.

В отличие от единственной конфигурации для вакансии, в случае межузельного атома известны три основных конфигурации - гантели, отличающиеся направлениями, вдоль которых они расположены. Мы получили, что в случае межузельных атомов ячейка $3 \times 3 \times 3$ достаточно сильно завывает E_f^{SIA} (на ~0.3 эВ), однако уже для ячейки $4 \times 4 \times 4$ обеспечивается сходимость на уровне 70 мэВ. В согласии с экспериментом и ТФП расчетами других авторов[19] наиболее выгодной является гантель $\langle 111 \rangle$.

Наконец, мы также определили объемы образования рассмотренных дефектов, величины которых важны для понимания механизмов набухания (см. таблицу). Как и ожидается, межузельный атом оказывает наибольшее влияние, увеличивая объём системы на 18 Å³. Вакансия приводит к меньшему в два раза эффекту (7 Å³). Растворение атома титана увеличивает объём на 3.5 Å³, в то время как растворение хрома его уменьшает на 4.5 Å³.

Дивакансия в ванадии

В связи с возможным влиянием комплексов титана с дивакансиями на радиационное набухание мы установили наиболее выгодную конфигурацию дивакансии в ОЦК ванадии и соответствующую энергию связи. На рис. 1 показаны рассчитанные энергии взаимодействия двух вакансий в сверхячейке ОЦК ванадия $5 \times 5 \times 5$. Видно, что при увеличении расстояния между вакансиями взаимодействие уменьшается вплоть до нулевых значений на расстоянии 8 Å.

Наиболее выгодной является конфигурация, при которой вторая вакансия находится на второй координационной сфере по отношению к первой (в ОЦК железе на первой сфере 0.16 эВ, а на второй 0.23[20]).

Образование дивакансии можно рассматривать в качестве первого шага к образованию поры[20]. Так, сравнение чистого ОЦК ванадия и железа показывает, что для железа энергия связи дивакансии в два раза меньше (0.23[20] против 0.45 эВ) При этом оказывается, что и



распухание чистого ванадия также выше, чем железа для одинаковых условий (430⁰С, 20 дпа): 2 %[21] и 0.8 %[22], соответственно.

Таблица
Table

Рассчитанные энергии образования (эВ) и объемы (Å³) для вакансии и трех конфигураций межузельных атомов; энергии растворения (эВ) и объемы (Å³) для титана и хрома в ОЦК ванадии; атомный объем ОЦК ванадия (Å³)

Calculated formation energies (eV) and volumes (Å³) for vacancy and three dumbbell configurations; solution energies (eV) and volumes (Å³) for Ti and Cr in bcc V; atomic volume of bcc V (Å³)

	3×3×3	4×4×4	5×5×5
Количество атомов	54	128	250
E_f^v (ат), эВ	2.50	2.36	2.47
	-	-	2.44*
	-	-	2.51 ^[5]
Ω^v , Å ³	6.2	6.9	6.6
$E_f^{(100)}$, эВ	4.13	3.70	3.77
	-	3.57 ^[19]	-
$E_f^{(110)}$, эВ	3.81	3.52	3.58
	-	3.48 ^[19]	-
$E_f^{(111)}$, эВ	3.44	3.22	3.29
	-	3.14 ^[19]	-
$\Omega_{(100)}$, Å ³	-	-	18.0
$E_s(Ti)$, эВ	0.31	0.32	0.33
$\Omega_s(Ti)$, Å ³	3.4	3.5	3.1
$E_s(Cr)$, эВ	-0.10	-0.10	-0.09
$\Omega_s(Cr)$, Å ³	-4.5	-4.4	-5.0
$\Omega(V)$, Å ³	-	-	13.5

* - сверхячейка 6×6×6

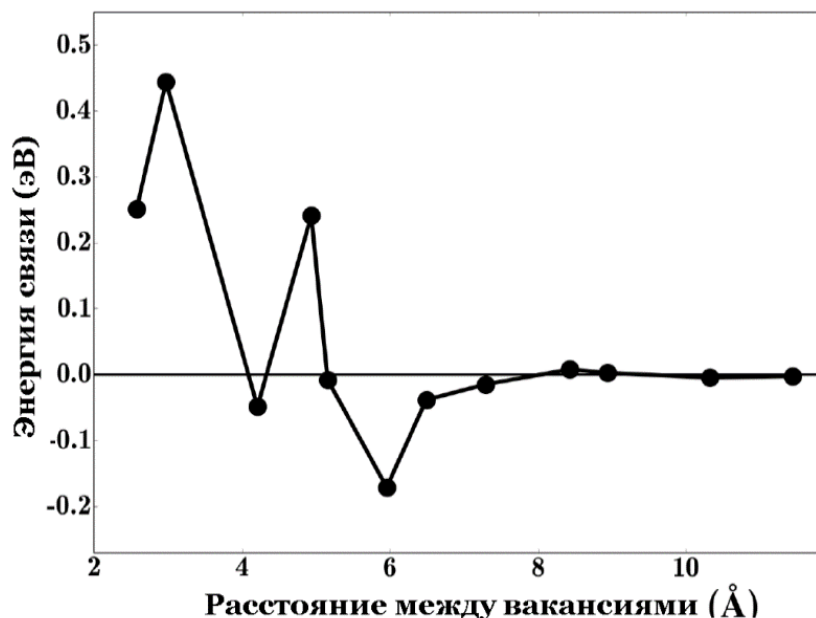
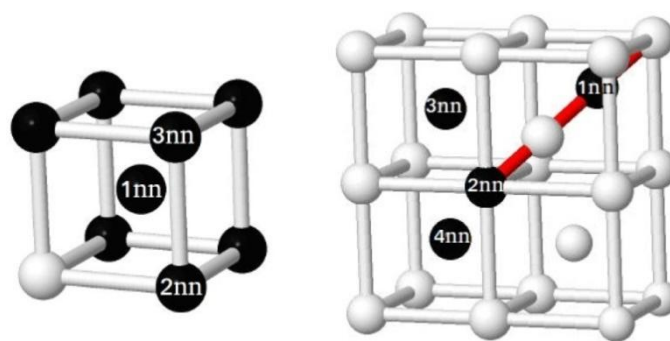


Рис. 1. Энергия связи дивакансии в зависимости от расстояния, рассчитанная по формуле 4. Ячейка 5×5×5 ОЦК ванадий

Fig. 1. The binding energy between two vacancies in dependence of distance between them. Points mean nn positions between vacancies. The energy was calculated using eq. (4) and 5×5×5 bcc V supercells

Рассмотренные конфигурации комплексов атомов титана и хрома с вакансиями и межузельными атомами для 1-4 координационных сфер представлены на рис. 2.



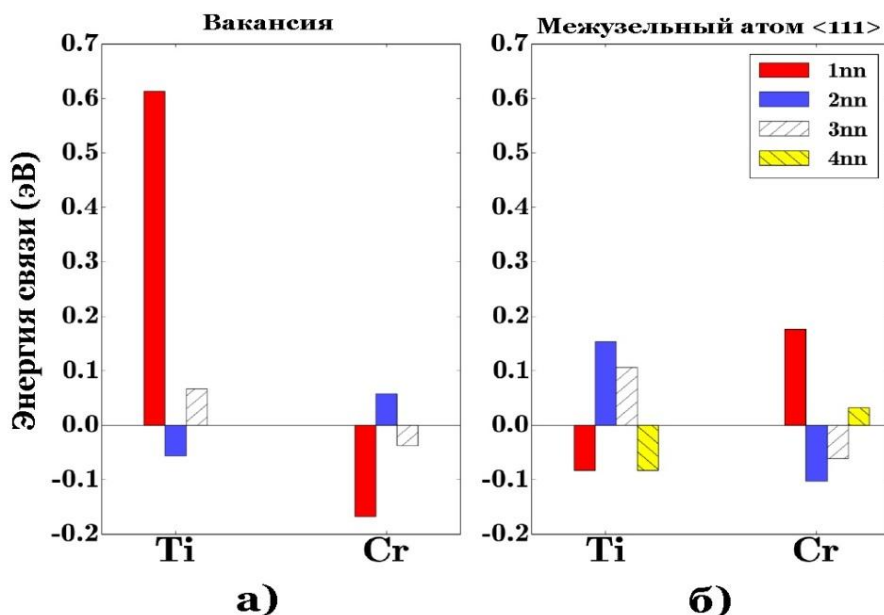
а)

б)

Рис. 2. Схематическое изображение координационных сфер: а) первая, вторая и третья координационные сферы вокруг вакансии (показана белым цветом); б) первая, вторая, третья и четвертая координационные сферы вокруг межузельного атома в гантели $\langle 111 \rangle$ (выделена красной линией)

Fig. 2. The considered nearest-neighboring (nn) atomic configurations: а) 1nn-3nn positions (black atoms) near the vacancy (white atom); б) 1nn-4nn positions near the $\langle 111 \rangle$ dumbbell highlighted with space diagonal

Так как комплексы растворенных элементов с межузельными атомами в ванадии до нас ранее не изучались, мы первым делом решили рассмотреть их. В первую очередь было интересным проверить может ли титан и хром изменить предпочтительность образования гантелей. Однако, согласно нашим результатам во всех случаях, как титан, так и хром не только не меняют предпочтительности гантели $\langle 111 \rangle$, но и способствуют перестройке гантелей $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ в $\langle 111 \rangle$. Поэтому на рис. 3 (б) мы приводим энергии взаимодействия комплексов X-межузельный атом (где X = Ti, Cr) только для гантели $\langle 111 \rangle$. Согласно нашим результатам, титан и хром испытывают притяжение к межузельному атому. В случае титана это происходит на второй сфере (0.17 эВ), а в случае хрома на первой сфере (0.19 эВ). Подобные значения энергий связи с межузельными атомами являются очень низкими и согласно имеющимся представлениям не могут оказать заметного влияния на процесс распухания ванадия[23].



а)

б)

Рис. 3. а) Энергия взаимодействия, рассчитанная по формуле 4, для титана и хрома с вакансией, в зависимости от номера координационной сферы в ячейке $5 \times 5 \times 5$. (nn - координационная сфера). б) Энергия связи титана и хрома с межузельным атомом в положении $\langle 111 \rangle$ в зависимости от номера координационной сферы, рассчитанные для ячейки $4 \times 4 \times 4$

Fig. 3. а) Binding energy of X-vacancy (X = Ti, Cr) complexes calculated with $5 \times 5 \times 5$ supercells using eq. (4). The first to third nearest neighboring positions are shown. б) Binding energy of X- $\langle 111 \rangle$ dumbbell (X = Ti, Cr) calculated with $4 \times 4 \times 4$ supercells using eq. (4). The first to fourth nearest neighboring positions are shown

Маленькие энергии связи с межузельными атомами подтолкнули нас к более детальному исследованию комплексов с вакансиями. На рис. 3 (а) показаны рассчитанные энергии взаимодействия для комплексов титан-вакансия и хром-вакансия. Первое, что обращает на себя внимание, это очень сильное притяжение титана и вакансии на первой координационной сфере. Энергия связи 0.6 эВ для этой конфигурации существенно превышает имеющиеся в литературе значения 0.3 эВ[5] и 0.4 эВ[24] для титана в ванадии, и существенно отличается в большую сторону по сравнению с типичными энергиями связи других элементов в ОЦК ванадии[24]. В случае атома хрома на первой сфере наблюдается существенное отталкивание, и лишь небольшое притяжение на второй сфере (0.05 эВ). Для обоих атомов на третьей и четвертой сферах взаимодействие с вакансией существенно спадает.

Установив выделяющиеся высокие значения энергии связи титана с моновакансией, мы решили рассмотреть возможность образования более сложного комплекса вакансии с двумя атомами титана, который изображен на рис. 4. Энергия связи такого комплекса составила 1.22 эВ, что является выдающимся значением. Также, были рассмотрены комплексы с расположением двух атомов титана на других позициях по отношению к вакансии и комплексы, содержащие 3 и 4 атома титана. Оказалось, что самой большой энергией связи обладает комплекс Ti-Vac-Ti.

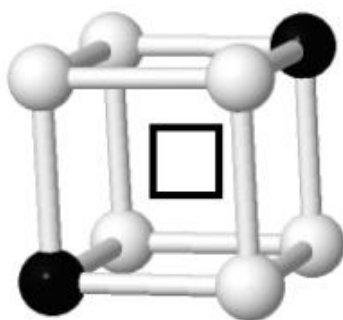


Рис. 4. Схематическое изображение комплекса Ti-Vac-Ti. Черным отмечены атомы титана, пустым квадратом – вакансия

Fig. 4. Schematic image of Ti-Vac-Ti complex. Black atoms are Ti, black rectangular is vacancy

Распухание ванадия, легированного титаном

Скорость роста пор описывается следующей формулой[25]:

$$F(\eta) = \left(\frac{2}{\eta}\right) \left\{ (1 + \eta)^{\frac{1}{2}} - 1 \right\}, \eta = \frac{4R^{eff}G}{S_I D_I S_V D_V^{eff}}, \quad (8)$$

где F - доля дефектов, попадающих в стоки в единицу времени, $R^{eff} = 4\pi r_0(D_i + D_V^{eff})$ - эффективная скорость рекомбинации дефектов, G - скорость образования дефектов, $S_{I,V}$ - сила стока для межузельного атома/вакансии, $D_{I,V}^{eff}$ - эффективный коэффициент диффузии межузельного атома/вакансии.

Уменьшение мобильности вакансий увеличивает коэффициенты рекомбинации дефектов, снижая скорость роста пор. Так, на рис. 5 приведены скорости роста в зависимости от температуры облучения для случая отсутствия комплексов, комплексов Ti-Vac с энергией связи 0.3 эВ, как получено в работе[5], комплексов Ti-Vac с энергией связи 0.6 эВ, полученных в нашей работе, и впервые обнаруженных комплексов Ti-Vac-Ti[25] с энергией связи 1.2 эВ (при расчете учитывался вклад конфигурационной энтропии). Видно, что в первом случае происходит снижение скорости роста на один порядок, во втором случае уже на два порядка, а в третьем случае на четыре порядка. Настолько существенное снижение скорости роста пор позволяет с уверенностью говорить, что обнаруженный комплекс Ti-Vac-Ti играет ключевую роль в подавлении распухания и позволяет снять давнюю проблему чрезвычайно положительного влияния титана на радиационную стойкость ванадия.

Причины образования сильной связи титана с вакансией

Начиная с работ [4,8] высказывались предположения об образовании комплексов титан-вакансия. В качестве причины для их образования используется объяснение, основанное на анализе объемов, которое очень распространено в литературе [15]. Используя металлический радиус титана, который больше, чем у ванадия на 10% авторы [4] объясняют связывание с вакансией, имеющей отрицательный объем.

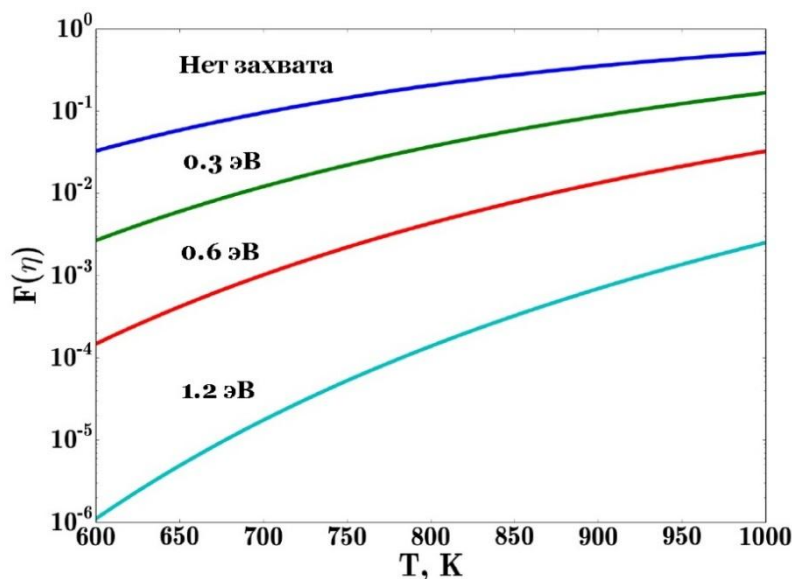


Рис. 5. Доля вакансий, уходящих в поры в зависимости от температуры, при различной энергии связи вакансии с атомом титана

Fig. 5. The fraction of point defects lost into sinks in unit time depending on temperature for different values of Ti-Vac binding energy

Действительно, согласно нашим расчётам, растворение титана в ванадии приводит к увеличению объёма на $3.5 \text{ \AA}^3$, в то время как вакансия уменьшает объём на $6.6 \text{ \AA}^3$ (см. таблицу). Что интересно, образование комплекса Ti-Vac-Ti фактически в два раза выгоднее и имеет нулевой объём, в то время как присоединение третьего атома титана не является выгодным. Хотя анализ объёмов и позволяет качественно предсказать возможность образования связи, он не всегда точен.

Чтобы установить причину выигрыша в химической энергии, мы рассчитали плотность электронных состояний для сверхячейки, содержащей одну вакансию, и сверхячейки (A) с комплексом вакансия-титан (B). Чтобы получить вторую ячейку, в первой ячейке достаточно заменить один атом ванадия (V_1^A), находящийся рядом с вакансией, на атом титана (Ti^B). Далее мы выбираем 6 соответствующих друг другу атомов ванадия вокруг атомов V_1^A и Ti^B , V_{2-8}^A и V_{2-8}^B , и суммируем по ним электронную плотность. Наконец, так как мы знаем, что атом хрома отталкивается от вакансии на первой сфере, для возможности сравнения мы рассчитываем аналогичным образом электронную плотность для ячейки с комплексом вакансия-хром (C) на атомах V_{2-8}^C . На рис. 6 (а) приведены парциальные электронные плотности d орбиталей для атомов V_{2-8}^A и V_{2-8}^B , а на рис. 6 (б) для атомов V_{2-8}^A и V_{2-8}^C . Видно, что для комплекса Vac-Ti на окружающих атомах ванадия происходит существенное снижение d-ППЭС на уровне Ферми. Подобное снижение говорит о стабилизации структуры и, как правило, сопровождается снижением полной энергией. Также, из графика видно, что происходит переброс электронной плотности на более низкие энергии, что сопровождается уменьшением полной энергией. В случае же комплекса Vac-Cr (Рис. 6(б)) описанные эффекты отсутствуют.

Заключение

На основе ТФП расчетов энергий связи комплексов точечных дефектов мы проанализировали возможные механизмы влияния титана на радиационное распухание ванадия. Установлено, что ключевую роль играет образование комплексов титан-вакансия.

Мы получили, что комплекс вакансия-титан обладает выдающейся энергией связи 0.6 эВ . Более того, обнаружен ранее не известный тройной комплекс титан-вакансия-титан в направлении $\langle 111 \rangle$ с энергией связи 1.2 эВ , который согласно нашим оценкам, должен вносить ещё более существенный вклад в увеличение коэффициента рекомбинации дефектов и снижения распухания ванадия, чем парный комплекс вакансия-титан. В дополнение к этому, мы установили, что образование комплекса титан-дивакансия также является крайней выгодным. Анализ плотности электронных состояний позволил объяснить причины образования комплексов с точки зрения оптимизации электронной структуры.

В отличие от вакансий взаимодействие титана и хрома с межузельными атомами не существенно и не может сильно влиять на процессы распухания.

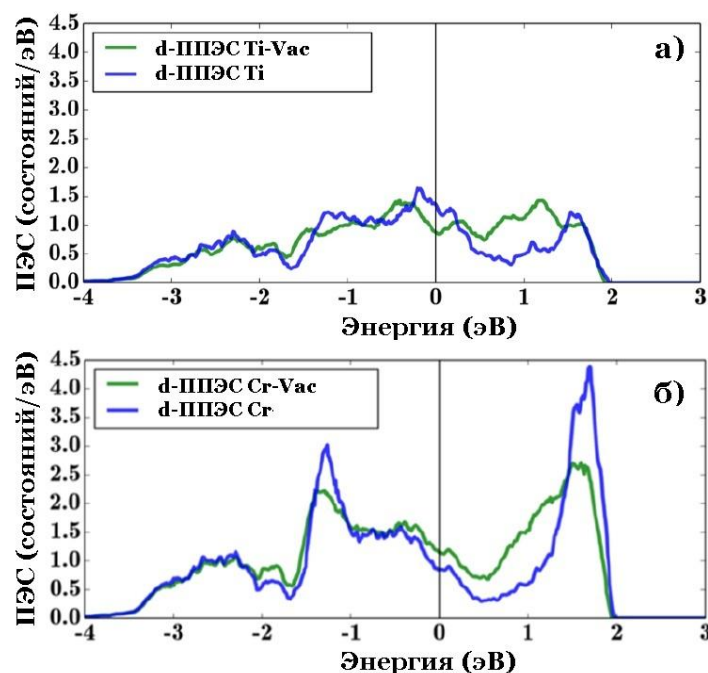


Рис. 6. Парциальная плотность состояний примесей и окружающих атомов ванадия вблизи вакансии. Уровень Ферми лежит при нулевой энергии

Fig. 6. The partial density of d-orbitals on Ti solute atom near the vacancy and Ti atom in vanadium volume (a) and on Cr solute atom near the vacancy and Cr atom in vanadium volume (b). The Fermi level lies at zero energy

Список литературы References

1. Smith D. L. et al. 1996. Reference vanadium alloy V-4Cr-4Ti for fusion application. Journal of nuclear materials. T. 233: 356-363.
2. Zinkle S. J., Ghoniem N. M. 2000. Operating temperature windows for fusion reactor structural materials. Fusion Engineering and design. T. 51: 55-71.
3. Ivanov L. I., Platov Y. M. 2004. Radiation physics of metals and its applications. Cambridge Int Science Publishing.
4. Loomis B. A., Smith D. L., Garner F. A. 1991. Swelling of neutron-irradiated vanadium alloys. Journal of nuclear materials. T. 179: 771-774.
5. Zhang C. et al. 2013. Stability and migration of vacancy in V-4Cr-4Ti alloy: Effects of Al, Si, Y trace elements. Journal of Nuclear Materials. T. 442. №. 1: 370-376.
6. Matsui H., Nakajima H., Yoshida S. 1993. Microstructural evolution in vanadium alloys by fast neutron irradiation. Journal of nuclear materials. T. 205: 452-459.
7. Gelles D. S., Stubbins J. F. 1994. Microstructural development in irradiated vanadium alloys. Journal of nuclear materials. T. 212: 778-783.
8. Fukumoto K., Kimura A., Matsui H. 1998. Swelling behavior of V-Fe binary and V-Fe-Ti ternary alloys. Journal of nuclear materials. T. 258: 1431-1436.
9. Kohn W., Sham L. J. 1965. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. Physical review. T. 140. №. 4A: 1133.
10. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. 1996. Generalized gradient approximation made simple. Physical review letters. T. 77. №. 18: 3865.
11. Kresse G., Furthmüller J. 1996. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. Computational Materials Science. T. 6. №. 1: 15-50.
12. Methfessel M., Paxton A. T. 1989. High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals. Physical Review B. T. 40. №. 6: 3616.
13. Blöchl P. E. 1994. Projector augmented-wave method. Physical Review B. T. 50. №. 24: 17953.
14. Harding J. H., Stoneham A. M. 1981. Vibrational entropies of defects in solids. Philosophical Magazine B. T. 43. №. 4: 705-713.
15. Kittel C. 1996. Introduction to Solid State Chemistry.
16. Gordienko V. A., Nikolaev V. I. 1971. Magnetic Anomalies of the Thermal Expansion of Chromium. ZhETF Pisma Redaktsiiu. T. 14: 6.



17. Pawar R. R., Deshpande V. T. 1968. The anisotropy of the thermal expansion of α -titanium. *Acta Crystallographica Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography*. T. 24. №. 2: 316-317.
18. Ehrhart P., Jung P., Schultz H. 1991. Atomic Defects in Metals (Landolt-Börnstein, New Series, Group III vol 25) ed H Ullmaier.
19. Han S. et al. 2002. Self-interstitials in V and Mo. *Physical Review B*. T. 66. №. 22: 220101.
20. Ohnuma T., Soneda N., Iwasawa M. 2009. First-principles calculations of vacancy-solute element interactions in body-centered cubic iron. *Acta Materialia*. T. 57. №. 20: 5947-5955.
21. Garner F. A., Okita T., Sekimura N. 2011. Swelling of pure vanadium and V-5Cr at $\sim 430^\circ\text{C}$ in response to variations in neutron flux-spectra in FFTF. *Journal of Nuclear Materials*. T. 417. №. 1.: 314-318.
22. Budylnkin N. I. et al. 2008. Neutron-induced swelling and embrittlement of pure iron and pure nickel irradiated in the BN-350 and BOR-60 fast reactors. *Journal of Nuclear Materials*. T. 375. №. 3: 359-364.
23. Mansur L. K. 1981. Theoretical evaluation of a mechanism of precipitate-enhanced cavity swelling during irradiation. *Philosophical Magazine A*. T. 44. №. 4: 867-877.
24. Deng L. et al. 2016. First-principles study of the binding preferences and diffusion behaviors of solutes in vanadium alloys. *Journal of Alloys and Compounds*. T. 660: 55-61.
25. Yoo M. H. 1979. Growth kinetics of dislocation loops and voids—the role of divacancies. *Philosophical Magazine A*. T. 40. №. 2: 193-211.
26. Kartamyshev A.I. et. al. 2016. Many-body interatomic potentials in ti-v system with angular dependence for molecular dynamics simulations. *Belgorod State University Scientific Bulletin Mathematics & Physics*. №20: 117-129.



УДК 512

О МАТРИЦАХ, ПОРОЖДАЮЩИХ СИМПЛЕКТИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ

ABOUT MATRICES CONNECTED WITH SYMPLECTIC STRUCTURES

Ю.П. Вирченко, А.В. Субботин
Yu.P. Virchenko, A.V. Subbotin

Белгородский государственный университет, ул. Студенческая, 14, Белгород, 308007, Россия

Belgorod State University, Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia

E-mail:virch48@bsu.edu.ru

Аннотация

В статье рассматривается класс $\mathfrak{S}$ антисимметричных матриц J фиксированной размерности, которые допускают приведение к канонической матрице, определяющей симплектические матрицы той же размерности, посредством ортогонального преобразования подобия. Доказывается теорема о характеристизации этого класса.

Resume

The class of antisymmetric matrices J with fixed dimension n which to reducing to the canonical matrix that determines symplectic $n \times n$ -matrice by an orthogonal transformation is under consideration. It is proved the statement that characterizes this class.

Ключевые слова: симплектические матрицы, ортогональные матрицы, кососимметрические матрицы.

Keywords: symplectic matrices, orthogonal matrices, antisymmetric matrices.

Введение

Ранее в работе авторов было введено понятие о *симплектических динамических системах* [1] в вещественном евклидовом пространстве. Такими системами $\dot{X} = F(X)$ были названы такие четномерные системы, у которых определяющий каждую из них диффеоморфизмом $F: \mathbf{R}^{2n} \mapsto \mathbf{R}^{2n}$ имеет вид

$$F(X) = (J(X), \nabla)) H(X), \quad (1)$$

где функция $H: \mathbf{R}^{2n} \mapsto \mathbf{R}$ является дифференцируемой и матриц-функцией $J: \mathbf{R}^{2n} \mapsto \mathbf{R}^{2n} \times \mathbf{R}^{2n}$ принимает такие матричные значения, для которых в любой точке $X \in \mathbf{R}^{2n}$ справедливы тождества $J^2(X) = -1$, $J^T(X) = -J(X)$. Важность класса таких динамических систем связана с тем, что они допускают преобразование в гамильтоновы системы посредством некоторой *неканонической* замены переменных (см.[2]).

При общем анализе таких систем, данном в упомянутой публикации, существенно использовалось следующее утверждение

Теорема. Для любой вещественной матрицы J , удовлетворяющей тождествам

$$J^2 = -1, \quad J^T = -J. \quad (2)$$

существует такая ортогональная матрица Y , $Y Y^T = Y^T Y = 1$, что матрица J представляется формулой $J = Y \mathfrak{J} Y^T$

Здесь посредством $\mathfrak{J}$ обозначена каноническая $2n \times 2n$ -матрица

$$\mathfrak{J} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

(жирным шрифтом обозначены, соответственно, нулевая и единичная $n \times n$ -матрицы) посредством которой определяются так называемые симплектические матрицы M , то есть невырожденные матрицы, удовлетворяющие тождеству $\mathfrak{J} = M^T \mathfrak{J} M$.

Введем класс $\mathfrak{S}$ всех вещественных антисимметричных матриц $J = Y \mathfrak{J} Y^T$, каждая из которых определяет симплектическую структуру, которая обладает тем специальным свойством, что она приводится к каноническому виду посредством преобразования подобия, связанного с ортогональной матрицей Y . В силу сформулированной теоремы, класс всех таких матриц полностью характеризуется дополнительным тождеством $J^2 = -1$.



Настоящее сообщение посвящено доказательству сформулированной теоремы.

2. Класс $\mathfrak{A}$

Теорема 1. Порядок n всякой вещественной матрицы $\mathfrak{A} \in \mathfrak{A}$ является четным числом и ей соответствует пара взаимно ортогональных пространств $L_{\pm}$, $L_{+} \oplus L_{-} = \mathbf{R}^n$ с размерностью $n/2$ таких, что всякий вектор $g \in L_{\pm}$ является собственным с собственным числом $\pm i$.

Из равенства $\mathfrak{A}^2 = -1$ следует, что

$$\det \mathfrak{A}^2 = (\det \mathfrak{A})^2 = (-1)^n.$$

Так как $\mathfrak{A}$ вещественная матрица, то n четно.

Так как $\mathfrak{A}$ - антисимметричная матрица, то она имеет полный набор собственных взаимно ортогональных векторов g_j с соответствующими каждому из них чисто мнимыми собственными числами $i\lambda_j$, $\lambda_j \in \mathbb{R}$, $j = 1 \div n$. Тогда для каждого собственного вектора g_j имеем

$$\mathfrak{A} g_j = i\lambda_j g_j, \quad -g_j = \mathfrak{A}^2 g_j = i\lambda_j \mathfrak{A} g_j = -\lambda_j^2 g_j,$$

то есть $\lambda_j^2 = 1$, $\lambda_j = \pm 1$.

Пусть кратности собственных чисел $\pm i$ равны, соответственно, $n_{\pm}$. Ввиду антисимметричности матрицы $\mathfrak{A}$, ее диагональные элементы равны нулю. Следовательно,

$$0 = \text{Sp} \mathfrak{A} = n_{+} - n_{-}, \quad n_{+} = n_{-} = n/2$$

Тогда эти кратности являются размерностями взаимно ортогональных пространств $L_{\pm}$ собственных векторов с собственными числами $\pm i$.

Следствие. Для любого вектора $g \in \mathbb{R}^n$ один из векторов $g \pm i\mathfrak{A}g$ является либо собственным вектором матрицы $\mathfrak{A}$, удовлетворяющей тождествам (2), с собственным числом $\mp i$, а второй равен нулю.

$$\mathfrak{A}(g + i\mathfrak{A}g) = \mathfrak{A}g + i\mathfrak{A}^2g = -i(g + i\mathfrak{A}g).$$

Так как, в силу антисимметрии матрицы $\mathfrak{A}$, выполняется $(\mathfrak{A}g, g) = 0$, то норма собственного вектора $g + i\mathfrak{A}g$ равна $\sqrt{2} \|g\|$, так как

$$(\mathfrak{A}g, \mathfrak{A}g) = (\mathfrak{A}^2g, g) = -(g, g) = -\|g\|^2.$$

3. Доказательство основной теоремы

Из Теоремы 1 непосредственно следует, что для любой четномерной вещественной антисимметричной матрицы $\mathfrak{A}$, удовлетворяющей тождеству $\mathfrak{A}^2 = -1$, существует унитарная матрица Y , $YY^+ = -1$, которая преобразует эту матрицу в «стандартную» матрицу $\mathfrak{A}$ (3), то есть $Y\mathfrak{A}Y^+ = \mathfrak{A}$. Существование сформулированной во вводной части основной теоремы состоит в том, что матрицу Y можно выбрать при этом вещественной, то есть ортогональной.

Доказательство основной теоремы вытекает из фундаментальной теоремы теории матриц о приведении комплексной антисимметричной матрицы к нормальной форме (см. [3], гл. XI, 4), которую мы сформулируем здесь следующим образом.

Теорема 2. Для любой антисимметричной матрицы $\mathfrak{A}$ порядка n найдется ортогональная матрица ς , $\varsigma\varsigma^T = -1$ такая, что

$$\mathfrak{A} = \varsigma \text{diag} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & -\mu_j \\ \mu_j & 0 \end{pmatrix}; j = 1 \div p; 0, \dots, 0 \right\} \varsigma^T,$$

где $\pm i\mu_j$, $j = 1 \div p$ - полный набор ненулевых собственных чисел матрицы $\mathfrak{A}$, $p \leq n$ и число нулей на диагонали равно кратности нулевого собственного значения матрицы $\mathfrak{A}$.

Доказательство основной теоремы следует теперь из того, что в нашем случае $p = n$, так как $(\det \mathfrak{A})^2 = 1$ и все $\mu_j = 1$. Применяя последовательно последовательность подходящих элементарных преобразований подобия матриц на основе ортогональных матриц $\varsigma_{i,j}$, действие которых



$\varsigma_{ij} A \varsigma_{ij}^T$ для каждой матрицы ς_{ij} с парой $\{i, j\}$ на данную матрицу A сводится к одновременной перестановке местами i -й строки с j -й и i -го столбца с j -м, получим, что

$$[\varsigma_{i_1, j_1} \dots \varsigma_{i_{n/2}, j_{n/2}}] \varsigma^T J \varsigma [\varsigma_{i_{n/2}, j_{n/2}}^T \dots \varsigma_{i_1, j_1}^T] = \partial.$$

Существование такой последовательности преобразований подобия следует из того, что каждой матрице ς_{ij} соответствует оператор в $\square^n$, который меняет местами номера векторов e_i и e_j стандартного ортобазиса e_k , $k = 1 \div n$. Для получения нужной последовательности матриц нужно перевести последовательность $\langle e_1, \dots, e_{n/2}, e_{n/2+1}, \dots, e_n \rangle$ в последовательность $\langle e_1, e_3, \dots, e_{n/2} e_2, e_4, \dots, e_n \rangle$

Таким образом, ортогональная матрица $Y = \varsigma_{i_1, j_1} \dots \varsigma_{i_{n/2}, j_{n/2}} \varsigma^T$ удовлетворяет условиям теоремы.

Список литературы

References

1. Субботин А.В., Вирченко Ю.П., 2016 Симплектические динамические системы. Belgorod State University Scientific Bulletin. Mathematics & Physics, 17(214); 44: 181-188.
Subbotin A.V., Virchenko Yu.P., 2016 Simpectic dynamical systems. Belgorod State University Scientific Bulletin. Mathematics & Physics, 17(214); 44: 181-188.
2. Арнольд В.И., 1989. Математические методы классической механики. М.: Наука, 472.
Arnold V.I., 1989. Mathematical methods of classical mechanics. M.: Nauka, 472.
3. Гантмахер Ф.Р., 1966. Теория матриц. М.: Наука, 576.
Gantmakher F.R., 1966. Matrix Theory. M.: Nauka, 576.
4. Дарбу Ж.Г., 2012. Избранное по механике. Ижевск: Удмуртский государственный университет, 256.
Darboux J.G., 2012. Selected works of mechanics. Izhevsk: Udmurt State University, 256.



СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ INFORMATION ABOUT AUTHORS

- Аверин Г.В.** – доктор технических наук, заведующий кафедрой общей математики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Аксенов Д.А.** – кандидат физико-математических наук, сотрудник лаборатории теоретических исследований и компьютерного моделирования центра наноструктурных материалов и нанотехнологий Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Боев А.О.** – аспирант кафедры наноматериалов и нанотехнологий Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Борисенко Л.В.** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Бухурова М.М.** – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник отдела систем автоматизированного проектирования смешанных систем и управления Института прикладной математики и автоматизации.
г. Нальчик
- Вирченко Ю.П.** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Гальцев О.В.** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информационных систем Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Гальцева О.А.** – старший преподаватель кафедры информатики, естественнонаучных дисциплин и методик преподавания Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Глушак А.В.** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей математики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Даллакян Р.В.** – доктор физико-математических наук, доцент, Национальный Политехнический Университет Армении.
г. Ереван
- Данилова Л.П.** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Закарян В.С.** – доктор физико-математических наук, декан факультета прикладной математики и физики Национального Политехнического университета Армении.
г. Ереван
- Захвалинский В.С.** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей и прикладной физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Звягенцева А.В.** – кандидат технических наук, старший научный сотрудник Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород



-
- Картамышев А.И.** – аспирант кафедры наноматериалов и нанотехнологий Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Кормош Е.В.** – кандидат технических наук, доцент кафедры естественнонаучных дисциплин Белгородского университета кооперации, экономики и права.
г. Белгород
- Кудрявцев Б.Ю.** – кандидат физико-математических наук, доцент центра математического образования Московского политехнического университета.
г. Москва
- Куртова Л.Н.** – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры общей математики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Кучеев С.И.** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей и прикладной физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Леонтьева Т.Ю.** – аспирант Чувашского государственного педагогического университета им. И.Я. Яковлева.
г. Чебоксары
- Ле Тхай Шон** – магистрант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Липницкий А.Г.** – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией теоретических исследований и компьютерного моделирования центра наноструктурных материалов и нанотехнологий Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Маврин С.В.** – кандидат физико-математических наук, доцент департамента информационных технологий и автоматизации Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина.
г. Екатеринбург
- Максименко В.Н.** – аспирант кафедры наноматериалов и нанотехнологий Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Межаков Н.Н.** – магистрант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Мотькина Н.Н.** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Неласов И.В.** – доцент кафедры наноматериалов и нанотехнологий Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Никуличева Т.Б.** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей математики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Омельченко Е.И.** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород



-
- Пилюк Е.А.** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей и прикладной физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Рахмелевич И.В.** – кандидат технических наук, доцент Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского.
г. Нижний Новгород
- Рацеев С.М.** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры информационной безопасности и теории управления Ульяновского государственного университета.
г. Ульяновск
- Романченко Т.Г.** – аспирант кафедры дифференциальных уравнений Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Рябцева Н.Н.** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры естественных дисциплин Белгородского университета кооперации, экономики и права.
г. Белгород
- Субботин А.В.** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Хмара А.Н.** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Хоруженко А.С.** – старший преподаватель кафедры компьютерного моделирования и дизайна Донецкого национального технического университета.
г. Донецк
- Ченцова В.В.** – магистрант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород
- Череватенко О.И.** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики Ульяновского государственного педагогического университета им. И.Н. Ульянова.
г. Ульяновск
- Шевцова М.В.** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей математики Белгородского государственного национального исследовательского университета.
г. Белгород