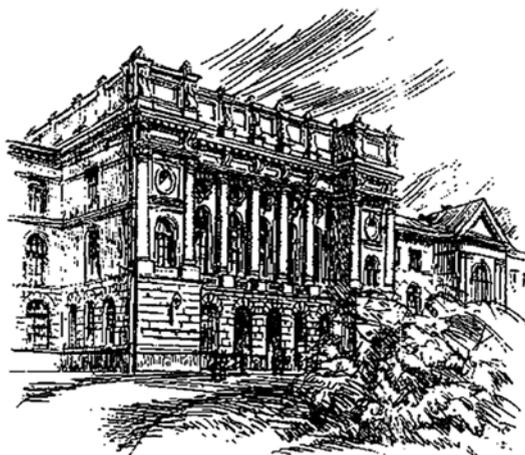


МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

2(194) 2014

Издательство Политехнического университета
Санкт-Петербург
2014

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ**

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Алферов Ж.И., академик РАН – председатель;
Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;
Варшалович Д.А., академик РАН;
Глухих В.А., академик РАН;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Рутберг Ф.Г., академик РАН;
Суриц Р.А., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия – главный редактор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия – зам. главного редактора;
Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбГПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Кожевников Н.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Козловский В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Самойлов В.О., чл.-кор. РАН, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Франкфуртский ун-т им. И.В. Гёте,
Франкфурт-на-Майне, Германия;
Таганцев А.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, Швейцарский федеральный институт технологий,
Лозанна, Швейцария;
Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Тропп Э.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия.

Журнал с 1995 года издается под научно-методическим руководством Российской академии наук.

Журнал с 2002 г. входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук.

Сведения о публикациях представлены в Реферативном журнале ВИНТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

С 2008 года выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ» ISSN 1994-2354.

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.

Распространяется по Каталогу стран СНГ, Объединенному каталогу «Пресса России» и по Интернет-каталогу «Пресса по подписке». Подписной индекс **71823**.

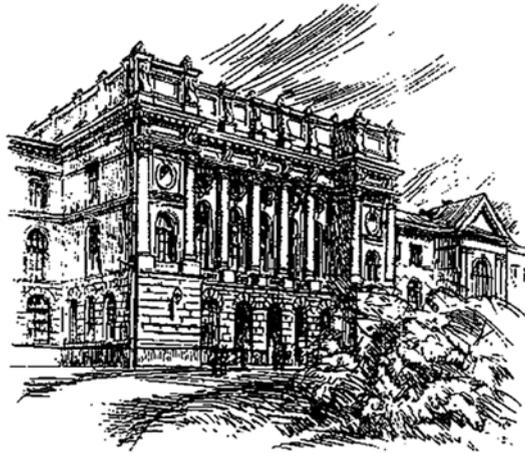
Журнал включен в базу данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте <http://www.elibrary.ru>

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства: Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.
Тел. редакции (812) 294-22-85.

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE RUSSIAN FEDERATION



**ST. PETERSBURG STATE
POLYTECHNICAL UNIVERSITY
JOURNAL**

Physics
and Mathematics

2(194) 2014

Polytechnical University Publishing House
Saint Petersburg
2014

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

Zh.I. Alferov – full member of RAS, head of the editorial council;
A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;
D.A. Varshalovich – full member of RAS; *V.A. Glukhikh* – full member of RAS;
A.Ye. Zhukov – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
V.K. Ivanov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.; *D.A. Indeitsev* – corresponding member of RAS;
A.I. Rudskoy – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
Ph.G. Rutberg – full member of RAS;
R.A. Suris – full member of RAS.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia – editor-in-chief;
A.E. Fotiadi – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia – deputy editor-in-chief;
V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sc., associate prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia – executive secretary;
V.I. Antonov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
A.V. Blinov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
D.A. Firsov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
N.M. Kozhevnikov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
V.V. Kozlovsky – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
V.M. Ostryakov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
V.O. Samoilo – corresponding member of RAMS, prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
A.V. Solovyev – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Johann Wolfgang Goethe University Frankfurt am Main, Germany;
A.K. Tagantsev – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;
I.N. Toptygin – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
E.A. Tropp – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia

The journal is published under the scientific and methodical guidance of RAS since 1995.

The journal is included in the List of leading peer-reviewed scientific journals and other editions to publish major findings of theses for the research degrees of Doctor of Sciences and Candidate of Sciences.

The publications are presented in the VINITI RAS Abstract Journal and Ulrich's Periodical Directory International Database.

The journal is published since 2008 as part of the periodical edition 'Nauchno-tehnicheskie vedomosti SPb-GPU' (ISSN 1994-2354).

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate ПИ № ФС77-52144 issued December 11, 2012.

The journal is distributed through the CIS countries catalogue, the «Press of Russia» joint catalogue and the «Press by subscription» Internet catalogue. The subscription index is **71823**.

The journal is in the Russian Science Citation Index (RSCI) database.

© Scientific Electronic Library (<http://www.elibrary.ru>).

No part of this publication may be reproduced without clear reference to the source.

The views of the authors may not represent the views of the Editorial Board.

Address: 195251 Politeknicheskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: (812) 294-22-85.

Содержание

Физика конденсированного состояния

Серегин М.С., Набережнов А.А., Шаганов А.П., Сысоева А.А. Температурная стабильность сегнетоэлектрической фазы в наночастицах нитрата калия	9
Семенов А.С. Идентификация параметров анизотропии феноменологического критерия пластичности для монокристаллов на основе микромеханической модели	15
Алексеева О.А., Набережнов А.А., Поправский Р. Особенности плавления и кристаллизации наночастиц легкоплавких металлов	30
Бакаев А.В., Журкин Е.Е. Характеристики радиационных дефектов в аустенитных сплавах.....	37
Бакаев А.В., Журкин Е.Е. Моделирование дислокаций в аустенитном сплаве железа на атомарном масштабе расстояний.....	46

Математическое моделирование физических процессов

Иголкин С.И., Мелькер А.И. Молекулярная гидродинамика подводного взрыва.....	54
---	----

Физическая оптика

Погода А.П., Петров В.М. Спектральная селективность отражательных голограмм в кристалле $BaTiO_3:Co$	62
Семенов С.Н., Воробьев С.И., Дудкин В.И. Методика построения микроволнового изображения объекта с применением решения обратной задачи дифракции.....	69

Биофизика и медицинская физика

Мирошников К.А., Симакова М.Н. Структура и свойства литического фермента <i>gp181</i> бактериофага <i>phiKZ</i>	75
--	----

Математика

Хохлюк В.И. Иллюстрация вычислительных процедур разбиения.....	86
Петриченко М.Р. Экстремальные свойства решений параболического уравнения.....	94
Качалов В.И. Голоморфные по параметру интегралы сингулярно возмущенных уравнений второго порядка и предельные теоремы.....	103

Механика

Тихомиров В.В. Трещина продольного сдвига, упирающаяся в клиновидное упругое включение	110
---	-----

Астрофизика

Цыган А.И., Шалыбков Д.А., Барсуков Д.П., Гогличидзе О.А. Анализ дифференциального вращения полярных шапок нейтронных звезд для случая анизотропной проводимости вещества шапок	120
--	-----

Радиофизика

Белявский Г.И., Мисюра И.В. Фильтрация сигналов со скачками, возникающими в дискретном времени и с конечным горизонтом	137
<i>Авторский указатель</i>	145

Contents

Condensed Matter Physics

Seregin M.S., Naberezhnov A.A., Shaganov A.P., Sysoeva A.A. <i>Temperature stability of ferroelectric phase in potassium nitrate nanoparticles.....</i>	9
Semenov A.S. <i>The identification of anisotropy parameters of phenomenological plasticity criterion for single crystals worked out on the micromechanical model basis.....</i>	15
Alekseeva O.A., Naberezhnov A.A., Popravsky R. <i>Peculiarities of melting and crystallization of low-melting metal nanoparticles.....</i>	30
Bakaev A.V., Zhurkin E.E. <i>Characterization of radiation defects in austenitic alloys.....</i>	37
Bakaev A.V., Zhurkin E.E. <i>Atomic-scale simulation of dislocations in the iron austenitic alloy.....</i>	46

Simulation of Physical Processes

Igolkin S.I., Melker A.I. <i>Molecular hydrodynamics of underwater explosion.....</i>	54
--	----

Physical Optics

Pogoda A.P., Petrov V.M. <i>The spectral selectivity of reflective holographic gratings in the BaTiO₃:Co crystal.....</i>	62
Semenov S.N., Vorobyov S.I., Dudkin V.I. <i>Constructing a microwave image of an object using the inverse diffraction problem.....</i>	69

Biophysics and Medical Physics

Miroshnikov K.A., Simakova M.N. <i>The structure and properties of gp181 lytic enzyme of phiKZ bacteriophage.....</i>	75
--	----

Mathematics

Khokhlyuk V.I. <i>The illustration of the calculating partitioning procedures.....</i>	86
Petrichenko M.R. <i>Extreme properties of solutions of a parabolic equation.....</i>	94
Kachalov V.I. <i>Holomorphic in the parameter integrals of the second-order equations perturbed singularly and limit theorems.....</i>	103

Mechanics

Tikhomirov V.V. <i>Longitudinal shear crack terminating at a wedge-shaped elastic inclusion.....</i>	110
---	-----

Astrophysics

Tsygan A.I., Shalybkov D.A., Barsukov D.P., Goglichidze O.A. *An analysis of differential rotation of neutron star polar caps for the case of the anisotropic conductivity of the cap substance.....* 120

Radiophysics

Beliavsky G.I., Misyura I.V. *Signal filtering with jumps during discrete time and under finite horizon.....* 137

Author index..... 145

УДК 538.97

М.С. Серегин¹, А.А. Набережнов^{1,2},
А.П. Шаганов², А.А. Сысоева¹

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

² Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

ТЕМПЕРАТУРНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В НАНОЧАСТИЦАХ НИТРАТА КАЛИЯ

Получены порошковые рентгеновские дифракционные спектры нитрата калия, внедренного в пористые матрицы (двухфазное боросиликатное стекло). Температурный диапазон регистрации спектров составлял 100 – 400 К. Проанализирован фазовый состав образцов при разных температурах и его зависимости от температурной обработки и способа заполнения матриц.

НИТРАТ КАЛИЯ, ПОРИСТОЕ СТЕКЛО, РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ, СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФАЗА.

Введение

В последние годы наноструктурированные материалы привлекают значительное внимание вследствие того, что их физические свойства существенно отличаются от физических свойств массивных материалов. Например, в ряде статей показано, что уменьшение размера частицы от микроскопического до мезо- и наноскопического масштабов приводит к изменению ряда характеристик материалов в ограниченной геометрии, таких как температура и тип фазового перехода (ФП) [1 – 4], диэлектрическая проницаемость [5] и др. Существуют различные методы приготовления ультрадиспергированных материалов и один из них – это введение различных химических соединений в искусственные или природные пористые матрицы, такие как пористые стекла, хризолитовые асбесты, цеолиты, опалы и прочие.

При нормальных условиях массивный нитрат калия (KNO_3) не является сегнетоэлектриком и имеет орторомбическую структуру $Pm\bar{c}n$ (α -фаза, фаза II). При 403 К происходит реконструктивный фазовый пе-

реход в параэлектрическую тригональную фазу $R\bar{3}m$ (β -фаза, фаза I). При охлаждении из β -фазы при температуре около 397 К нитрат калия переходит не в низкотемпературную α -фазу, а в другую – тригональную фазу $R3m$ (γ -фаза, фаза III), которая является сегнетоэлектрической и существует вплоть до 378 К. При дальнейшем охлаждении происходит возврат в низкотемпературную α -фазу.

Несмотря на ряд своих недостатков (метастабильность сегнетофазы, растворимость в воде, присутствие ионов калия) нитрат калия рассматривался как перспективный материал для создания устройств сегнетоэлектрической памяти (FeRAM) [6]. Тонкие пленки KNO_3 обладают рядом привлекательных для практического применения свойств: квадратные петли гистерезиса, низкий потенциал переключения (5 В) и малое время переключения (20 нс) [7]. Кроме того, они сохраняют сегнетоэлектрические свойства даже при комнатной температуре и ниже [8]. Авторами данной работы было показано, что именно поверхностные, а не размерные эффекты (в частности, поверх-

ностные электрические поля) приводят к стабилизации γ -фазы в тонких пленках при комнатной температуре и ниже.

Цель данной работы – выяснить влияние размерного эффекта на структуру и на область температурной стабильности сегнетофазы нитрата калия, внедренного в нанопоры стеклянных матриц. Кроме того, предполагалось установить влияние температурной предыстории образцов (нитрат калия внедрялся как из раствора, так и из расплава). Ранее в работе [9] указывалось, что подобное влияние следует учитывать.

Экспериментальные методы и объекты исследования

В качестве исходных матриц использовались пористые стекла, полученные травлением двухфазных боросиликатных стекол. Средний диаметр пор, определенный с помощью адсорбционной пороскопии и ртутной порометрии составил 7(2) нм. В дальнейшем для обозначения этих пористых стекол будет использоваться аббревиатура PG7. Пористость, определенная из разницы масс после травления, составляла 23 %. Из пористого стекла изготавливались тонкие прямоугольные пластины размером $10,0 \times 10,0 \times 0,5$ мм. Нитрат калия KNO_3 вводился в поры матриц из расплава и из насыщенного водного раствора. После этого пластины извлекались из расплава (раствора), очищались от массивного материала, перетирались в порошок, которым и заполнялись стеклянные капилляры для проведения измерений.

Для определения кристаллической структуры, соотношения фаз при различных температурах и размеров частиц использовалась рентгеновская порошковая дифракция. Размер наночастиц оценивался из уширения (по сравнению с массивным материалом) упругих пиков, возникающего ввиду размерного эффекта. Дифрактограмма для массивного материала регистрировалась только при комнатной температуре для получения инструментальной функции разрешения. Измерения проводились на рентгеновском дифрактометре Supernova (OxfordDiffraction).

Результаты и их обсуждение

Для образцов, приготовленных из расплава, было проведено два температурных цикла измерений:

измерение при комнатной температуре (300 К), нагрев до 430 К (без измерений), затем измерения с шагом 10 – 20 град при охлаждении до 300 К;

измерения при нагреве от 300 до 400 К и охлаждении до 100 К с шагом 10–20 град.

Во всех случаях скорость нагрева (охлаждения) составляла 1 К/мин, непосредственно перед измерением температура стабилизировалась в течение 15 мин.

В целом результаты измерений для обоих циклов совпадают. При комнатной температуре кристаллическая структура соответствует сегнетоэлектрической γ -фазе; α -фаза практически отсутствует: наблюдаются лишь небольшие ее следы, которые скорее всего связаны с наличием небольшой примеси массивного материала, кристаллизовавшегося в крупномасштабных дефектах поверхности образца или в микроскопических трещинах пластин стекла. Эти частицы массива трудно удалить при предварительной подготовке образца, и в процессе приготовления из стекол порошкового образца некоторое количество массивного материала остается. Следует также отметить, что при охлаждении наблюдается температурный интервал, в котором сосуществуют β - и γ -фазы.

На рис. 1 приведены для примера несколько дифрактограмм, полученных во втором цикле. Пунктирными линиями обозначены пики, по которым проводилась идентификация фаз.

Для образцов, приготовленных из насыщенного водного раствора, также было проведено два цикла измерений:

I – нагрев от комнатной температуры (300 К) до 400 К и охлаждение обратно до 300 К с шагом 50 град;

II – нагрев от 300 до 400 К и измерения при последующем охлаждении с шагом 10 – 20 град вплоть до 100 К (рис. 2).

Верхняя дифрактограмма I получена на исходном образце, не подвергнувшись никакой тепловой обработке. Хорошо видно

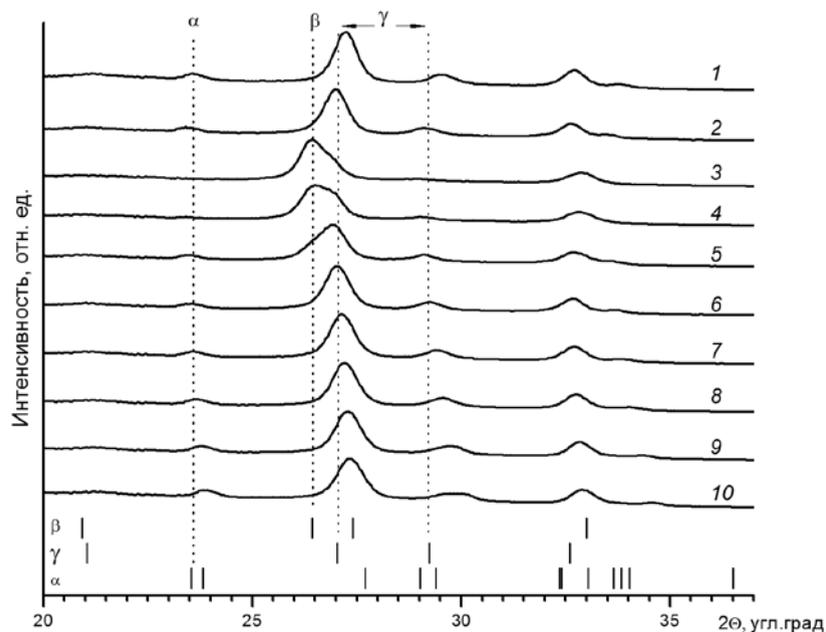


Рис. 1. Дифрактограммы нитрата калия, введенного из расплава в пористые (7 нм) стекла, полученные во втором температурном цикле: при нагреве от 300 до 400 К и последующем охлаждении образцов до 100 К. Температура измерения, К: 300 (1), 380 (2), 400 (3), 380 (4), 360 (5), 340 (6), 300 (7), 260 (8), 180 (9), 100 (10).

Вертикальные пунктиры – реперы положения пиков на спектрах, использованные для идентификации кристаллических фаз. Дополнительно внизу показаны положения брэгговских пиков, характерных для α -, β -, γ -фаз

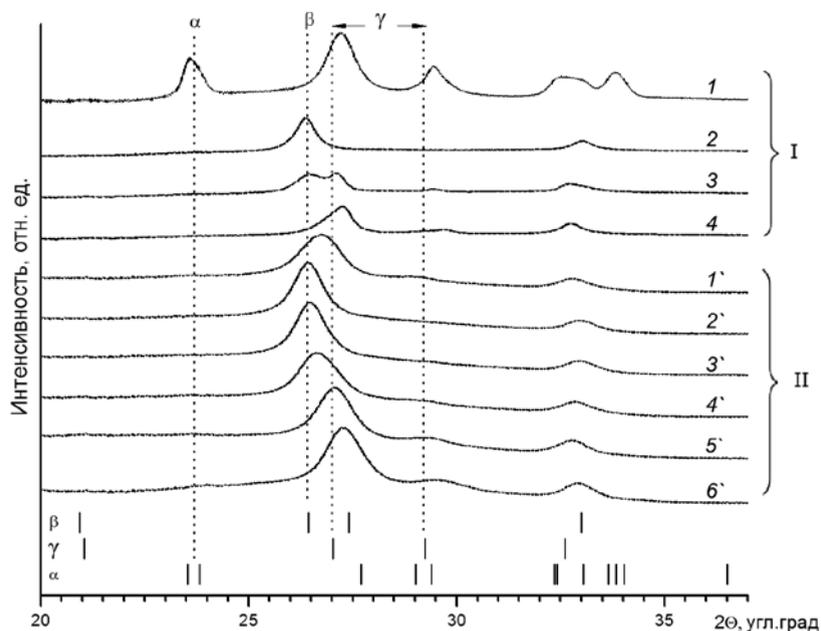


Рис. 2. Дифрактограммы нитрата калия, введенного из раствора в пористые (7 нм) стекла, полученные в первом (I) и втором (II) температурных циклах: I – нагрев от 300 до 400 К, затем охлаждение до 300 К; II – такой же нагрев, но охлаждение до 100 К. Температура измерения, К: 300 (1), 400 (2), 350 (3), 300 (4) (для цикла I); 375 (1'), 400 (2'), 375 (3'), 350 (4'), 300 (5'), 125 (6') (для цикла II)

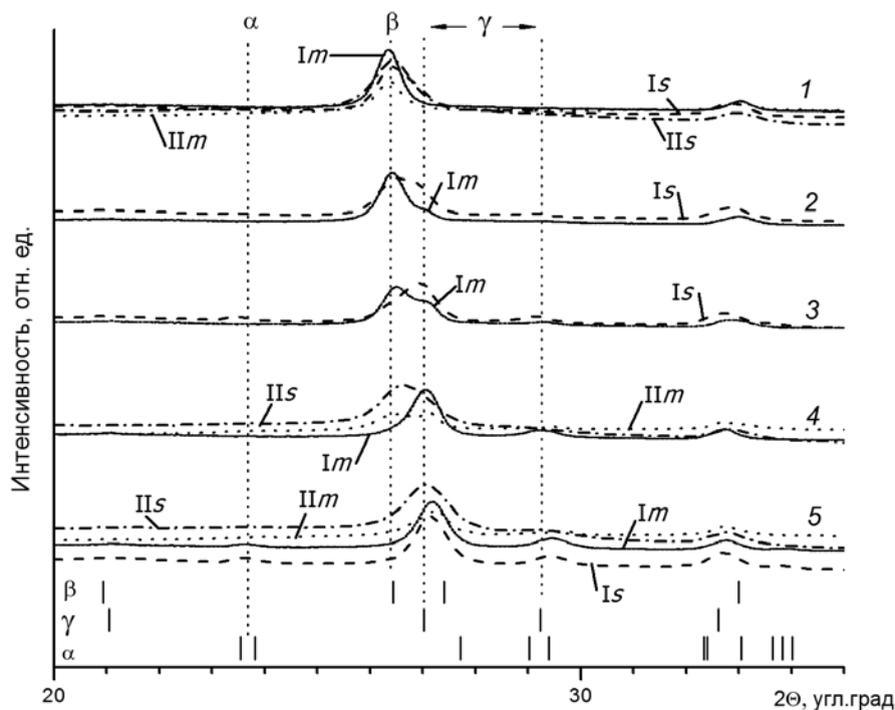


Рис. 3. Сравнение дифрактограмм нитрата калия, полученных при пяти температурах (1 – 5) для двух температурных циклов (I и II) и для образцов, полученных двумя способами введения нитрата калия в пористую матрицу: из расплава (*m*) и из раствора (*s*).
Температура измерения, К: 400 (1), 380 (2), 360 (3), 350 (4), 300 (5)

присутствие пика, соответствующего параэлектрической α -фазе, и двух интенсивных пиков, соответствующих сегнетоэлектрической γ -фазе. При нагреве до 400 К (дифрактограмма 2) α - и γ -фазы практически полностью переходят в высокотемпературную параэлектрическую β -фазу. При охлаждении наблюдается сосуществование β - и γ -фаз в широком температурном интервале (практически до комнатной температуры), однако α -фаза уже не возникает.

Во втором цикле температурная эволюция структуры полностью повторяется, и γ -фаза остается стабильной вплоть до 125 К.

Самый важный результат заключается в отсутствии α -фазы в образцах, подвергнутых нагреву до 400 К, по сравнению с исходными образцами, содержащими α -фазу, хотя в обоих случаях измерения были проведены при одинаковой (комнатной) температуре. Очевидно, что первоначально образец должен быть переведен в γ -фазу либо при изготовлении (заполнение из рас-

плава), либо при последующем нагреве до формирования β -фазы и охлаждения.

На рис. 3 приведено сравнение результатов всех измерений, проведенных при одинаковых температурах. Интенсивности отмасштабированы для наглядности. Можно заметить, что соотношение фаз при температурах между 300 и 400 К, где во всех случаях наблюдаются только сегнетоэлектрическая и высокотемпературная фазы, неодинаково для различных циклов измерений и образцов.

Заключение

В результате проведенного качественного анализа фазового состава нитрата калия, внедренного в пористые матрицы из стекла PG7, получены следующие результаты:

определен дифракционный размер наночастиц нитрата калия в PG7. Он составил 20 (2) нм, т. е. размер частиц значительно превышает средний диаметр пор;

переход KNO_3 из β - в γ -фазу сильно



размывается, и наблюдается широкая область сосуществования обеих указанных фаз для PG7;

структура KNO_3 , введенного из расплава в PG7, при комнатной температуре соответствует сегнетоэлектрической γ -фазе, в то

время как при введении из водного раствора структура соответствует параэлектрической α -фазе для исходного образца. Если затем перевести материал в γ -фазу, то, как и для образцов из расплава, образцы не переходят в α -фазу вплоть до температуры 100 К.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhong W.L., Wang Y.G., Zhang P.L. Phase transitions in finite-size ferroelectrics // *Ferroelectric Lett.* 1998. Vol. 1, pp. 131-193.
2. Li S., Eastman J.A., Li Z., Foster C.M., Newnham R.E., Cross L.E. Size effects in nanostructured ferroelectrics // *Phys. Lett. A.* 1996. Vol. 212, pp. 341-346.
3. Golosovsky I.V., Mirebeau I., Andre G., Kurdyukov D.A., Kumzerov Yu.A., Vakhrushev S.B. Magnetic ordering and phase transition in MnO embedded in a porous glass // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 86, pp. 5783-5786.
4. Sheng P., Cohen R.W., Schrieffer J.R. Melting transition of small molecular clusters // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1981. Vol. 14, L565.
5. Colla E.V., Fokin A.V., Kumzerov Yu.A. Ferroelectric properties of nanosize KDP particles // *Solid State Commun.* 1997. Vol. 103, pp. 127-130.
6. Aydinol M.K., Mantese J.V., Alpay S.P. A comparative ab initio study of the ferroelectric behaviour in KNO_3 and CaCO_3 // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2007. Vol. 19. No. 49, 496210 (23 p.).
7. Araujo C., Scott J.F., Godfrey R.B., McMillan L. Analysis of switching transients in KNO_3 ferroelectric memories // *Appl. Phys. Lett.* 1986. Vol. 48, P. 1439.
8. Scott J.F., Zhang Ming-Sheng, Bruce Godfrey R., Araujo C., McMillan L. Raman spectroscopy of submicron KNO_3 films // *Phys. Rev. B.* 1987. Vol. 35, No. 8, pp. 4044-4051.
9. Schonwandt B.V., Jakobsen H.J. // Phase transitions in KNO_3 studied by variable-temperature 15N magic-angle spinning NMR spectroscopy // *J. of Solid State Chem.* 1999. Vol. 145, pp. 10-14.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СЕРЕГИН Максим Сергеевич – лаборант Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
horanzon@gmail.com

НАБЕРЕЖНОВ Александр Алексеевич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

ШАГАНОВ Антон Павлович – инженер кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
shaganovanton@gmail.com

СЫСОЕВА Анна Августовна – научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
annasysoeva07@mail.ru

Seregin M.S., Naberezhnov A.A., Shaganov A.P., Sysoeva A.A. TEMPERATURE STABILITY OF FERROELECTRIC PHASE IN POTASSIUM NITRATE NANOPARTICLES.

Powder X-ray diffraction spectra of potassium nitrate embedded into porous boron-silicate glasses have been obtained. The temperature range of spectra recording was 100 – 400 K. The phase ratio of samples at various temperatures and its relationship to temperature treatment and to the way of embedding material were analyzed.

POTASSIUM NITRATE, POROUS GLASS, X-RAY DIFFRACTION, FERROELECTRIC PHASE.

REFERENCES

1. **Zhong W.L., Wang Y.G., Zhang P.L.** Phase transitions in finite-size ferroelectrics // *Ferroelectric Lett.* 1998. Vol. 1, pp. 131-193.
2. **Li S., Eastman J.A., Li Z., Foster C.M., Newnham R.E., Cross L.E.** Size effects in nanostructured ferroelectrics // *Phys. Lett. A.* 1996. Vol. 212, pp. 341-346.
3. **Golosovsky I.V., Mirebeau I., Andre G., Kurdyukov D.A., Kumzerov Yu.A., Vakhrushev S.B.** Magnetic ordering and phase transition in MnO embedded in a porous glass // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 86, pp. 5783-5786.
4. **Sheng P., Cohen R.W., Schrieffer J.R.** Melting transition of small molecular clusters // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1981. Vol. 14, L565.
5. **Colla E.V., Fokin A.V., Kumzerov Yu.A.** Ferroelectrics properties of nanosize KDP particles // *Solid State Commun.* 1997. Vol. 103, pp. 127-130.
6. **Aydinol M.K., Mantese J.V., Alpay S.P.** A comparative ab initio study of the ferroelectric behaviour in KNO_3 and CaCO_3 // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2007. Vol. 19. No. 49, 496210 (23 p.).
7. **Araujo C., Scott J.F., Godfrey R.B., McMillan L.** Analysis of switching transients in KNO_3 ferroelectric memories // *Appl. Phys. Lett.* 1986. Vol. 48, P. 1439.
8. **Scott J.F., Zhang Ming-Sheng, Bruce Godfrey R., Araujo C., McMillan L.** Raman spectroscopy of submicron KNO_3 films // *Phys. Rev. B.* 1987. Vol. 35, No. 8, pp. 4044-4051.
9. **Schonwandt B.V., Jakobsen H.J.** // Phase transitions in KNO_3 studied by variable-temperature 15N magic-angle spinning NMR spectroscopy // *J. of Solid State Chem.* 1999. Vol. 145, pp. 10-14.

THE AUTHORS

SEREGIN Maxim S.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
horanzon@gmail.com

NABEREZHNOV Alexander A.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

SHAGANOV Anton P.

St. Petersburg State Polytechnical University
29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.
shaganovanton@gmail.com

SYSOEVA Anna A.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
annasysoeva07@mail.ru



УДК 539.3, 624.04

А.С. Семенов

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ АНИЗОТРОПИИ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОГО КРИТЕРИЯ ПЛАСТИЧНОСТИ ДЛЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ МИКРОМЕХАНИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Проведен анализ предсказательной способности квадратичного критерия пластичности Хилла для монокристаллических жаропрочных сплавов на никелевой основе. Исследованы также возможности определения параметров квадратичного критерия из опытов на одноосное растяжение монокристаллических образцов различной кристаллографической ориентации. Экспериментальные результаты сравниваются с прогнозами микромеханической модели, в которой используется критерий Шмида. С целью повышения точности прогноза предложен новый феноменологический критерий пластичности – критерий четвертой степени, позволяющий учесть ряд эффектов, которые не поддаются анализу при использовании квадратичного критерия.

ПЛАСТИЧНОСТЬ, МОНОКРИСТАЛЛ, ПОВЕРХНОСТЬ НАГРУЖЕНИЯ, АНИЗОТРОПИЯ, ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЙ КРИТЕРИЙ, МИКРОМЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ.

Введение

Монокристаллические жаропрочные сплавы на никелевой основе [1] получили широкое распространение при изготовлении лопаток газовых турбин современных высокотемпературных авиационных двигателей. Основными достоинствами монокристаллических сплавов, по сравнению с поликристаллическими аналогами, является увеличение сопротивления высокотемпературной ползучести и длительной прочности за счет полного исключения границ между зёрнами, а также уменьшение величины модуля упругости в осевом направлении лопатки. Указанные особенности приводят к значительному снижению термических напряжений и росту сопротивления малоциклового усталости.

Современные охлаждаемые рабочие и направляющие лопатки высокотемпературных газотурбинных установок имеют весьма сложную геометрию системы внутренних каналов охлаждения, обеспечивающих понижение температуры материала лопаток. Как следствие этого, повышается надежность их работы. Высокие уровни эксплуатационных нагрузок, неоднородность

температурного поля и нетривиальность геометрии системы охлаждения, приводящая к возникновению концентраторов напряжений, создают в материале лопатки сложное многосное неоднородное напряженное состояние, а также появление локальных зон с высокими уровнями напряжений. При анализе напряженно-деформированного состояния (НДС) лопатки, ее длительной и термоусталостной прочности требуется учитывать эффекты пластичности и использовать модели неупругого деформирования материала с усложненными реологическими свойствами.

Упругое и неупругое поведение монокристаллов демонстрируют ярко выраженную анизотропию механических свойств [1], неучет которой в ряде случаев может приводить к значительным ошибкам в оценке НДС. Одним из простейших вариантов феноменологических критериев пластичности для ортотропного материала, получившим широкое распространение на практике [2 – 6] для монокристаллических жаропрочных сплавов на никелевой основе, является квадратичный критерий Хилла [7]. Более сложные феноменологические критерии пластичности для анизотропного

материала рассмотрены в работах [8 – 10]. В микромеханических моделях (см., например, работы [11, 12]), где учитывается, что неупругое деформирование происходит в соответствии с механизмом скольжения по активным кристаллографическим системам скольжения, в качестве критерия пластичности используется закон Шмида [13]. Для современных монокристаллических жаропрочных сплавов на никелевой основе доминирующими являются октаэдрические системы скольжения $\{111\}\langle 011\rangle$. При определенных условиях нагружения начинают также действовать дополнительные кубические $\{100\}\langle 011\rangle$ и альтернативные октаэдрические $\{111\}\langle 112\rangle$ системы.

В настоящее время на практике монокристаллические лопатки кристаллизуются как система однородно направленных дендритов, а не единого дендрита. Несмотря на это, монокристаллические сплавы на основе никеля обнаруживают на макроуровне ярко выраженные свойства кубической симметрии, при которой механические свойства оказываются практически одинаковыми на трех взаимно перпендикулярных направлениях. Поэтому при разработке феноменологических моделей деформирования такие материалы можно условно рассматривать как монокристаллы с идеальной гранецентрированной кубической (ГЦК) структурой. На микроскопическом уровне структура монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов является двухфазной: частицы γ' -фазы рассеяны в матрице из второй фазы – γ -твердого раствора легирующих элементов в никеле с неупорядоченной ГЦК-структурой. Первая из указанных фаз формируется на основе интерметаллического соединения Ni_3Al , которое представляет собой упорядоченную ГЦК-структуру типа L_2 .

Указанные неидеальности кристаллического строения приводят при определенных условиях к некоторому отклонению от закона Шмида [14] и различию пределов текучести при растяжении и сжатии.

Цель настоящего исследования – рассмотрение различных методов идентификации параметров квадратичного критерия пластичности Хилла как на основе экс-

периментальных данных, так и на основе сравнения результатов эксперимента с прогнозами микромеханической модели, полученными с использованием критерия Шмида.

Систематический анализ влияния кристаллографической ориентации на предел текучести, проведенный с целью улучшения предсказательной способности феноменологического критерия, позволил предложить новую модификацию квадратичного критерия пластичности.

Критерии пластичности монокристаллического материала

При выборе определяющих уравнений неупругого деформирования монокристаллического материала центральную роль играет условие перехода в пластическое состояние. Данное условие формулируется, как правило, в пространстве тензора напряжений и допускает зависимости как от внутренних переменных тензорной или скалярной природы, так и от характеристик материала, количество которых определяется группой симметрии и видом критерия.

Критерии пластичности можно условно разделить на микромеханические и феноменологические. Первые основаны на учете кристаллографии процессов скольжения; к их числу можно отнести закон Шмида и его модификации. Вторые не учитывают реальных механизмов неупругого деформирования кристаллов и принимают в рассмотрение только анизотропию механических свойств материала на макроуровне.

Кристаллографический критерий Шмида. Предполагается, что процесс пластического деформирования монокристалла осуществляется в результате возможного скольжения в N (октаэдрических и/или кубических) системах скольжения; последние характеризуются нормалью \mathbf{n}^α к α -й плоскости скольжения (с наибольшей ретикулярной плотностью) и направлением скольжения \mathbf{l}^α ($\alpha = 1, 2, \dots, N$) (с наиболее плотной упаковкой атомов). Данные характеристики полностью определяются геометрией кристаллической решетки. В соответствии с законом Шмида, система скольжения становится активной и в ней начинается

пластическое деформирование при достижении приведенных касательных напряжений τ^α критического значения τ_0 , которое принимается не зависящим от ориентации монокристалла и рассматривается в качестве характеристики материала. Приведенные касательные напряжения τ^α действуют на плоскости скольжения с нормалью \mathbf{n}^α в направлении скольжения \mathbf{l}^α и связаны с тензором напряжений Коши $\boldsymbol{\sigma}$ линейным соотношением

$$\tau^\alpha = \mathbf{n}^\alpha \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{l}^\alpha.$$

С введением обозначения для тензора Шмида как

$$\mathbf{P}^\alpha = (1/2)(\mathbf{n}^\alpha \mathbf{l}^\alpha + \mathbf{l}^\alpha \mathbf{n}^\alpha),$$

условие начального перехода монокристалла в пластичность, в соответствии с законом Шмида, принимает следующий вид:

$$\min_{\alpha} \frac{1}{\tau_0} \mathbf{P}^\alpha \cdot \boldsymbol{\sigma} - 1 = 0, \quad (1)$$

где символом из двух точек обозначена операция свертки (двойного скалярного произведения), т. е.

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} = X_{ij} Y_{ji}.$$

Квадратичный критерий Хилла. Феноменологические модели пластичности не учитывают реальных механизмов неупругого деформирования кристаллов и особенностей эволюции его микроструктуры. В этих моделях монокристалл идеализируется и рассматривается как анизотропная однородная сплошная среда; при этом учитываются как исходный, так и деформационно-индуцированный виды анизотропии.

Простейшим вариантом феноменологического критерия пластичности, получившим широкое распространение при анализе поведения монокристаллических материалов [2 – 6], является квадратичный критерий Хилла [7]:

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{M} \cdot \mathbf{s} - 1 = 0, \quad (2)$$

где \mathbf{s} – девиатор тензора напряжений;

$$\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma} - (1/3)\mathbf{1}\text{tr}\boldsymbol{\sigma},$$

$\mathbf{1}$ – единичный тензор; \mathbf{M} – тензор четвертого ранга, характеризующий анизотропию поверхности нагружения.

Для кубической группы симметрии кристалла тензор \mathbf{M} (так же, как и тензор упругих модулей) в системе координат, связанной с кристаллографическим базисом, имеет следующую структуру, которая характеризуется тремя константами:

$$[\mathbf{M}] = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{12} & 0 & 0 & 0 \\ M_{12} & M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & 0 \\ M_{12} & M_{12} & M_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{44} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Подстановка выражения (3) в уравнение (2) приводит к равенству

$$(M_{11} - M_{12})(s_{11}^2 + s_{22}^2 + s_{33}^2) + M_{44}(s_{12}^2 + s_{23}^2 + s_{31}^2) - 1 = 0, \quad (4)$$

которое характеризуется только двумя независимыми константами материала (M_{44} и комбинацией $M_{11} - M_{12}$) и может быть переписано с заменой компонент девиатора на компоненты тензора напряжений в виде

$$\{(1/2)[(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2] + K_p(\tau_{12}^2 + \tau_{23}^2 + \tau_{31}^2)\}^{1/2} = \sigma_T, \quad (5)$$

где введены обозначения

$$\sigma_T = \sqrt{\frac{3}{2(M_{11} - M_{12})}}; \quad (6)$$

$$K_p = \sqrt{\frac{3M_{44}}{2(M_{11} - M_{12})}}. \quad (7)$$

Следует отметить, что при использовании соотношений (4) и (5) компоненты девиатора и тензора напряжений задаются в системе координат, связанной с кристаллографическим базисом [100], [010], [001].

Идентификация параметров квадратичного критерия

Для определения двух констант σ_T и K_p достаточно определить условия перехода материала в пластическое состояние при двух произвольных различных напряженных состояниях. Таковыми могут являться, например, опыты на одноосное растяжение двух цилиндрических образцов различной кристаллографической ориентации (КГО)

или опыты на растяжение и кручение для двух образцов одинаковой КГО. Первый вариант получил большее распространение на практике, благодаря простоте реализации и возможности обеспечения однородного напряженного состояния в образцах.

Одноосное растяжение вдоль одной из кристаллографических осей кристалла (для определенности примем, что вдоль оси [001]) приводит к реализации однокомпонентного (одноосного) напряженного состояния

$$\sigma_{33} \neq 0, \sigma_{22} = \sigma_{11} = \tau_{12} = \tau_{23} = \tau_{31}$$

позволяет непосредственно определить σ_T по значению σ_{33} в момент перехода в пластичность.

Напряженное состояние образца, который нагружается вдоль оси, отклоненной от кристаллографических осей кристалла (например, вдоль оси Z), будет многокомпонентным (многоосным) и зависящим от ориентации Z в кристаллографической системе координат. Последняя определяется двумя углами Эйлера: θ и φ (рис. 1). Матрица преобразования при переходе от глобальной системы координат X, Y, Z к кристаллографической [100], [010], [001] имеет вид:

$$\alpha_{ij} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \cos \theta & \sin \varphi \sin \theta \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \cos \theta & \cos \varphi \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}. \quad (8)$$

Компоненты тензора напряжений в кристаллографическом базисе

$$\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \tau_{12}, \tau_{23}, \tau_{31}$$

можно вычислить на основе компонент тензора напряжений в глобальном базисе

$$\sigma_{zz} \neq 0, \sigma_{yy} = \sigma_{xx} = \tau_{xy} = \tau_{yz} = \tau_{zx}$$

с использованием соотношения

$$\sigma'_{ij} = \alpha_{ik} \alpha_{jm} \sigma_{ij}$$

Подстановка полученных значений компонент тензора напряжений в кристаллографическом базисе в выражение (5)

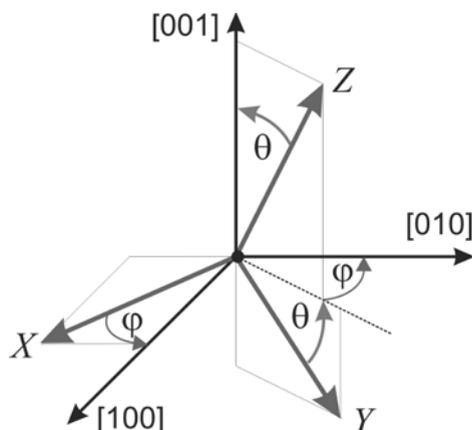


Рис. 1. Ориентация глобальной системы координат X, Y, Z (связана с образцом и внешним воздействием) по отношению к кристаллографической системе координат [100], [010], [001]; θ, φ – углы Эйлера

приводит к связи пределов текучести материала в направлении оси Z $\sigma_T(\theta, \varphi) = \sigma_{zz}$ и вдоль оси [001] $\sigma_{T_{[001]}} = \sigma_T$:

$$\sigma_T(\theta, \varphi) \left[1 + \frac{K_p - 3}{4} (\sin^2 2\theta + \sin^4 \theta \cdot \sin^2 2\varphi) \right]^{1/2} = \sigma_{T_{[001]}} \quad (9)$$

откуда может быть получено выражение для определения константы K_p :

$$K_p = 3 + 4(\sin^2 2\theta + \sin^4 \theta \cdot \sin^2 2\varphi)^{-1} \times \left[\left(\frac{\sigma_{T_{[001]}}}{\sigma_T(\theta, \varphi)} \right)^2 - 1 \right]. \quad (10)$$

Таким образом, из опыта на одноосное растяжение вдоль одной из кристаллографических осей кристалла определяется величина $\sigma_{T_{[001]}}$, а из второго опыта на растяжение вдоль направления, не совпадающего с кристаллографическими осями, определяется величина K_p (см. выражение (10)).

Для характерных частных случаев выбора ориентации образца во втором опыте справедливы выражения, представленные в табл. 1.

В общем случае при произвольной ориентации $[hkl]$ как следствие формулы (10) получаем:

Таблица 1

 Частные случаи выбора ориентации образца для нахождения константы K_p

Ориентация образца	Угол Эйлера		Константа K_p	Номер формулы
	θ	φ		
[011]	$\pi/4$	0	$4 \left(\frac{\sigma_{T_{[001]}}}{\sigma_{T_{[011]}}} \right)^2 - 1$	(11)
[111]	$\arccos(1/\sqrt{3}) \approx 54,7^\circ$	$\pi/4$	$3 \left(\frac{\sigma_{T_{[001]}}}{\sigma_{T_{[111]}}} \right)^2$	(12)
[012]	$\arccos(2/\sqrt{5}) \approx 26,6^\circ$	0	$\frac{25}{4} \left(\frac{\sigma_{T_{[001]}}}{\sigma_{T_{[012]}}} \right)^2 - \frac{13}{4}$	(13)
[112]	$\arccos(2/\sqrt{6}) \approx 35,3^\circ$	$\pi/4$	$4 \left(\frac{\sigma_{T_{[001]}}}{\sigma_{T_{[112]}}} \right)^2 - 1$	(14)

$$K_p = 3 + \frac{(h^2 + k^2 + l^2)^2}{(h^2 + k^2)l^2 + h^2k^2} \left[\left(\frac{\sigma_{T_{[001]}}}{\sigma_{T_{[hkl]}}} \right)^2 - 1 \right]. \quad (15)$$

Идентификация констант σ_T и K_p квадратичного критерия (5) в самом общем случае, когда направление нагружения ни в одном из двух опытов не совпадает с кристаллографическими осями, осуществляется по пределам текучести σ_{T_1} и σ_{T_2} для двух произвольных несовпадающих ориентаций, характеризуемых углами (θ_1, φ_1) и (θ_2, φ_2) ; при этом используются равенства

$$K_p = 3 + 4(\sigma_{T_2}^2 - \sigma_{T_1}^2) \times [\sigma_{T_1}^2 A(\theta_1, \varphi_1) - \sigma_{T_2}^2 A(\theta_2, \varphi_2)]^{-1}; \quad (16)$$

$$\sigma_T = \sigma_{T_1} \sigma_{T_2} [A(\theta_1, \varphi_1) - A(\theta_2, \varphi_2)]^{\frac{1}{2}} \times [\sigma_{T_1}^2 A(\theta_1, \varphi_1) - \sigma_{T_2}^2 A(\theta_2, \varphi_2)]^{-\frac{1}{2}}, \quad (17)$$

где

$$A(\theta, \varphi) = \sin^2 2\theta + \sin^4 \theta \cdot \sin^2 2\varphi.$$

Для изотропного материала при равенстве пределов текучести по всем направлениям, в силу любого из равенств (10) – (16), находим, что $K_p = 3$. В этом случае квадратичный критерий Хилла вырождается в критерий Мизеса [8]. При $K_p < 3$ на переход в пластичность большее влияние оказывают диагональные компоненты тен-

зора напряжений (в собственных осях анизотропии), а при $K_p > 3$ – недиагональные (сдвиговые).

На рис. 2 показаны зависимости K_p от температуры для различных отечественных (ЖС32, ЖС36, ВЖМ4, ВКНА-1В) и зарубежных (PW1480, MD2) сплавов, полученные на основе опубликованных данных [1, 15–18] и обработанные нами с использованием соотношения (12). Несмотря на широкий разброс представленных результатов, просматривается ряд общих

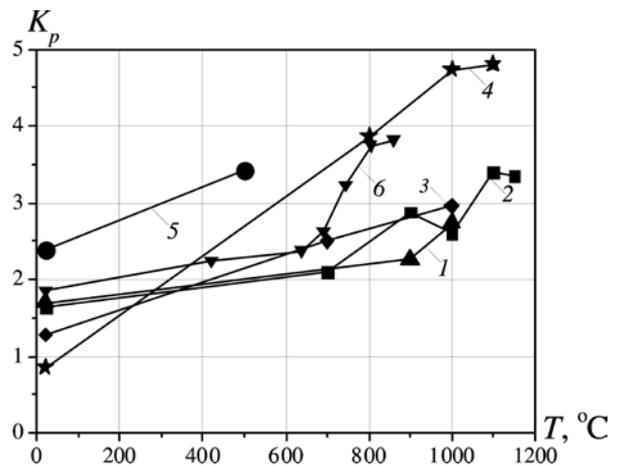


Рис. 2. Температурные зависимости K_p для различных сплавов: 1 – ЖС32 [1], 2 – ЖС36 [1], 3 – ВЖМ4 [15], 4 – ВКНА-1В [16], 5 – MD2 [17], 6 – PW1480 [18]

закономерностей: графики зависимостей монотонно возрастают от минимальных значений K_p из диапазона 1 – 2 при комнатной температуре до максимальных значений 3 и выше в области высоких температур. Кроме того, на начальном участке все зависимости близки к линейным, а далее наблюдается резкое возрастание K_p с последующей стабилизацией значений в области температур, соответствующих пиковым значениям пределов текучести (для углеродистых сплавов). Следует отметить, что при повышенных температурах (выше пиковых) анизотропия пределов текучести практически вырождается ($K_p \rightarrow 3$).

Критерий Хилла реализован в современных конечно-элементных программных комплексах. Для расчета НДС элементов конструкций из монокристаллических материалов необходимо задать $\sigma_{T_{001}}$ и один из двух наборов: либо коэффициентов $F = G = H = 0,5$, $L = M = N = 0,5K_p$, либо безразмерных пределов текучести $R_{11} = R_{22} = R_{33} = 1$, $R_{12} = R_{23} = R_{31} = \sqrt{3} / K_p$.

Выбор ориентации образца при проведении второго опыта для определения K_p может осуществляться различными способами (см. формулы (11) – (15)). В связи с этим возникает проблема выбора оптимальной ориентации, приводящей к наименьшей погрешности, а также вопрос о наличии чувствительности K_p как таковой к изменению ориентации. Последний вопрос непосредственно связан с точностью и достоверностью квадратичного критерия Хилла в отношении монокристаллических сплавов. Для решения данных проблем нами проведено сравнение рассматриваемого феноменологического критерия с кристаллографическим критерием Шмида и с экспериментальными результатами для различных КГО.

Сравнение прогнозов квадратичного критерия Хилла с прогнозами по критерию Шмида

Рассмотрим в качестве примера различные направления нагружения только в пределах плоскости (100), которая включает характерные направления [001] и [011]. Изменение предела текучести в зависимо-

сти от угла отклонения оси нагружения Z от оси [001] (см. рис. 1) определяется в соответствии с квадратичным критерием на основе соотношения (9) при условии $\varphi = 0$:

$$\sigma_T(\theta) = \frac{\sigma_{T_{001}}}{\sqrt{1 + \frac{K_p - 3}{4} \sin^2 2\theta}}. \quad (18)$$

Анализ соотношения (18) показывает, что при $K_p < 3$ предел текучести $\sigma_{T_{001}}$ будет минимальным по сравнению с таковыми для других направлений $\sigma_T(\theta)$, а при $K_p > 3$ величина $\sigma_{T_{001}}$ будет максимальной. При изменении угла θ от 0 до 360° наблюдается четыре полуволны и, соответственно, четыре максимума и четыре минимума. Это объясняется наличием в подкоренном выражении в (18) функции

$$\sin^2(2\theta) = \frac{1 - \cos 4\theta}{2}.$$

В соответствии с критерием Шмида (1), при варьировании направления нагружения в пределах плоскости (100) при различных значениях угла θ включаются различные системы скольжения. При изменении угла θ от 0 до 360° можно выделить восемь секторов по 45°. Активные системы скольжения при изменении угла θ представлены в табл. 2.

Предел текучести для различных КГО определяется на основе критерия (1), с использованием значений компонент тензора Шмида (см. Приложение) и тензора напряжений в кристаллографическом базисе. Например, в диапазоне $0 \leq \theta \leq 45^\circ$ для системы скольжения A_3 получаем следующее соотношение:

$$\sigma_T(\theta) = \frac{2\sigma_{T_{001}}}{\sin 2\theta + \cos 2\theta + 1}. \quad (19)$$

Сравнение зависимостей пределов текучести для квадратичного критерия (18) и критерия Шмида (19) при $0 \leq \theta \leq 45^\circ$ и аналогичных выражений для других систем скольжения во всем диапазоне изменения угла θ представлено на рис. 3. Наблюдается существенное различие в прогнозах двух рассматриваемых критериев. При варьиро-

Таблица 2

Активные системы скольжения при варьировании направления нагружения (угол θ) образца в пределах плоскости (100) по закону Шмида

Диапазон изменения угла θ , град	Активная система скольжения
0 – 45 180 – 225	A_3, B_4
45 – 90 225 – 270	A_6, B_5
90 – 135 270 – 315	C_5, D_6
135 – 180 315 – 360	C_3, D_4

Примечание. Плоскости и направления скольжения, соответствующие системам скольжения, см. в Приложении в конце статьи

вании константы K_p в пределах от 1 до 10 ни одно из этих ее значений не позволяет найти приемлемой аппроксимации для кривой, соответствующей критерию Шмида.

Принципиальное несоответствие критериев проявляется также в различном прогнозируемом числе полувольт при изменении угла θ от 0 до 360°: согласно критерию Хилла их должно быть четыре, тогда как по Шмиду наблюдается восемь полувольт.

Сравнение результатов применения критериев Хилла (18) и Шмида (19) с экспери-

ментальными данными показано на рис. 4. При достаточно сильном разбросе опытных данных, вызванном различием как сплавов, так и режимов испытаний (PWA1480 при 593°C [18], AM3 и CMSX2 при 650°C [19], IC10 при 20°C [20]), а также различием направлений нагружения (растяжение или сжатие), наблюдается удовлетворительное согласие критерия Шмида с экспериментальными данными, в то время как соответствие квадратичного критерия Хилла данным опыта оставляет желать лучшего.

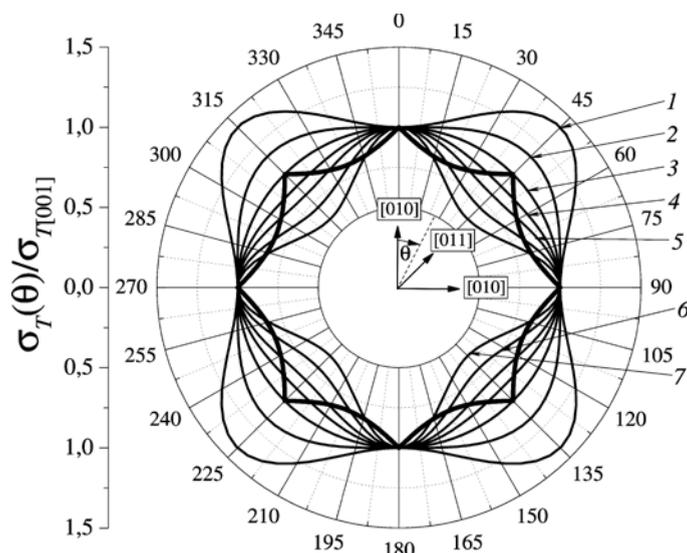


Рис. 3. Сравнение зависимостей предела текучести от угла отклонения от направления [001] в плоскости (100) для критериев Шмида (жирная линия) и Хилла (тонкие линии) при одноосном растяжении монокристалла. Значения K_p : 1 (кривая 1); 2 (2); 3 (3); 4 (4); 5 (5); 7 (6); 10 (кривая 7)

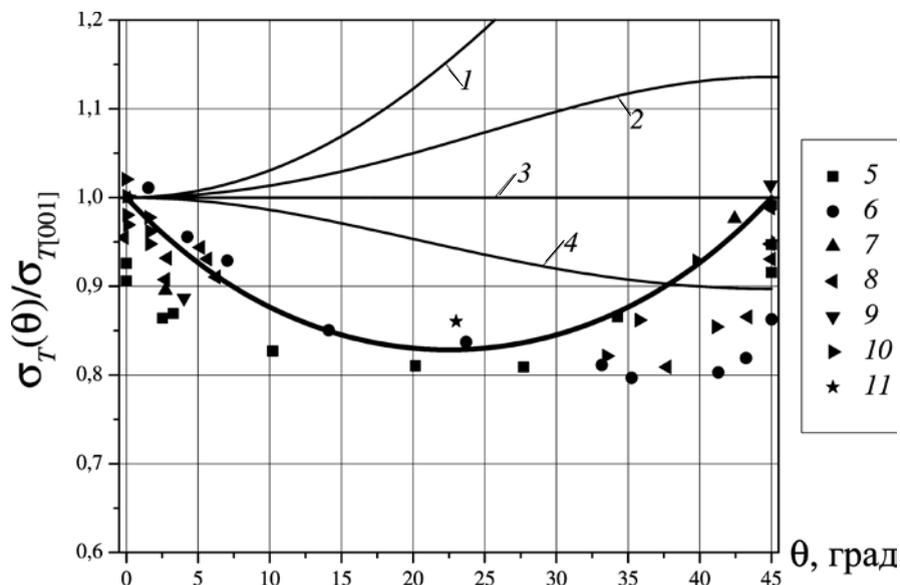


Рис. 4. Сравнение угловых зависимостей предела текучести согласно критериям Шмида (жирная линия) и Хилла (тонкие линии) с экспериментальными данными (символы) для разных сплавов при одноосном растяжении (6, 8, 10, 11) и сжатии (5, 7, 9) (варьируются углы отклонения нагрузки от направления [001] в плоскости (100)). Значения K_p : 1(1), 2(2), 3(3), 4(4); Сплавы: 5, 6 – PWA1480 [18]; 7, 8 – АМЗ[19]; 9, 10 – CMSX2 [19]; 11 – IC10 [20]

Квадратичный критерий оказывается не состоятельным, когда необходимо описать присутствие минимума в середине интервала при $\theta = \pi / 8$; однако этот минимум прогнозируется при использовании критерия Шмида и наблюдается в экспериментах.

В соответствии с критерием Шмида, предел текучести для ориентации [011] совпадает с пределом текучести для ориентации [001], т. е. $\sigma_{T[011]} = \sigma_{T[001]}$ (см. также рис. 4); это указывает на неприемлемость определения K_p по ориентации [011] с использованием уравнения (11). Для ориентации [111] критерий Шмида приводит к равенству $\sigma_{T[111]} = 3/2 \sigma_{T[001]}$, откуда следует, в соответствии с равенством (12), что $K_p = 4/3$.

Дальнейшее сравнение прогнозов по двум критериям, выполненное без ограничения на варьирование направления нагружения (только в пределах плоскости (100)), показало также наличие существенных различий в пределах всего стереографического треугольника (рис. 5). Результаты получены с помощью программы CES (Constitutive Equations Studio) [21]. Определение значе-

ния K_p по закону Шмида на основе метода наименьших квадратов в пределах площади стереографического треугольника, по формуле

$$K_p = \arg \min_{K_p} \iint_S [\sigma_T^{Hill}(\theta, \varphi, K_p) - \sigma_T^{Schmid}(\theta, \varphi)]^2 d\varphi d\theta,$$

приводит к результату $K_p = 3,1$ (почти изотропное приближение).

В то же время минимизация абсолютной ошибки отклонения, т. е. когда

$$K_p = \arg \min_{K_p} \iint_S |\sigma_T^{Hill}(\theta, \varphi, K_p) - \sigma_T^{Schmid}(\theta, \varphi)| d\varphi d\theta,$$

приводит к существенно иному результату – $K_p = 2$, что свидетельствует о наличии качественных различий в сопоставляемых зависимостях.

Полученные в данном разделе результаты указывают на необходимость модификации феноменологического критерия с целью повышения точности прогнозов для монокристаллических материалов.

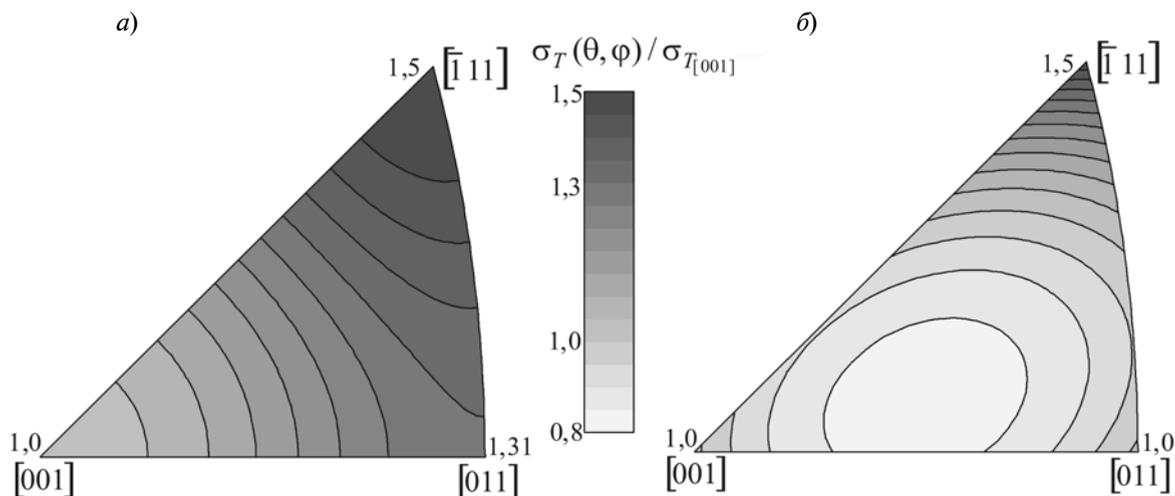


Рис. 5. Сравнение ориентационных зависимостей пределов текучести $\sigma_T(\theta, \varphi) / \sigma_{T_{[001]}}$ для критериев Хилла при $K_p = 4/3$ (а) и Шмида (б)

Модифицированный феноменологический критерий

Анализ установленного нами факта, что период углового изменения предела текучести по закону Шмида в два раза меньше, чем тот же период, но по квадратичному критерию Хилла (см. рис. 3), позволяет предположить, что повышение степени полинома, входящего в формулу для феноменологического критерия, с двух до четырех приведет к повышению точности аппроксимации. Простейшим вариантом обобщения квадратичного критерия (2) является выражение

$$s^2 \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{N} \cdot \cdot s^2 - 1 = 0, \quad (20) \quad (20)$$

в котором ${}^4\mathbf{N}$ – тензор четвертого ранга, имеющий для кубической группы симметрии кристалла структуру, аналогичную (3).

Детальный анализ зависимости предела текучести при варьировании направления нагружения от [001] до [011] в пределах плоскости (100), показал, что для рассматриваемой структуры ${}^4\mathbf{N}$ уменьшения периода не происходит, а именно – при изменении угла θ от 0 до 360° наблюдается, как и ранее, четыре полуволны. Однако дальнейшее усложнение выражения (20) при сохранении степени полинома равным четырем, в виде

$$s^2 \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{N} \cdot \cdot s^2 - (s \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{M} \cdot \cdot s)^2 - 1 = 0, \quad (21)$$

позволяет получить желаемый результат (рис. 6).

При использовании критерия (21) наблюдается, как и в случае критерия Шмида, наличие минимума предела текучести в середине интервала $0 \leq \theta \leq 45^\circ$. При сравнении результатов применения критерия (21) с данными опытов удастся получить удовлетворительное совпадение (рис. 7).

Критерий (21) содержит пять независимых констант: $N_{11}, N_{12}, N_{44}, M_{11} - M_{12}, M_{44}$. Три из них можно выразить через оставшиеся две из трех условий совпадения пределов текучести феноменологического (21) и кристаллографического (1) критериев при $\theta = 0^\circ$ ($\sigma_T(0^\circ) = \sigma_{T_{[001]}}$), $\theta = 45^\circ$ ($\sigma_T(45^\circ) = \sigma_{T_{[011]}}$) и $\theta = 22,5^\circ$ ($\sigma_T(22,5^\circ) = \sigma_{T_{[-0251]}}$) и тем самым обеспечить возникновение минимума предела текучести на интервале $0 \leq \theta \leq 45^\circ$. Оставшиеся две константы можно найти из условия совпадения пределов текучести в других направлениях, например, для ориентаций [111] и [112]. Важно отметить, что константы материала могут выбираться как из условия совпадения пределов текучести с экспериментом, так и из условия совпадения с прогнозом по закону Шмида (последнее было показано выше). Результаты, представленные на рис. 6 и 7, получены для следующих значений констант критерия четвертой степени (21):

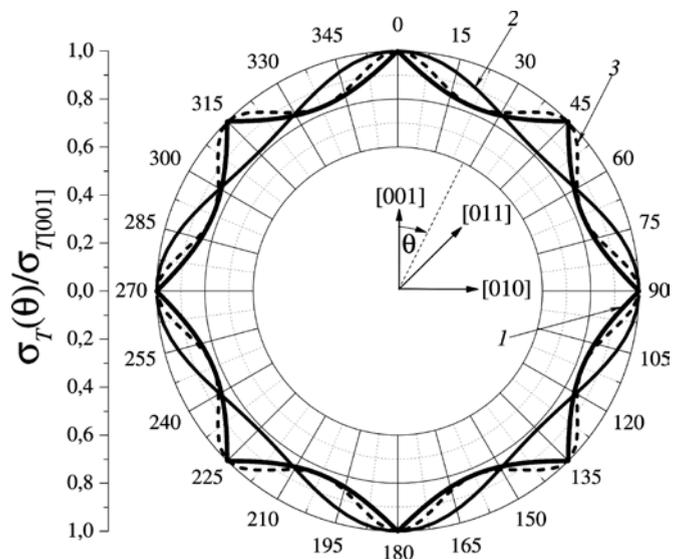


Рис. 6. Сравнение зависимостей предела текучести при одноосном растяжении монокристалла от угла отклонения от направления [001] в плоскости (100). Кривая 1 – использован критерий Шмида; 2 – Хилла при $K_p = 5$; 3 – предложенный критерий четвертой степени (см. формулу (21))

$$N_{11} = 1 / \sigma_{T[001]}^4, \quad N_{12} = 3,5 / \sigma_{T[001]}^4,$$

$$N_{44} = -2,5 / \sigma_{T[001]}^4,$$

$$M_{11} = 1 / \sigma_{T[001]}^2, \quad M_{12} = 0,$$

$$M_{44} = 2,3533 / \sigma_{T[001]}^2.$$

Возможен также и альтернативный путь выбора параметров критерия (21), связанный с анализом условий перехода в пластическое состояние не только на основе опытов на одноосное растяжение, но также и на кручение и комбинированное нагружение. На рис. 8 показаны поверхности

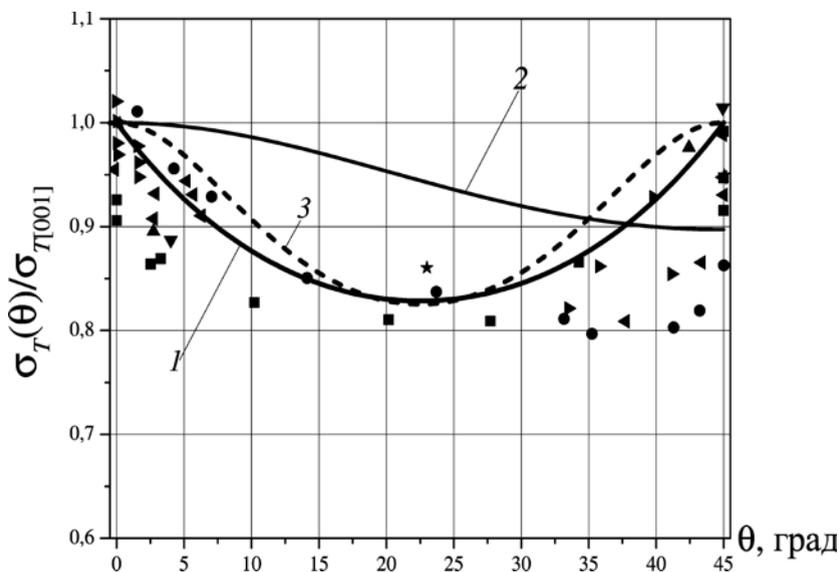


Рис. 7. Сравнение зависимостей предела текучести для критериев Шмида (1), Хилла при $K_p = 4$ (2) и критерия четвертой степени (21) (3) с экспериментальными данными при различных углах отклонения нагрузки от направления [001] в плоскости (100). Данные экспериментов (символы) соответствуют приведенным на рис. 4

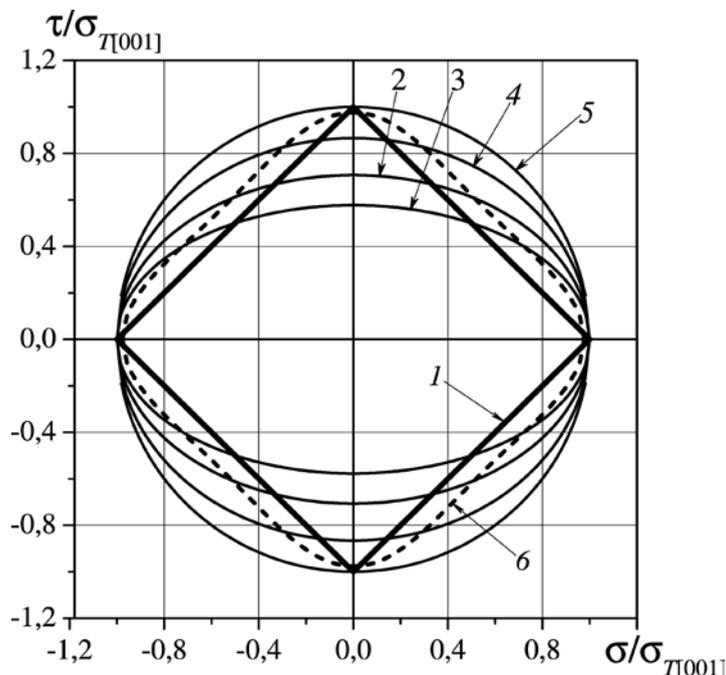


Рис. 8. Поверхности нагружения при совместном растяжении и кручении образца ориентации [001] по трем критериям: Шмида (1), Хилла (2 – 5) и автора данной работы (см. формулу (21)) (6).

Значения K_p (критерий Хилла): 2 (2), 3 (3), 4/3 (4), 1 (5)

нагружения, полученные с помощью критериев Шмида, Хилла и предложенного нами критерия четвертой степени (см. соответствующие формулы (1), (2) и (21)) для случая комбинированного растяжения с кручением для образца ориентации [001].

Поверхность нагружения, построенная с помощью критерия Шмида (1) с учетом только октаэдрических систем скольжения, для образца ориентации [001] имеет форму квадрата. Критерию Хилла при рассматриваемых условиях нагружения соответствуют кривые в форме эллипса, описываемого уравнением

$$\sigma^2 + K_p \tau^2 = \sigma_{T[001]}^2,$$

с меняющимся размером вертикальной полуоси при изменении K_p .

Эллипс – это довольно грубая аппроксимация квадрата, он обеспечивает достаточную точность только при малых значениях касательных напряжений. Критерий четвертой степени (21) предлагает более точную гладкую аппроксимацию квадрата. Кривая, соответствующая формуле (21), описывается уравнением вида

$$\sigma^4 + \alpha \sigma^2 \tau^2 + \beta \tau^4 = \sigma_{T[001]}^4.$$

Дальнейшего повышения точности аппроксимации можно добиться путем повышения степени полинома феноменологического критерия пластичности, однако это приводит к значительному увеличению числа характеризующих его констант и усложнению процедур идентификации. При решении конкретных краевых задач поиск компромисса между точностью решения и сложностью модели материала (а также сопряженной с ней трудоемкостью определения необходимых констант материала) может быть найден на основе подходов, используемых в многомодельном анализе [22].

Заключение

Результаты проведенных исследований показали, что квадратичный критерий пластичности Хилла, широко используемый на практике для монокристаллических жаропрочных сплавов на никелевой основе, демонстрирует значительные отклонения от

прогнозов, даваемых с помощью кристаллографического критерия Шмида, и от экспериментальных данных при варьировании кристаллографической ориентации в случаях одноосного растяжения и комбинированного нагружения. Двух констант материала, используемых в данном критерии, оказывается недостаточно для описания всего многообразия явлений, которые на-

блюдаются при переходе в пластическое состояние монокристаллов с ГЦК-решеткой при многоосном напряженном состоянии.

Одним из возможных путей повышения точности феноменологических критериев пластичности является увеличение показателей степени в тензорно-полиномиальном критерии. Предложенный в данной работе критерий четвертой степени позволяет

Приложение. Тензоры Шмида для октаэдрических систем скольжения

Обозначение системы скольжения	Плоскость и направление скольжения	Тензор Шмида
A_3	$(\bar{1}11) [101]$	$\mathbf{P}^1 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$
A_2	$(\bar{1}11) [01\bar{1}]$	$\mathbf{P}^2 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & -2 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{bmatrix}$
A_6	$(\bar{1}11) [\bar{1}\bar{1}0]$	$\mathbf{P}^3 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix}$
B_5	$(111) [1\bar{1}0]$	$\mathbf{P}^4 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$
B_2	$(111) [01\bar{1}]$	$\mathbf{P}^5 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -1 & -2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix}$
B_4	$(111) [\bar{1}01]$	$\mathbf{P}^6 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -2 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$
C_3	$(11\bar{1}) [101]$	$\mathbf{P}^7 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}$
C_1	$(11\bar{1}) [0\bar{1}\bar{1}]$	$\mathbf{P}^8 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & -2 \end{bmatrix}$
C_5	$(11\bar{1}) [\bar{1}10]$	$\mathbf{P}^9 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 0 & -2 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$
D_4	$(1\bar{1}1) [10\bar{1}]$	$\mathbf{P}^{10} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$
D_1	$(1\bar{1}1) [011]$	$\mathbf{P}^{11} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix}$
D_6	$(1\bar{1}1) [\bar{1}\bar{1}0]$	$\mathbf{P}^{12} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -2 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$



учесть ряд эффектов, не описываемых квадратичным критерием, и добиться повышения точности аппроксимаций.

Введенный критерий также можно применять для анализа процессов ползучести и оценки длительной прочности монокристаллических материалов на никелевой основе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шалин Р.Е., Светлов И.Л., Качанов Е.Б., Толораия В.Н., Гаврилин О.С. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов. М.: Машиностроение, 1997. 333 с.

2. Nouailhas D., Freed A.D. A viscoplastic theory for anisotropic materials // J. Eng. Mater. Technol. 1992. Vol. 114. No. 1, pp. 97-104.

3. Choi S.H., Krempl E. Viscoplasticity theory based on overstress applied to the modeling of cubic single crystals // European J. of Mechanics-A. Solids. 1989. Vol. 8. No. 2, pp. 219-233.

4. Магеррамова Л.А., Васильев Б.Е. Выбор модели анизотропии сплава для прочностных расчетов монокристаллических лопаток турбин газотурбинного двигателя с помощью современных программных комплексов // Современные методы обеспечения прочностной надежности деталей авиационных двигателей: Труды ЦИАМ. № 1344. М.: Торус пресс, 2010. С. 341-350.

5. Магеррамова Л.А., Васильев Б.Е. Влияние азимутальной ориентации в монокристаллических лопатках высокотемпературных газовых турбин на их напряженно-деформированное состояние и прочность // Вестник УГАТУ. 2011. Т. 15. № 4 (44). С. 54-58.

6. Гецов Л.Б., Михайлов В.Е., Семенов А.С., Кривоносова В.В., Ножницкий Ю.А., Блинник Б.С., Магеррамова Л.А. Расчетное определение ресурса рабочих и направляющих лопаток ГТУ. Ч. 2. Монокристаллические материалы // Газотурбинные технологии. 2011. № 8. С. 18-25.

7. Hill R. A theory of the yielding and plastic flow of anisotropic metals // Proc. R. Soc. Lond. A. 1948. Vol. 193. No. 1033, pp. 281-297.

8. Hill R. The mathematical theory of plasticity. Oxford: Oxford University Press, 1998. 368 p.

9. Barlat F., Lege D.J., Brem J.C. A six-component yield function for anisotropic materials // International Journal of Plasticity. 1991. Vol. 7. Iss. 7, pp. 693-712.

10. Desmorat R., Marull R. Non-quadratic Kelvin modes based plasticity criteria for anisotropic materials // International Journal of Plasticity. 2011. Vol. 27. Iss. 3, pp. 328-351.

11. Cailletaud G. A micromechanical approach

Приложение

В таблице на стр. 26 представлены основные характеристики октаэдрических систем скольжения, которые использовались в расчетах, относящихся к критерию Шмида.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, РФФИ (проект №12-08-00943).

to inelastic behaviour of metals // International Journal of Plasticity. 1992. Vol. 8. Iss. 1, pp. 55-73.

12. Бессон Ж., Каето Ж., Шабош Ж.Л., Форрест С. Нелинейная механика материалов; пер. с франц. А.С. Кравчука. Спб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010. 397 с.

13. Schmid E., Boas W. Kristallplastizitaet mit besonderer Beruecksichtigung der Metalle. Berlin: Julius Springer, 1935. 373 S.

14. Qin Q., Bassani J.L. Non-Schmid yield behavior in single crystals // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1992. Vol. 40. No. 4, pp. 813-833.

15. Каблов Е.Н., Петрушин Н.В., Светлов И.Л., Демонис И.М. Никелевые литейные жаропрочные сплавы нового поколения // Авиационные материалы и технологии. Научно-техн. сб. 2012. № 5. С. 36-51.

16. Булыгин И.П., Бунтушкин В.П., Базылева О.А. Литейный сплав на основе интерметаллида Ni₃Al для монокристаллических рабочих лопаток турбин ГТД // Авиационная промышленность. 1997. № 3-4. С. 61-65.

17. Segersäll M. Nickel-based single-crystal superalloys – the crystal orientation influence on high temperature properties. PhD Thesis. Linköping: Linköping University. 2013. 56 p.

18. Shah D.M., Duhl D.N. The effect of orientation, temperature and grain size on the yield strength of a single crystal nickel based superalloy // Superalloys'84. Proc. 5th International Symposium on Superalloys. M. Gell [et al.] (eds). The Metallurgical Society of AIME Publication. New York, 1984, pp. 105-114.

19. Hoinard G., Estevez R., Franciosi P. Hardening anisotropy of γ/γ' superalloy single crystals. 1. Experimental estimates at 650 °C from a homogeneous analysis // Acta Metall. Mater. 1995. Vol. 43. Iss. 4, pp. 1593-1607.

20. Lei C., Weidong W., Haitao C., Hongjian Z., Ying X. Yield anisotropy and tension/compression asymmetry of a Ni₃Al based intermetallic alloy // Chinese Journal of Aeronautics. 2013. Vol. 26. No. 3, pp. 801-806.

21. Семенов А.С. Вычислительные методы в

теории пластичности. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. 211 с.

22. Мельников Б.Е., Семенов А.С., Семенов С.Г. Многомодельный анализ упругопластиче-

ского деформирования материалов и конструкций. Современное состояние // Труды ЦНИИ им. акад. А. Н. Крылова. 2010. № 53. С. 85–92.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

СЕМЕНОВ Артем Семенович – кандидат физико-математических наук, доцент Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

Semenov.Artem@googlemail.com

Semenov A.S. THE IDENTIFICATION OF ANISOTROPY PARAMETERS OF PHENOMENOLOGICAL PLASTICITY CRITERION FOR SINGLE CRYSTALS WORKED OUT ON THE MICROMECHANICAL MODEL BASIS.

The analysis of the predictive ability of the Hill quadratic criterion of plasticity has been carried out for monocrystalline nickel based superalloys. The possibilities of determining the parameters of the quadratic criterion on uniaxial tensile tests for single-crystal samples of different crystallographic orientation were investigated. The experimental results and predictions of micromechanical model with the Schmid criterion were compared. In order to improve the prediction accuracy the phenomenological fourth degree criterion of plasticity was proposed, that allowed taking into account a number of effects that could not be described by a quadratic criterion.

PLASTICITY, SINGLE CRYSTAL, YIELD SURFACE, ANISOTROPY, PHENOMENOLOGICAL CRITERION, MICROMECHANICAL MODEL.

REFERENCES

1. **Shalin R.E., Svetlov I.L., Kachanov E.B. [et al].** *Monokristally nikelovykh zharoprochnykh splavov.* Moscow, Mashinostroenie, 1997, 333 p. (rus)
2. **Nouailhas D., Freed A.D.** A Viscoplastic Theory for Anisotropic Materials. *J. Eng. Mater. Technol.* 1992, No. 1 (114), pp. 97-104.
3. **Choi S.H., Krempl E.** Viscoplasticity theory based on overstress applied to the modeling of cubic single crystals. *European J. of Mechanism and Solid*, 1989, Vol. 8, pp. 219-233.
4. **Magerramova L.A., Vasil'ev B.E.** Vybor modeli anizotropii splava dlya prochnostnykh raschetov monokristallicheskiy lopatok turbin gazoturbinnogo dvigatelya s pomoshch'yu sovremennykh programmnykh kompleksov. *Sovremennye metody obespecheniya prochnostnoy nadezhnosti detaley aviatsionnykh dvigateley: Trudy TsIAM*, No. 1344. Moscow, TORUS PRESS, 2010, pp. 341-350. (rus)
5. **Magerramova L.A., Vasil'ev B.E.** Vliyaniye azimutal'noy orientatsii v monokristallicheskiy lopatkakh vysokotemperaturnykh gazovykh turbin na ikh napryazhenno-deformirovannoe sostoyaniye i prochnost'. *Vestnik UGATU*, 2011, Vol. 15, No.4 (44), pp. 54-58. (rus)
6. **Getsov L.B., Mikhaylov V.E., Semenov A.S., Krivonosova V.V., Nozhnitskiy Yu.A., Blinnik B.S., Magerramova L.A.** Raschetnoye opredeleniye resursa rabochikh i napravlyayushchikh lopatok GTU. *Chast' 2. Monokristallicheskie materialy. Gazoturbinnyye tekhnologii*, 2011, No. 8, pp. 18-25. (rus)
7. **Hill R.** A theory of the yielding and plastic flow of anisotropic metals. *Proc. R. Soc. London*, 1948, No. 193 (1033), pp. 281-297.
8. **Hill R.** *The mathematical theory of plasticity.* Clarendon Press, 1950, 355 p.
9. **Barlat F., Lege D.J., Brem J.C.** A six-component yield function for anisotropic materials. *Int. J. Plasticity*, 1991, Vol. 7, pp. 693-712.
10. **Desmorat R., Marull R.** Non-quadratic Kelvin modes based plasticity criteria for anisotropic materials. *International Journal of Plasticity*, 2011, Vol. 27, pp. 328-351.
11. **Cailletaud G.** A micromechanical Approach to Inelastic Behaviour of Metals. *International Journal of Plasticity*, 1991, Vol. 8, pp. 55-73.
12. **Besson Zh., Kaeto Zh., Shabosh Zh.L., Forest S.** *Nelineynaya mekhanika materialov (perevod s frantsuzskogo).* St. Petersburg, 2010, 398 p.
13. **Schmid E., Boas W.** *Kristallplastizitaet mit besonderer Beruecksichtigung der Metalle*, 1935, Springer. 373 p.
14. **Qin Q., Bassani J.L.** Non-Schmid yield behavior in single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1992, Vol. 40, No.4, pp. 813-833.
15. **Kablov E.N., Petrushin N.V., Svetlov I.L.,**



Demonis I.M. Nikelevye liteynye zharoprochnye splavy novogo pokoleniya. *Trudy VIAM*, 2012, pp. 36-52.

16. **Bulygin I.P., Buntushkin V.P., Bazyleva O.A.** Liteynyy splav na osnove intermetallida Ni₃Al dlya monokristallicheskikh rabochikh lopatok turbin GTD. *Aviatsionnaya promyshlennost'*, 1997, No.3-4, pp. 61-65. (rus)

17. **Segersäll M.** Nickel-based single-crystal superalloys – the crystal orientation influence on high temperature properties. PhD Thesis. Linköping University, 2013, 56 p.

18. **Shah D.M., Duhl D.N.** The effect of orientation, temperature and gamma prime size on the yield strength of a single crystal nickel base superalloy. Super alloys. *The Metallurgical Society of AIME*, 1984, pp. 105-114.

19. **Hoinard G., Estevez R., Franciosi P.** Hardening anisotropy of γ/γ' superalloy single crystals. 1. Experimental estimates at 650 °C from a homogeneous analysis. *Acta Metall. Mater.*, 1995, Vol. 43, pp. 1593-1607.

20. **Lei C., Weidong W., Haitao C., Hongjian Z., Ying X.** Yield anisotropy and tension/compression asymmetry of a Ni₃Al based intermetallic alloy. *Chinese Journal of Aeronautics*, 2013, Vol. 26(3), pp. 801-806.

21. **Semenov A.S.** Vychislitel'nye metody v teorii plastichnosti. Izd-vo SPbGPU, 2008, 211 p. (rus)

22. **Melnikov B.E., Semenov A.S., Semenov S.G.** Mnogomodelnii analiz uprugoplasticheskogo deformirovaniya materialov I konstrukcii. Sovremennoe sostoyanie. *Trudy CNII im. akad. A.N.Krylova*, 2010, № 53, pp. 85-92. (rus)

THE AUTHOR

SEMENOV Artem S.

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
Semenov.Artem@gmail.com

УДК 53.096

О.А. Алексеева¹, А.А. Набережнов^{1, 2}, Р. Поправский³

¹ Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

³ Институт физики Вроцлавского технологического университета

ОСОБЕННОСТИ ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ ЛЕГКОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ

Методом дифференциальной сканирующей калориметрии исследованы процессы плавления и кристаллизации легкоплавких металлов галлия и индия, введенных в пористые стекла со средним диаметром пор 2 и 7 нм. Определены соответствующие температуры T_{melt} и T_{cryst} и температурный гистерезис между этими процессами. Показано, что при уменьшении среднего диаметра пор величина гистерезиса увеличивается.

ПОРИСТОЕ СТЕКЛО, ПЛАВЛЕНИЕ, КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ, НАНОЧАСТИЦА МЕТАЛЛА, ТЕМПЕРАТУРНЫЙ ГИСТЕРЕЗИС, ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ СКАНИРУЮЩАЯ КАЛОРИМЕТРИЯ.

Введение

Физические свойства наночастиц металлов существенно отличаются от соответствующих свойств макроскопических образцов, особенно, когда физические размеры наночастиц становятся сравнимыми с длинами атомных, магнитных и других характерных взаимодействий, а число атомов на поверхности наночастицы составляет заметную долю от общего количества атомов. Указанное соотношение приводит к изменению таких свойств вещества, как теплоемкость, кристаллическая и электронная структура, диффузионная подвижность, химическая активность и др. Показано (см., например, работы [1, 2]), что для наночастиц свинца и олова с характерным размером 10 – 15 нм, полученных при введении в пористые стекла, наблюдается изменение плотности фононных состояний в низко- и высокочастотных частях спектра колебательных состояний, а для наночастиц олова – (кроме того) подавление оптических колебаний в поверхностном и интерфейсном слоях. Для этих же нанокompозитных материалов (НКМ) обнаружено существование двух переходов в сверхпроводящее состояние и появление двух значений индукции критического магнитного поля, связанных с переходами в это состояние внутренних об-

ластей и поверхностных слоев наночастиц, а также резкое (в 40 – 90 раз) увеличение критических полей [3, 4], по сравнению с массивными металлами. Таким образом, было показано, что эти металлы в условиях ограниченной геометрии становятся сверхпроводниками второго рода.

В работах [5, 6] для наночастиц индия обнаружено существование кубической фазы, индуцированной размерным эффектом и не наблюдающейся ни в массивном металле, ни в наночастицах, приготовленных методом химического синтеза в пористых матрицах. Что касается наночастиц галлия, известного своим полиморфизмом, то в работах [7, 8] для них были обнаружены стабилизация в условиях ограниченной геометрии метастабильной дельта-фазы галлия, а также существование совершенно новых низкотемпературных кристаллических фаз для наночастиц (*I*-фаза для частиц размером 7 нм и *K*-фаза для 3,5 нм). В то же время эксперименты по изучению фазового перехода плавление – кристаллизация для данных металлов в пористом стекле, в том числе и методом дифференциальной сканирующей микроскопии, многочисленны. Опубликована работа [9], в которой проведены ультразвуковые исследования индия, внедренного в опал; авторами обнаружены снижение температуры

фазового перехода (ФП), а также наличие температурного гистерезиса между процессами плавление-кристаллизация.

Экспериментальные методы и объекты исследования

В данной работе исследовались физические свойства галлия, внедренного в пористое стекло со средним диаметром пор 7 нм, и индия, введенного в такие же матрицы со средними диаметрами пор 2 и 7 нм. Использован метод дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК).

Пористые стекла получены в результате вытравливания химически нестойкой фазы (ХНФ), образующейся в результате термической обработки («закаливания») исходных щелочно-боросиликатных стекол. Эта процедура приводит к образованию двухкаркасной структуры, состоящей из кремнеземного, химически стойкого каркаса, а также из ХНФ, образующей трехмерную случайную систему сквозных каналов, заполненных самой ХНФ. Средний диаметр пор стекла был определен методом ртутной порометрии. Металлы вводились из расплава в тонкие пластины пористого стекла под давлением около 6 кбар. После охлаждения расплава образцы из него извлекались, и их поверхности тщательно очищались от остатков массивного материала.

Исследования теплового потока проводились на дифференциальном сканирующем калориметре производства компании Mettler Toledo в Институте физики Вроцлавского технологического университета (Вроцлав, Польша). Калориметр имеет две измерительные ячейки: одна предназначена для исследуемого образца, в другую (ячейку сравнения) помещается пустой тигель или термически стабильный материал, не имеющий фазовых переходов, с температурой плавления, намного превышающей интервал температур, в котором проводятся исследования. В процессе измерений фиксируется разность тепловых потоков между ячейкой с образцом и ячейкой сравнения. Измерения проводились с использованием температурной программы линейного нагрева/охлаждения с заданной скоростью.

Скорость изменения температуры варьировалась от 2 до 10 К/мин.

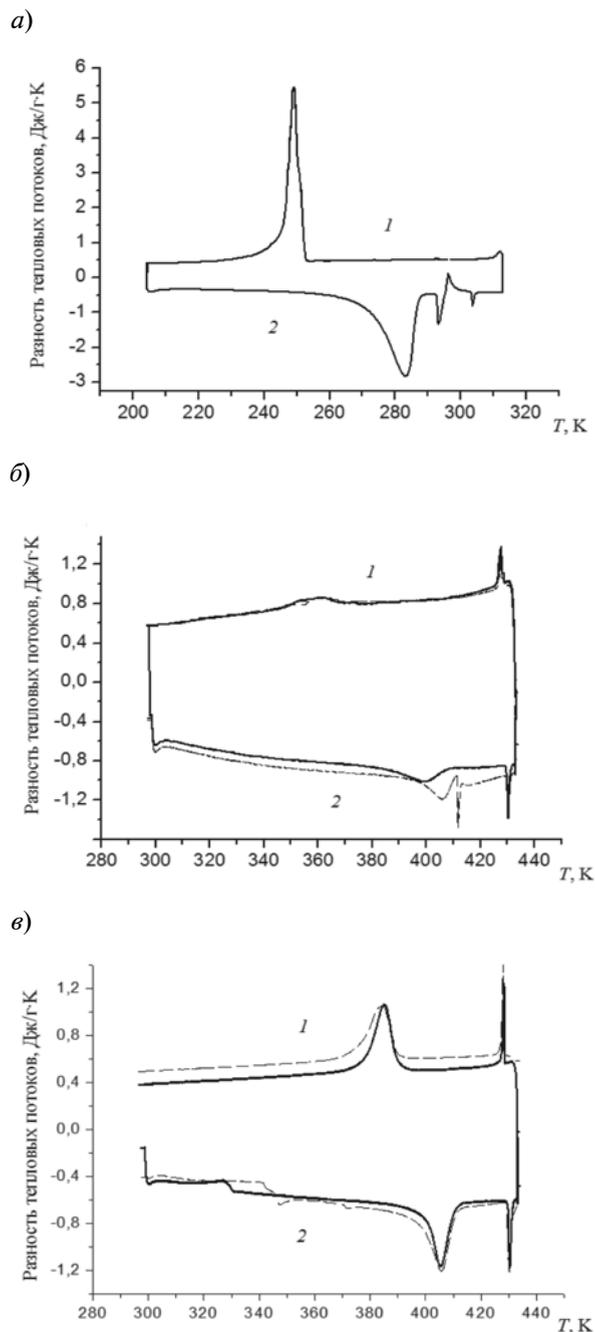


Рис. 1. Кривые дифференциальной сканирующей калориметрии галлия (а) и индия (б, в), внедренных в пористые стекла со средним диаметром пор 7 нм (а, в) и 2 нм (б). Кривые 1, 2 относятся к процессам охлаждения и нагревания, соответственно. Пунктирные линии на рис. б, в – результаты I измерения, сплошные – II измерения

Результаты и их обсуждение

Полученные кривые ДСК для галлия и индия в стекле со средним диаметром пор 7 и 2 нм приведены на рис. 1.

На всех зависимостях обнаружено присутствие пиков, соответствующих плавлению и кристаллизации массивных металлов ввиду присутствия микроскопических частиц этих металлов либо на поверхности, либо в трещинах пористых стекол. Эти пики играют положительную роль в наших измерениях, так как служат реперами и позволяют уточнять отсчеты по температурной шкале. Кроме того, во всех образцах наблюдаются один или несколько (например, для галлия) пиков при более низких температурах; пики соответствуют ФП нанокристаллических частиц в порах стекла.

Характерными особенностями данных пиков являются их большая ширина, по сравнению с таковыми для массивного аналога, и заметная асимметричность. Нами были определены значения температур ФП (см. таблицу), которым соответствуют максимумы пиков.

Как известно (см., например, работу [10]), разность ΔT между температурами плавления макроскопического вещества и его частицы обратно пропорциональна ее радиусу r :

$$\Delta T_{\infty} \frac{T_m}{Lr} \left[Y_{lv} \left[\frac{P_s}{P_l} \right]^{2/3} - Y_{sv} \right],$$

где T_m – температура плавления массивного образца; L – удельная теплота плавления; P_l, P_s – плотности жидкой и кристаллической фаз; Y_{lv}, Y_{sv} – удельные поверхностные энергии на границах пар – жидкость и твердое тело – пар, соответственно.

Более точные модели рассматривают процесс плавления частицы как образование жидкого слоя на поверхности образца и постепенное утолщение этого слоя (модель «жидкой шубы»). Согласно критерию Линдемманна, плавление начинается, когда отношение амплитуды колебаний атомов решетки к среднему расстоянию между ними достигает определенной величины, примерно 10 – 15 %. Поверхностные атомы менее связаны, поэтому плавление начинается с поверхности.

Все вышеизложенное относится к плавлению свободной частицы; в случае же нанокompозита возможно также влияние взаимодействия поверхностных атомов частицы с атомами стенок матрицы.

Следует отметить, что средний размер наночастиц металла и средний диаметр пор стекла, определенный из данных ртутной порометрии, не совпадают. Это связано со

Таблица

Результаты измерений физических свойств наночастиц легкоплавких металлов, внедренных в стеклянные пористые матрицы (метод ДСК)

Образец		Номер измерения	Температура T , К			Гистерезис ΔT , К
Металл	Размер пор, нм		плавления массива	плавления наночастиц	кристаллизации наночастиц	
Ga	7	I	302,7	284,90±0,30	248,2±0,9	35,1
				293,00±1,00		44,2
In	7	I	430,0	407,93±0,05	384,24±0,04	23,7
		II		405,21±0,01		386,3±0,1
	2	I	430,0	405,94±0,03	357,02±0,07	48,9
				411,96±0,05		54,9
	II		399,00±0,05		42,0	

Примечание. Приведены значения температурного гистерезиса ΔT между процессами плавления и кристаллизации наночастиц, определенные из положения экстремумов на соответствующих кривых.

сложной дендритной формой наночастицы в каналах стекла, когда она формируется в нескольких соседних порах. Дифракционные исследования в работе [6] позволили оценить средние дифракционные размеры частиц свинца и индия в стекле со средним размером пор 7 нм; они оказались примерно вдвое большими, по сравнению со средним диаметром пор, а именно 11 – 15 нм.

На кривой нагревания галлия (см. кривую 2 на рис. 1, а) также обнаружены два пика, соответствующие плавлению наночастиц, но только один пик соответствует кристаллизации. Можно предположить, что данные пики относятся к плавлению фаз галлия различной кристаллической модификации, возможно, образующихся как последовательно, так и одновременно. Стоит отметить, что объемный галлий склонен к полиморфизму. При атмосферном давлении устойчива *A*-модификация галлия, имеющая температуру плавления 303 К. Остальные модификации неустойчивы и могут формироваться, например, при переохлаждении жидкого галлия или при повышенном давлении. Рентгеновские исследования галлия в пористом стекле [7, 8] выявили стабилизацию некоторых метастабильных (при нормальных условиях) фаз галлия в нанокompозите (например, дельта-фазы), а также существование нескольких низкотемпературных кристаллических фаз в наночастицах, которые не наблюдаются у массивного галлия ни при каких условиях. При этом кристаллизация наночастиц галлия в ту или иную модификацию зависит от размера пор стекла.

На кривой охлаждения галлия (кривая 1 на рис. 1, а) отсутствует пик, соответствующий кристаллизации массивного металла. Скорее всего, это связано с тем, что после цикла плавления происходит перераспределение галлия в образце; причем незначительное количество жидкого галлия, образовавшегося на поверхности при плавлении, уходит внутрь образца в поры благодаря хорошей смачиваемости.

На кривой нагревания индия в стекле с порами 2 нм (см. пунктирную кривую 2 на рис. 1, б) при увеличении температуры первый пик соответствует плавлению наноча-

стиц в объеме образца, при этом часть металла выходит в поверхностные слои и там кристаллизуется в порах несколько большего среднего диаметра. При дальнейшем нагреве происходит плавление этих частиц с несколько большим средним размером.

Поры большего диаметра возникают в поверхностных слоях в процессе травления исходных боросиликатных стекол, который начинается именно с поверхности и приводит к образованию сквозной системы каналов. Каналы ХНФ в поверхностных слоях вытравливаются несколько больше; при этом чем меньше диаметр каналов, получаемых в глубине матрицы, тем больше разность диаметров между каналами на поверхности и в глубине образца.

Выход металла из глубины образца в поверхностные поры может происходить за счет теплового расширения наноструктурированного металла. Как показывают исследования [11–13], вещества в наноструктурированном состоянии могут иметь более высокий коэффициент температурного расширения (КТР), по сравнению с массивными аналогами. Например, КТР изолированных частиц свинца размером 16 нм увеличивается до $3,8 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, тогда как это значение для объемного материала составляет $2,9 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ [11]; КТР частиц серебра размером 3,2 нм, внедренных в стеклянную пористую матрицу, увеличивается на 70 %, по сравнению с массивным веществом [12], а для частиц размером 1,3 нм – в 6,5 раз [13].

При втором измерении (см. сплошную кривую 2 на рис. 1, б) на кривой нагрева, во-первых, наблюдается единственный пик плавления, во-вторых, он сдвинут в сторону меньших температур. Эти особенности можно объяснить тем, что после первого нагревания жидкий индий за счет капиллярного эффекта проникает в глубь образца, где размер пор в среднем меньше. Акустические исследования наночастиц индия, внедренного в искусственный опал, показали, что при уменьшении фактора заполнения пор при плавлении индия происходит перетекание металла в поры с меньшим размером, что объясняется частичным смачиванием стенок силикатной матрицы [9].

Следует отметить, что все вышеперечисленные особенности плавления не наблюдаются для индия в стекле со средним диаметром пор 7 нм (см. рис. 1, в). Можно предположить, что для стекол с большим размером пор существует меньший разброс среднего диаметра пор в поверхностных слоях и в глубине образца, поэтому эффект «перераспределения» индия незначителен и не наблюдается в данном эксперименте.

Для всех образцов наблюдается значительный температурный гистерезис (см. таблицу) между температурами плавления и кристаллизации наночастиц металлов. Гистерезис между плавлением и кристаллизацией массивной фазы гораздо меньше (примерно 2 К для индия в стеклах двух видов). Кроме того, величина гистерезиса для частиц индия в стекле с порами 2 нм (примерно 50 К) больше, чем для индия в стекле с порами 7 нм (примерно 20 К).

Температурный гистерезис между кристаллизацией и плавлением наблюдался во многих экспериментах с расплавами в пористых матрицах. Его интерпретация на настоящий момент противоречива. Часто его связывают с переохлаждением расплава в порах, однако этому объяснению противоречит факт воспроизводимости температур кристаллизации (затвердевания). Противоречие снимается, если принять во внимание возможность гетерогенной кристаллизации [14], которая, как известно, приводит к вос-

производимому замерзанию жидкостей при температурах ниже температур плавления. Центрами гетерогенной кристаллизации могут служить, например, неоднородности внутренней поверхности пористой матрицы или кристаллиты других модификаций, как в случае с галлием.

Заключение

В данной работе было проведено исследование процессов плавления и кристаллизации наночастиц галлия и индия в пористых стеклах со средним диаметром пор 7 нм (для индия также в стекле с диаметром пор 2 нм) с помощью метода дифференциальной сканирующей калориметрии.

Получены значения температур фазовых переходов плавление – кристаллизация для данных металлов в наноструктурированном состоянии, определены величины температурного гистерезиса ΔT . Показано, что величина ΔT для индия возрастает с уменьшением размера частиц.

Установлено, что существуют особенности процессов плавления-кристаллизации для галлия в стекле с порами 7 нм и индия в стекле с порами 2 нм, связанные, возможно, с перекристаллизацией металлов в поверхностных слоях пористого стекла.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ и РФФИ (грант 12-02-00230), ОФИ_м 13-02-12429.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Паршин П.П., Землянов М.Г., Панова Г.Х. Особенности атомной динамики свинца, внедренного в нанометровые поры стекла // ЖЭТФ. 2010. Т. 138. С. 1127–1134.
2. Паршин П.П., Землянов М.Г., Панова Г.Х. Атомная динамика нанометровых частиц олова, внедренного в пористое стекло // ЖЭТФ. 2012. Т. 141. № 3. С. 502–514.
3. Панова Г.Х., Набережнов А.А., Фокин А.В. Поверхностная и объемная сверхпроводимость Pb, внедренного в нанометровые поры // ФТТ. 2008. Т. 50. № 2. С. 1317–1320.
4. Шиков А.А., Паршин П.П., Набережнов А.А., Кумзеров Ю.А. Теплоемкость наноструктурированного сверхпроводящего олова в магнитных полях // ФТТ. 2013. Т. 55. № 7. С. 1272–1276.
5. Balamurugan B., Kruis F., Shivaprasad S., Dmitrieva O., Zähres H. Size-induced stability and structural transition in monodispersed indium nanoparticles // Applied Physics Letters. 2005. Vol. 86, P. 083102.
6. Набережнов А.А., Совестнов А.Е., Фокин А.В. Особенности кристаллической структуры индия и свинца в условиях ограниченной геометрии // ЖТФ. 2011. Т. 81. № 5. С. 49–54.
7. Lee Min Kai, Tien C., Charnaya E.V., Hwo-Shuenn Sheu, Kumzerov Yu.A. Structural variations in nanosized confined gallium // Physics Letters. A. 2010. Vol. 374, pp. 1570-1573
8. Sorina I.G., Charnaya E.V., Smirnov L.A., Tien C. Structural features of gallium in microporous glass // Phys. of the Sol. St. 1998. Vol. 40, pp. 1407-1408.



9. **Borisov F., Gartvik A.V., Charnaya E.V., Kumzerov Yu.A.** The effect of melting and crystallization of indium within pores on properties of photonic crystals at different pore fillings // *Acoustical Physics*. 2009. Vol. 55, pp. 816-820.

10. **Buffat P., Borel J.-P.** Size effect on the melting temperature of gold particles // *Phys. Rev. A*. 1976. Vol. 13, pp. 2287-2298.

11. **Lee J.G., Mori H.** Solid solubility in isolated nanometer-sized alloy particles in the Sn-Pb system // *Eur. Phys. J. D*. 2005. Vol. 34, pp. 227-230.

12. **Dubiel M., Brunsch S., Truger L.** Tempera-

ture dependence of thermal expansion coefficient of silver nanoparticles and of bulk material determined by EXAFS // *J. Synchrotron Rad.* 2001. Vol. 8, pp. 539-541

13. **Yokoyama T., Kimoto S., Ohta T.** Temperature-dependent EXAFS study on supported silver and palladium clusters // *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1989, Vol. 28. No. 5. pp. 851-853.

14. **Charnaya E.V., Tien C., Lin K.J.** X-ray studies of the melting and freezing phase transitions for gallium in a porous glass // *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 58. No. 17. P. 11089.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АЛЕКСЕЕВА Ольга Александровна – студентка Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
blackhole2010@yandex.ru

НАБЕРЕЖНОВ Александр Алексеевич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
alex.naberezhnov@mail.ioffe.ru

ПОПРАВСКИЙ Ришард – профессор Института физики Вроцлавского технологического университета.

50–370, Польша, г. Вроцлав, Wybrzeże Stanisława Wyspiańskiego 27
ryszard.poprawski@pwr.wroc.pl

Alekseeva O.A., Naberezhnov A.A., Popravsky R. PECULARITIES OF MELTING AND CRYSTALLIZATION OF LOW-MELTING METAL NANOPARTICLES.

The melting and crystallization processes of low-melting metals (gallium and indium) embedded into porous glasses with average pores diameters of 2 and 7 nm have been studied by differential scanning calorimetry. The applicable T_m and T_{cr} temperatures and a thermal hysteresis between these processes were determined. The hysteresis values were found to increase with reducing the average pore diameter.

POROUS GLASS, MELTING, CRYSTALLIZATION, METAL NANOPARTICLE, THERMAL HYSTERESIS, DIFFERENTIAL SCANNING CALORIMETRY.

REFERENCES

1. **Parshin P.P., Zemlyanov M.G., Panova G.Kh.** Osobennosti atomnoy dinamiki svintsya, vnedrennogo v nanometrovyye pory stekla. *ZhETF*, 2010, Vol. 138, pp. 1127-1134. (rus)

2. **Parshin P.P., Zemlyanov M.G., Panova G.Kh.** Atomnaya dinamika nanometrovykh chastits olova, vnedrennogo v poristoye steklo. *ZhETF*, 2012, Vol. 141, No.3, pp. 502-514. (rus)

3. **Panova G.Kh., Naberezhnov A.A., Fokin A.V.** Poverkhnostnaya i obyemnaya sverkhprovodimost Pb, vnedrennogo v nanometrovyye pory. *FTT*, 2008, Vol. 50, No. 2, pp. 1317-1320. (rus)

4. **Shikov A.A., Parshin P.P., Naberezhnov A.A., Kumzerov Yu.A.** Teployemkost nanostruk-

turovannogo sverkhprovodyashchego olova v magnitnykh polyakh. *FTT*, 2013, Vol. 55, No. 7, pp. 1272-1276. (rus)

5. **Balamurugan B., Kruis F., Shivaprasad S., Dmitrieva O., Záhres H.** Size-induced stability and structural transition in monodispersed indium nanoparticles. *Applied Physics Letters*, 2005, Vol. 86, P. 083102. (rus)

6. **Naberezhnov A.A., Sovestnov A.Ye., Fokin A.V.** Osobennosti kristallicheskoy struktury indiya i svintsya v usloviyakh ogranichennoy geometrii. *ZhTF*, 2011, Vol. 81, No. 5, pp. 49-54. (rus)

7. **Lee Min Kai, Tien C., Charnaya E.V., Hwo-Shuenn Sheu, Kumzerov Yu.A.** Structural variations

in nanosized confined gallium. *Physics Letters. A*, 2010, Vol. 374, pp. 1570-1573.

8. Sorina I.G., Charnaya E.V., Smirnov L.A., Tien C. Structural features of gallium in microporous glass. *Phys. of the Sol. St.*, 1998, Vol. 40, pp. 1407-1408.

9. Borisov F., Gartvik A.V., Charnaya E.V., Kumzerov Yu.A. The effect of melting and crystallization of indium within pores on properties of photonic crystals at different pore fillings. *Acoustical Physics*, 2009, Vol. 55, pp. 816-820.

10. Buffat P., Borel J.P. Size effect on the melting temperature of gold particles. *Phys. Rev. A*, 1976, Vol. 13, pp. 2287-2298.

11. Lee J.G., Mori H. Solid solubility in isolated

nanometer-sized alloy particles in the Sn-Pb system. *Eur. Phys. J. D*, 2005, Vol. 34, pp. 227-230.

12. Dubiel M., Brunsch S., Truger L. Temperature dependence of thermal expansion coefficient of silver nanoparticles and of bulk material determined by EXAFS. *J. Synchrotron Rad.*, 2001, Vol. 8, pp. 539-541.

13. Yokoyama T., Kimoto S., Ohta T. Temperature-dependent EXAFS study on supported silver and palladium clusters. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1989, Vol. 28, No. 5, pp. 851-853.

14. Charnaya E.V., Tien C., Lin K.J. X-ray studies of the melting and freezing phase transitions for gallium in a porous glass. *Phys. Rev. B*, 1998, Vol. 58, No. 17, P. 11089.

THE AUTHORS

ALEKSEEVA Olga A.

St. Petersburg State Polytechnical University
29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
blackhole2010@yandex.ru

NABEREZHNOV Alexander A.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

POPRAWSKY Ryszard.

Institute of Physics, Technical University of Wrocław
27, Wybrzeże Stanisława Wyspiańskiego, Wrocław, 50-370, Poland
ryszard.poprawski@pwr.wroc.pl



УДК 548.4

А.В. Бакаев, Е.Е. Журкин

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

ХАРАКТЕРИСТИКИ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В АУСТЕНИТНЫХ СПЛАВАХ

Произведен численный расчет энергии образования различных типов протяженных радиационных дефектов при нулевой температуре (0 К) в аустенитном модельном сплаве $Fe_{0,7}Ni_{0,1}Cr_{0,2}$ в рамках метода классической молекулярной динамики. Для изучения термической стабильности рассматриваемых дефектов было проведено моделирование отжига при различных ненулевых температурах.

РАДИАЦИОННЫЙ ДЕФЕКТ, ОТЖИГ, АУСТЕНИТНЫЙ СПЛАВ, МОДЕЛИРОВАНИЕ, МЕТОД КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.

Введение

В настоящее время аустенитные стали применяются в качестве конструкционных материалов для ряда компонентов активной зоны ядерных реакторов. Для обеспечения безопасной работы реактора к таким материалам предъявляются повышенные требования по запасу прочности, коррозионной и радиационной стойкости.

Воздействие интенсивного потока нейтронов вызывает (в числе прочих эффектов) охрупчивание материала, которое является результатом образования, накопления и роста протяженных радиационных дефектов (в частности таких, как дислокационные петли, поры, радиационно-индуцированные выделения вторых фаз) [1, 2]. Как было установлено в целом ряде экспериментальных работ (см., например, статьи [3–6]), при нейтронном облучении сталей аустенитного класса преобладающим типом радиационных дефектов являются дислокационные петли Франка межузельного типа (в случае, когда нейтронная повреждающая доза, выражаемая в смещениях на атом (с.н.а.), составляет примерно 10^{-3} – 10 с.н.а.). Исследование механизмов образования как дислокационных петель, так и других характерных типов радиационных дефектов, например тетраэдров дефектов упаковки (ТДУ) и пор в материале, является важной задачей радиационной физики и реакторного материаловедения. Подобные радиационные дефекты имеют линейные разме-

ры порядка нескольких нанометров [3–5], и их экспериментальное изучение необходимо проводить в условиях внешней нагрузки при различных температурах. Экспериментальное исследование влияния нейтронного облучения и последующий анализ образцов представляет собой крайне сложный и дорогостоящий процесс, поэтому существует необходимость в альтернативных способах исследования. В настоящее время атомистическое численное моделирование рассматривается как перспективный способ получения дополнительной информации о механизмах влияния радиационного облучения на свойства материалов [2].

Как известно, свободная энергия различных типов дефектов зависит от их размера и от окружающей температуры. В связи с этим для предсказания морфологии дефектов, которые формируются при нейтронном облучении аустенитных сплавов, необходимо знать зависимость энергии образования от размера дефекта. Вероятность образования дефекта с наименьшей энергией должна быть максимальной. В результате роста дефектов по мере воздействия излучения, с увеличением их размера, энергии образования дефектов могут изменяться, что может привести к изменению соотношений между величинами энергий образования дефектов различного типа. В этом случае дефект может трансформироваться из одного типа в другой. Например, петля Франка, достигая определенного критического размера, превращается в полную петлю [7]. Энергия

образования дислокационных дефектов определяется энергией дефекта упаковки (ЭДУ), модулем сдвига и коэффициентом Пуассона [7, 8].

Энергетические параметры радиационных дефектов уже были изучены в чистых материалах (например, в меди) с гранецентрированной кубической (ГЦК) кристаллической решеткой [9, 10]. Однако для аустенитных сплавов железа (они также имеют ГЦК-решетку), характерны низкие значения величины энергии дефекта упаковки (около 20 мДж/м²) и относительно высокие значения модуля упругости (80 ГПа), что не реализуется ни в одном из чистых металлов, имеющих ГЦК-решетку. Поскольку до недавнего времени не было разработано подходящей модели межатомного потенциала взаимодействия, который позволил бы корректно воспроизвести вышеуказанное соотношение между ЭДУ и модулем упругости для аустенитных сплавов, атомистическое моделирование свойств дефектов в таких сплавах до сих пор не проводилось.

Основными легирующими компонентами аустенитной стали являются никель и хром, вариация концентраций которых приводит к изменению энергии дефекта упаковки (ЭДУ). Поэтому сплав Fe_{0,7}Ni_{0,1}Cr_{0,2} часто используется как модельный для изучения свойств аустенитных сталей 304L и 316L (их российские аналоги – марки 03X18H11 и 03X16H15M3, соответственно), применяемых в качестве конструкционных материалов реакторов.

Целью данной работы является численная оценка энергии образования различных типов радиационных дефектов в модельном аустенитном сплаве Fe_{0,7}Ni_{0,1}Cr_{0,2} (он имеет ГЦК-решетку) при нулевой температуре ($T = 0$ К) с помощью атомистического моделирования (в рамках метода классической молекулярной динамики), а также верификация полученных результатов путем сравнения с оценками, выполненными с помощью известных теоретических выражений. Для изучения термической стабильности рассматриваемых дефектов проведено моделирование отжига при различных ненулевых температурах. Подтверждение (в рамках рассматриваемого атомистиче-

ского подхода) энергетической стабильности вышеуказанных дефектов при конечной температуре позволит впоследствии провести моделирование взаимодействия подвижных дислокаций с радиационными дефектами на атомарном уровне, охарактеризовать механизмы такого взаимодействия и вычислить значения критического напряжения сдвига, необходимого для преодоления дислокацией дефекта-препятствия. Эти параметры, в свою очередь, могут быть в дальнейшем использованы в методе дискретной дислокационной динамики, позволяющем рассматривать движение дислокаций в поле случайно распределенных дефектов на масштабах порядка микрометров, что позволит перейти к количественному прогнозу изменения механических свойств аустенитных сталей и сплавов под воздействием нейтронного облучения.

Методика исследования

В качестве метода исследования использовалось компьютерное моделирование в рамках метода классической молекулярной динамики (МД), который позволяет отслеживать индивидуальные траектории каждой из частиц изучаемой системы путем интегрирования уравнений движения Ньютона. Математические основы метода МД детально описаны в целом ряде монографий (см., например, книгу [11]). Для проведения вычислений использовался стандартный алгоритм молекулярной динамики, при этом использована версия, ранее разработанная авторами работы [12]. При анализе мгновенных конфигураций атомов с целью эффективного поиска ближайших соседей каждого атома в модельном кристалле использовалась численная процедура так называемого метода «связанных ячеек» [11].

Для вычисления сил взаимодействия между атомами использовался недавно созданный потенциал [13], который базируется на широко известной модели погруженного атома, но при этом оптимизирован с целью корректного воспроизведения механических свойств аустенитных сплавов Fe-Ni-Cr при различном содержании легирующих элементов. Данный потенциал позволяет с хорошей точностью воспроизвести значе-

ния энергии когезии, констант решетки, констант упругости C_{11} , C_{12} , C_{44} , энергии образования и миграции вакансий, энергии образования различных межузельных конфигураций (гантелей $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$), а также межузлий в октаэдрических и тетраэдрических позициях), ЭДУ как для чистых материалов (железо, никель, хром), так и для сплава $\text{Fe}_{0,7}\text{Ni}_{0,1}\text{Cr}_{0,2}$. При этом достигается хорошее согласие с опубликованными ранее экспериментальными данными,

а также с результатами, полученными с помощью метода *ab initio* (детали сравнений приведены в статье [13]).

Молекулярно-динамические расчеты выполнялись при $T = 0$ К для дефектов различного типа, характеристики которых приведены в таблице. Выбранный модельный кристалл соответствует параллелепипеду с размерами $42,4a_0 \times 44,1a_0 \times 53,7a_0$ (a_0 – постоянная решетки, равная $3,51595 \text{ \AA}$) и содержит порядка 400 тыс. атомов.

Таблица

Типы радиационных дефектов и их характеристики, рассмотренные в рамках метода молекулярной динамики (МД)

Номер	Тип дефекта	Размер, нм	Число атомов в дефекте
1	Пора	0,7	17
		2,1	444
		3,5	2109
2	Тетраэдр дефектов упаковки (ТДУ)	1,5	15
		3,0	54
		5,2	153
		7,0	276
		8,8	435
10,7	630		
3	Круглая полная петля, $\mathbf{b} = (1/2) \langle 110 \rangle$	1,4	36
		4,2	316
		7,0	887
		9,8	1742
4	Круглая петля Франка, $\mathbf{b} = (1/3) \langle 111 \rangle$	1,4	31
		4,2	253
		7,0	733
		9,8	1417
5	Гексагональная петля Франка; стороны вдоль направлений типа $\langle 110 \rangle$, $\mathbf{b} = (1/3) \langle 111 \rangle$	1,0	19
		3,0	127
		5,0	331
		7,0	631
		9,0	1027
6	Гексагональная петля Франка; стороны вдоль направлений типа $\langle 112 \rangle$, $\mathbf{b} = (1/3) \langle 111 \rangle$	1,7	43
		5,2	343
		8,6	931
		12,1	1807

Примечания. 1. Размер дефекта определялся как диаметр для поры, петли и как радиус описанной сферы для тетраэдра дефектов упаковки (ТДУ).

2. Все дислокационные петли рассматривались в двух конфигурациях: межузельной и вакансионной. Обозначение: \mathbf{b} – вектор Бюргера.

Все дислокационные петли рассматривались в двух конфигурациях: межузельной и вакансионной. Обе конфигурации создавались путем удаления либо внедрения атомных плоскостей в форме диска, с учетом соответствующей ориентации вектора Бюргера \mathbf{b} и контуров граней экстраплоскости вдоль линии дислокации (см. таблицу).

Затем конфигурации, обладающие минимальной потенциальной энергией, использовались в качестве начальных конфигураций для молекулярно-динамических расчетов при ненулевой температуре, в которых исследовалась стабильность дефектов при температурах T , варьируемых в пределах 300 – 1200 К. Температура инициализировалась путем раздачи скоростей каждому из атомов, согласно следующей процедуре: вначале всем атомам системы раздаются импульсы согласно распределению Максвелла, соответствующему температуре $2T$ (T – тре-

буемая температура). Далее рассчитывался полный импульс системы, после чего производился одновременный пересчет всех скоростей таким образом, чтобы обнулить полный импульс системы. Мы использовали следующую процедуру для установления динамического равновесия: на протяжении 10 тыс. шагов происходит интегрирование уравнений движения, при этом через каждые 100 шагов импульсы всех атомов перенормируются таким образом, чтобы полная кинетическая энергия системы соответствовала требуемой температуре.

Результаты и их обсуждение

Зависимости энергии образования протяженных дефектов от числа содержащихся в них точечных дефектов (вакансий/межузлий) и от линейного размера протяженного дефекта представлены на рис. 1. Установлено, что в диапазоне рассмотрен-

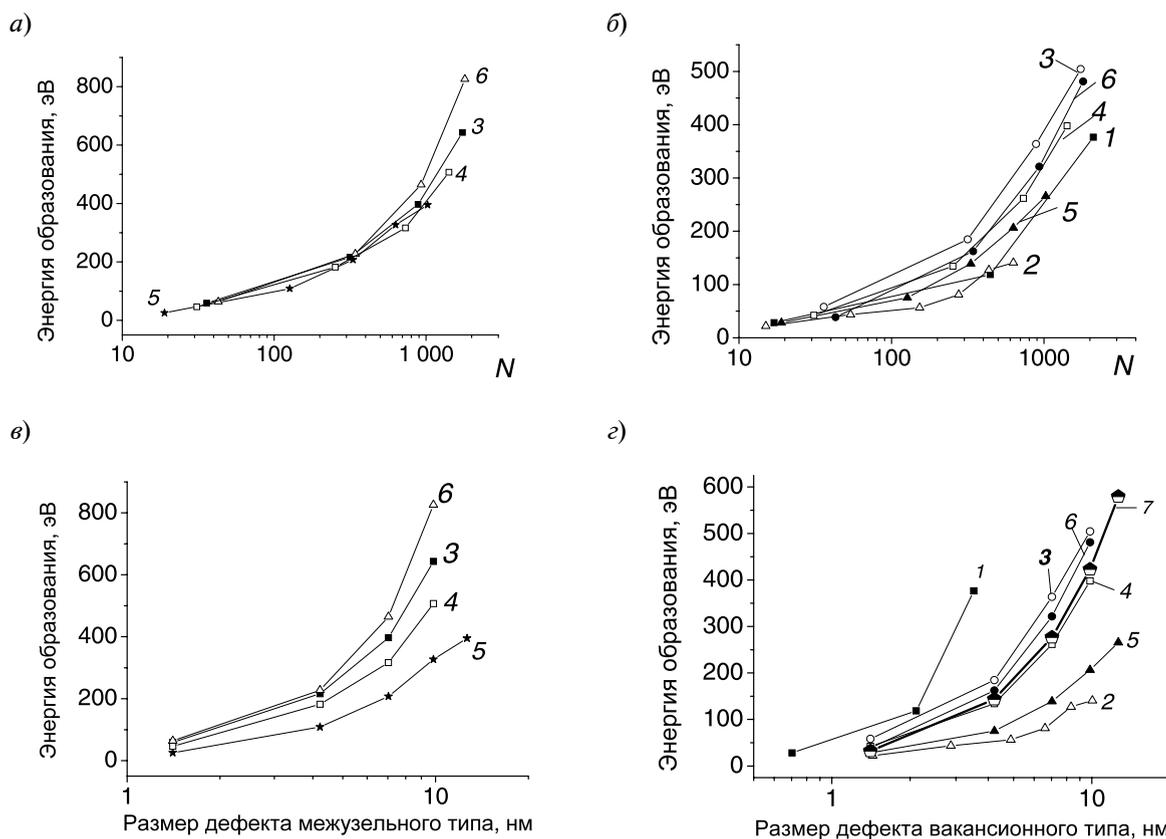


Рис. 1. Зависимости энергии образования межузельных (а, в) и вакансионных (б, г) дефектов от числа N межузлий (а), вакансий (б) и диаметров дефектов двух типов (в, г).

Номера кривых 1–6 соответствуют приведенным в таблице; 7 – результаты расчета по аналитическому выражению согласно [14] для гексагональной петли Франка

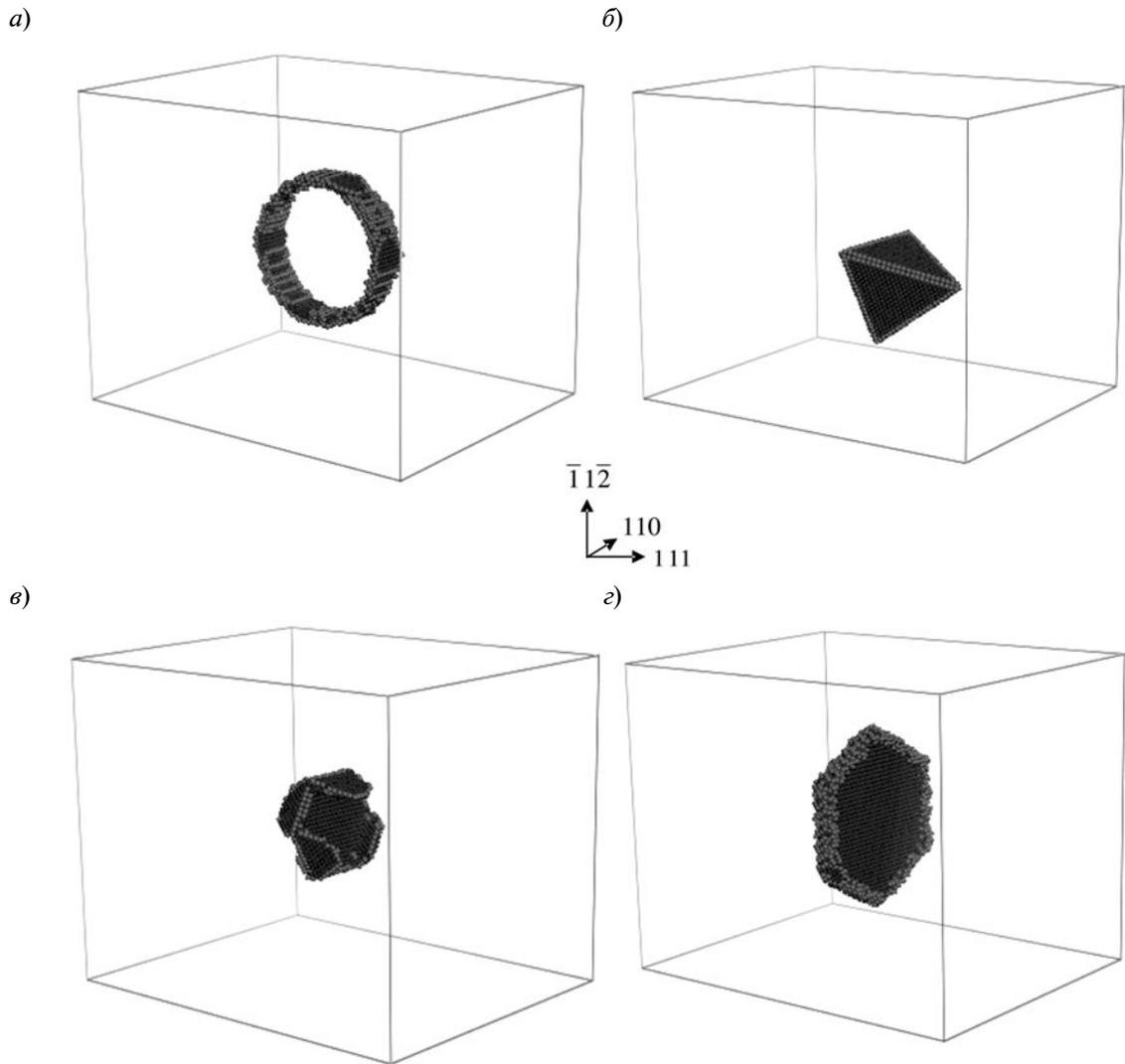
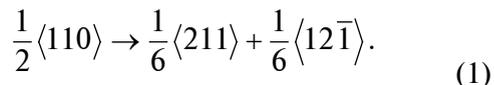


Рис. 2. Атомные конфигурации рассмотренных типов дефектов различного диаметра d :
 а – межузельная полная петля; б – тетраэдр дефектов упаковки; в – вакансионная гексагональная петля Франка со сторонами вдоль направлений типа $\langle 110 \rangle$; з – межузельная гексагональная петля Франка со сторонами вдоль направлений типа $\langle 112 \rangle$.
 Ориентация кристалла во всех случаях соответствует указанной системе координат.
 Значения d , нм: 9,8 (а); 7,0 (б); 5,0 (в); 12,1(з)

ных размеров дефектов в случае дефектов межузельного типа наименьшей энергией обладает гексагональная петля Франка с сегментами дислокации, ориентированными вдоль сторон шестиугольника – направлений типа $\langle 110 \rangle$, в то время как в случае дефектов вакансионного типа наименьшей энергией обладает ТДУ, что подтверждено экспериментально в работе [5]. В связи с этим можно сделать вывод о том, что указанные дефекты будут преимущественно

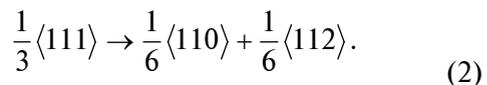
формироваться как результат эволюции каскадов смещений, вызванных первично выбитыми атомами, которые, в свою очередь, инициируются быстрыми нейтронами.
 Примеры визуализации атомных конфигураций ряда дефектов (полной дислокационной петли, петель Франка и др.) приведены на рис. 2. Было установлено, что в случае полной дислокационной петли происходит расщепление определенных сегментов в плоскостях $\{111\}$ на две ча-

стичные дислокации с векторами Бюргера $\langle 110 \rangle$ вследствие дислокационной реакции вида:



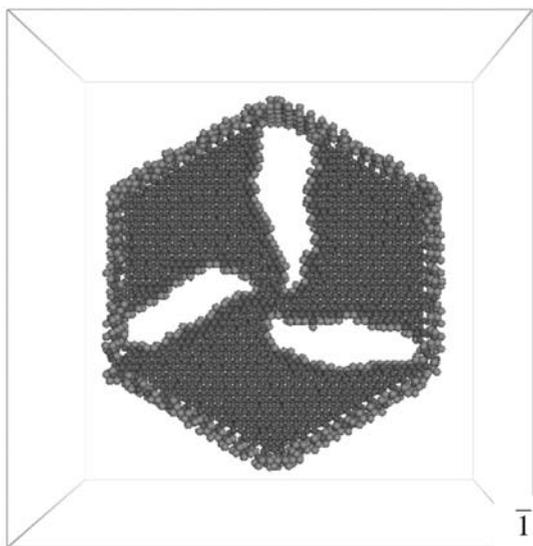
В случае петель Франка со сторонами

вдоль направлений типа $\langle 110 \rangle$ происходит расщепление сегментов за счет следующей реакции:

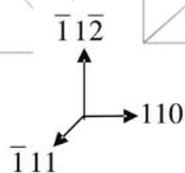
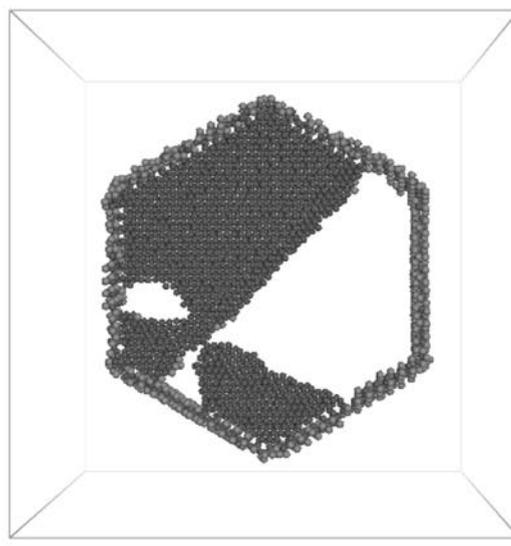


Расщепления в случае петель Франка с

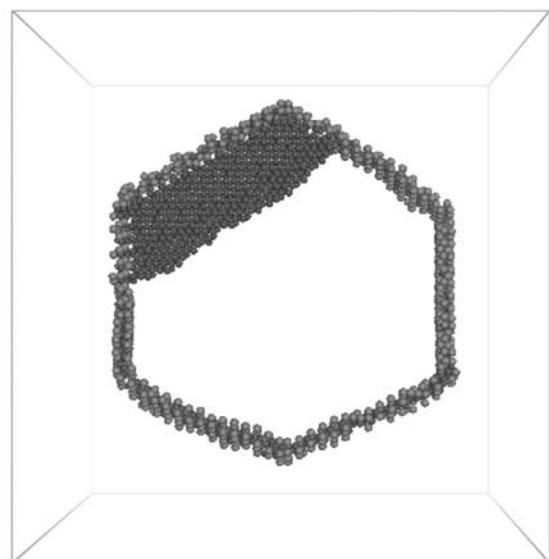
а)



б)



в)



г)

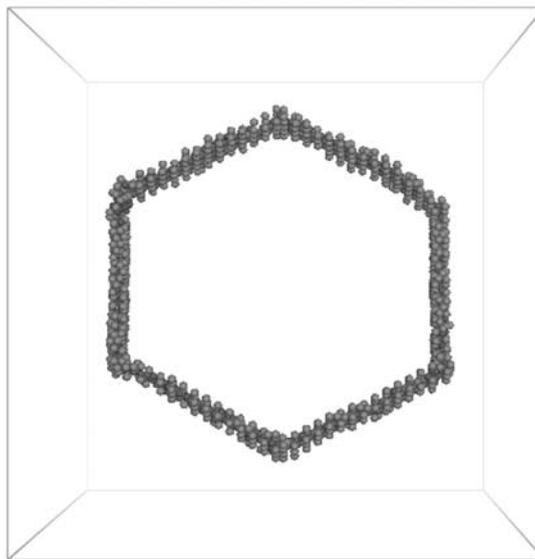


Рис. 3. Моделирование межузельной дислокационной петли Франка диаметром 12,1 нм со сторонами вдоль направлений типа $\langle 112 \rangle$ в различные моменты времени, пс: 1 (а), 9(б), 12(в), 15(г). Показана ориентация монокристалла; $T = 300\text{K}$

сегментами дислокации, ориентированными вдоль направлений типа $\langle 112 \rangle$, не происходит, так как эти участки петли не содержатся ни в одной из кристаллографических плоскостей $\{111\}$.

Для случая вакансионных дефектов было проведено сравнение результатов молекулярно-динамического моделирования при $T = 0$ К с оценками, полученными с помощью аналитических моделей, которые опубликованы в статьях [8, 14]. Установлено, что для всех типов вакансионных дефектов (см., например, рис. 1, *з*, на котором представлены результаты расчета по аналитической формуле, приведенной в статье [14], для гексагональных петель Франка) результаты МД-моделирования соответствуют теоретическим оценкам. Исключениями являются петли Франка с дислокационными сегментами, ориентированными вдоль направлений типа $\langle 110 \rangle$, поскольку в этом случае происходит расщепление дислокаций, которое не учитывается в аналитических моделях.

Моделирование отжига радиационных дефектов при конечных температурах и временах отжига до 100 пс показало, что все типы радиационных дефектов стабильны при рассмотренных температурах (300, 600, 900, 1000, 1100 и 1200 К), за исключением межузельной дислокационной петли Франка с сегментами дислокационной линии, ориентированными вдоль направлений типа $\langle 112 \rangle$. В последнем случае было отмечено превращение такой петли в полную при температурах 300, 1000 и 1200 К, что показано на рис. 3. Этот процесс трансформации петли вызван зарождением трех пар частичных дислокаций внутри петли (см. рис. 3, *а*). Зародившиеся дислокации отталкиваются друг от друга (см. рис. 3, *б*) и устраняют дефект упаковки (см. рис. 3, *в*, *г*).

Заключение

Таким образом, в данной работе проведено молекулярно-динамическое моделирование свойств протяженных дефектов в модельном аустенитном сплаве $\text{Fe}_{0,7}\text{Ni}_{0,1}\text{Cr}_{0,2}$ с использованием нового по-

тенциала межатомного взаимодействия. Такой потенциал создан для сталей системы Fe-Ni-Cr и оптимизирован с целью воспроизведения механических свойств аустенитных сплавов, подвергнутых нейтронному облучению. Установлено, что среди протяженных радиационных дефектов, имеющих линейные размеры в пределах 1–10 нм, наименьшей энергией обладает гексагональная петля Франка с сегментами дислокации, ориентированными вдоль направлений типа $\langle 110 \rangle$ (в случае дефектов межузельного типа) и тетраэдр дефектов упаковки (в случае дефектов вакансионного типа). Этот результат соответствует экспериментальным наблюдениям. Проведенный анализ показал, что для всех типов стабильных вакансионных дефектов результаты МД-моделирования соответствуют теоретическим оценкам.

Верификация энергетической стабильности типичных радиационных дефектов, выполненная в рамках атомистической модели, позволяет сделать вывод о пригодности разработанной атомистической модели для исследований механизмов взаимодействия дислокаций с радиационными дефектами в аустенитных сплавах. Это наглядно продемонстрировано, в частности, для межузельных петель Франка и ТДУ в модельном сплаве $\text{Fe}_{0,7}\text{Ni}_{0,1}\text{Cr}_{0,2}$ как при нулевой, так и при ненулевых температурах 300–1200 К. В последующих работах предполагается изучить как возможные механизмы такого взаимодействия на атомарном уровне, так и провести соответствующие оценки критического напряжения сдвига. Указанные оценки, в свою очередь, можно использовать для параметризации метода дислокационной динамики. Последний позволяет моделировать движение дислокаций в поле дефектов на масштабе расстояний порядка нескольких микрон. Подобные исследования необходимы для выяснения механизмов пластической деформации сталей аустенитного класса при нейтронном облучении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Was G.S. Fundamentals of radiation materials science. Metals and alloys. New York: Springer, 2007. 827 p.
2. Кирсанов В.А. ЭВМ-эксперимент в атомном материаловедении. М.: Энергоатомиздат, 1990. 303 с.
3. Pokor C., Brechet Y. Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part I: Evolution of the microstructure // Journal of Nuclear Materials. 2004. Vol. 326, pp. 19-29.
4. Pokor C., Brechet Y. Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part II: Irradiation induced hardening // Journal of Nuclear Materials. 2004. Vol. 326, pp. 30-37.
5. Zinkle S.J., Maziasz P.J., Stoller R.E. Dose dependence of the microstructural evolution in neutron-irradiated austenitic stainless steel // Journal of Nuclear Materials. 1993. Vol. 206, pp. 266-286.
6. Неустроев В.С., Островский З.Е., Белозеров С.В. Эволюция микроструктуры стали типа X18H10T при низкотемпературном облучении нейтронами как основной фактор упрочнения // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 2007. № 6. С. 78–81.
7. Bacon D.J., Hull D. Introduction to dislocations; 4th edition. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2001. 242 p.
8. Sigler J.A., Kuhlmann-Wilsdorf D. Calculation on the mechanical energy of vacancy condensation loops, stacking fault tetrahedra, and voids // Physica status solidi. 1967. Vol. 21, pp. 545-556.
9. Osetsky Y.N., Serra A., Singh B.N., Golubov S.I. Structure and properties of clusters of self-interstitials in bcc and fcc metals // Philosophical Magazine A. 2000. Vol. 80, pp. 2131-2157.
10. Osetsky Y.N., Victoria M., Serra A., Golubov S.I., Priego V. Computer simulation of vacancy and interstitial clusters in BCC and FCC metals // Journal of Nuclear Materials. 1997. Vol. 251, pp. 34-48.
11. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987. 387 p.
12. Osetsky Y.N., Bacon D.J. An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2003. Vol. 11, pp. 427-446.
13. Bonny G., Terentyev D., Pasianot R.C., Ponce S., Bakaev A. Interatomic potential to study plasticity in stainless steels: the FeNiCr model alloy // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2011. Vol. 19, No. 8. P. 085008.
14. Johnson R.A. Calculations for the stability of voids, stacking-fault tetrahedra, and dislocation loops in nickel // Philosophical Magazine. 1967. Vol. 16, pp. 553-564.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАКАЕВ Александр Викторович – аспирант кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул, 29
bakaev_vic@mail.ru

ЖУРКИН Евгений Евгеньевич – доктор физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул, 29
ezhurkin@phmf.spbstu.ru

Bakaev A.V., Zhurkin E.E. CHARACTERIZATION OF RADIATION DEFECTS IN AUSTENITIC ALLOYS.

Numerical calculation of formation energy of different radiation defects at zero temperature ($T = 0$ K) in the austenitic $Fe_{0.7}Ni_{0.1}Cr_{0.2}$ model alloy using classical molecular dynamics method has been carried out. Thermal stability of the radiation defects by means of annealing modeling at different non-zero temperatures was studied.

RADIATION DEFECT, ANNEALING, AUSTENITIC ALLOY, MODELING, CLASSICAL MOLECULAR DYNAMICS METHOD.



REFERENCES

1. Was G.S. *Fundamentals of radiation materials science. Metals and alloys*. N.Y., Springer, 2007, 827 p.
 2. Kirsanov V.A. *EVM-eksperiment v atomnom materialovedenii*. Moscow, Energoatomizdat, 1990, 303 p. (rus)
 3. Pokor C., Brechet Y. Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part I: Evolution of the microstructure. *Journal of Nuclear Materials*, 2004, Vol. 326, pp. 19-29.
 4. Pokor C., Brechet Y. Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part II: Irradiation induced hardening. *Journal of Nuclear Materials*, 2004, Vol. 326, pp. 30-37.
 5. Zinkle S.J., Maziasz P.J., Stoller R.E. Dose dependence of the microstructural evolution in neutron-irradiated austenitic stainless steel. *Journal of Nuclear Materials*, 1993, Vol. 206, pp. 266-286.
 6. Neustroev V.S., Ostrovskiy Z.E., Belozero S.V. Evolyutsiya mikrostruktury stali tipa Kh18N10T pri nizkotemperaturnom obluchenii neytronami kak osnovnoy faktor uprochneniya. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Fizika radiatsionnykh povrezhdeniy i radiatsionnoe materialovedenie*, 2007, No.6, pp. 78-81. (rus)
 7. Bacon D.J., Hull D. *Introduction to dislocations*. 4th edition. Butterworth-Heinemann, 2001, 242 p.
 8. Sigler J.A., Kuhlmann-Wilsdorf D. Calculation on the mechanical energy of vacancy condensation loops, stacking fault tetrahedra, and voids. *Physica status solidi*, 1967, Vol. 21, pp. 545-556.
 9. Osetsky Y.N., Serra A., Singh B.N., Golubov S.I. Structure and properties of clusters of self-interstitials in BCC and FCC metals. *Philosophical Magazine A*, 2000, Vol. 80, pp. 2131-2157.
 10. Osetsky Y.N., Victoria M., Serra A., Golubov S.I., Priego V. Computer simulation of vacancy and interstitial clusters in BCC and FCC metals. *Journal of Nuclear Materials*, 1997, Vol. 251, pp. 34-48.
 11. Allen M.P., Tildesley D.J. *Computer simulation of liquids*. Oxford: Clarendon Press, 1987, 387 p.
 12. Osetsky Y.N., Bacon D.J. An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2003, Vol. 11, pp. 427-446.
 13. Bonny G., Terentyev D., Pasianot R.C., Ponce S., Bakaev A. Interatomic potential to study plasticity in stainless steels: the FeNiCr model alloy. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2011, Vol. 19. No. 8, P. 085008.
- Johnson R.A. Calculations for the stability of voids, stacking-fault tetrahedra, and dislocation loops in nickel. *Philosophical Magazine*, 1967, Vol. 16, pp. 553-564.

THE AUTHORS

BAKAEV Alexander V.

St. Petersburg State Polytechnical University
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
bakaev_vic@mail.ru

ZHURKIN Evgeny E.

St. Petersburg State Polytechnical University
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ezhurkin@phmf.spbstu.ru

УДК 539.5

А.В. Бакаев, Е.Е. Журкин

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В АУСТЕНИТНОМ СПЛАВЕ ЖЕЛЕЗА НА АТОМАРНОМ МАСШТАБЕ РАССТОЯНИЙ

С помощью компьютерного моделирования проведено исследование движения дислокаций в модельном сплаве железа, содержащем 10% Ni и 20% Cr, с целью последующего изучения взаимодействия дислокаций с радиационными дефектами. В частности, протестирована модель периодических дислокаций и рассчитан ряд дислокационных характеристик.

ДИСЛОКАЦИЯ, АУСТЕНИТНЫЙ СПЛАВ, МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА, МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Введение

Аустенитные сплавы широко используются в качестве конструкционных материалов для ядерных энергетических установок. Их применение обуславливается хорошими эксплуатационными свойствами, в частности, устойчивостью к коррозии. Однако в процессе эксплуатации они подвержены радиационному охрупчиванию, которое обусловлено накоплением и ростом радиационных дефектов, возникающих в результате взаимодействия потока нейтронов с материалом [1]. Характер радиационного повреждения аустенитных сплавов при нейтронном облучении был изучен в целом ряде экспериментальных работ (см., например, статьи [2 – 4]), в которых было установлено, что преобладающим типом протяженных радиационных дефектов в таких сплавах (при дозах до 10 с.н.а. (смещений на атом)) являются дислокационные петли Франка межузельного типа. Считается, что именно эти дефекты в наибольшей мере обуславливают радиационное упрочнение аустенитных сталей, имеющих гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку, при нейтронных флюенсах (дозах), соответствующих диапазону 10^{-3} – 10 с.н.а. Физические причины возникновения радиационного упрочнения и охрупчивания связаны с тем, что петли Франка препятствуют движению дислокаций в своих плоскостях скольжения. В результате взаимодействия дислокации с дефектом-барьером происходят дислокационные реакции, которые

приводят к возрастанию предела текучести материала. В результате этих реакций петли Франка могут либо поглощаться, либо деформироваться. Изучение взаимодействия подвижных дислокаций и радиационных дефектов необходимо для понимания процессов пластической деформации облученных материалов.

Типичные размеры дислокационных петель составляют порядка нескольких нанометров, поэтому для моделирования их свойств логично использовать атомистические подходы [1]. В связи с этим метод классической молекулярной динамики (МД) является подходящим инструментом для исследования механизмов взаимодействия дислокаций и дефектов на атомарном уровне, причем данный метод позволяет варьировать температуру материала и условия внешней нагрузки.

Взаимодействие дислокаций и радиационных дефектов уже было изучено в чистых металлах (таких как алюминий, никель, медь), имеющих ГЦК кристаллическую решетку [5 – 8]. Аустенитные сплавы железа (также имеющие ГЦК-решетку) характеризуются относительно низким значением величины энергии дефекта упаковки (около 20 мДж/м²) при высоком значении модуля упругости (80 ГПа), что не реализуются ни в одном из чистых ГЦК-материалов. Основными легирующими компонентами аустенитной стали являются никель и хром, вариация концентраций которых приводит к изменению энергии дефекта упаковки

(ЭДУ), в связи с чем сплав железа, содержащий 10 % Ni и 20 % Cr, используется на практике как модельный для изучения свойств аустенитных сталей.

Цель данной работы – выяснение характера движения дислокаций в модельном аустенитном сплаве $Fe_{0,7}Ni_{0,1}Cr_{0,2}$ в рамках атомистической модели. Верификация модели движения дислокаций необходима для последующего изучения взаимодействия дислокаций с радиационными дефектами. Это позволит охарактеризовать механизмы такого взаимодействия в аустенитных сплавах на атомарном уровне, а также вычислить значения критического напряжения сдвига, необходимого для преодоления дислокацией дефекта-барьера. Эти результаты, в свою очередь, можно использовать в прогностических моделях изменения механических свойств аустенитных сталей и сплавов под воздействием нейтронного облучения.

В рамках же представленной работы, в частности, проведено тестирование атомистической модели периодических дислокаций [9] и рассчитан ряд дислокационных характеристик. Кроме того, определена скорость приложения внешней нагрузки, при которой предел текучести в моделируемом кристалле соответствует таковому для аустенитной стали марки 304L (российский аналог – сталь марки 03X18H11) [10] в рассматриваемом диапазоне температур $T = 300 - 900$ К при скоростях нагрузки, характерных для квазистатических тестов на растяжение.

Методика исследования

Для решения поставленных задач мы использовали компьютерное моделирование в рамках метода классической молекулярной динамики, который позволяет отслеживать индивидуальные траектории каждой из частиц изучаемой системы путем интегрирования уравнений движения Ньютона [11]. Для проведения вычислений применялся стандартный алгоритм молекулярной динамики, адаптированный авторами работы [9] свыше десятилетия назад для атомистического моделирования дислокаций в кристаллах. Для вычисления сил взаимодействия между атомами использовался не-

давно созданный потенциал [12], который основан на стандартной модели погруженного атома. При этом данный потенциал оптимизирован с целью корректного воспроизведения механических свойств тройных аустенитных ГЦК-сплавов Fe-Ni-Cr (с учетом относительно низких величин ЭДУ при высоком значении модуля упругости) при различном содержании легирующих элементов. Он позволяет с хорошей точностью воспроизводить значения энергии когезии, постоянных кристаллической решетки, констант упругости C_{11} , C_{12} , C_{44} , энергии образования и миграции вакансии, энергии образования различных межузельных конфигураций (гантелей $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, а также межузлий в октаэдрических и тетраэдрических позициях), воспроизводить ЭДУ как для чистых металлов (Fe, Ni, Cr), так и для сплава $Fe_{0,7}Ni_{0,1}Cr_{0,2}$. При этом достигается хорошее согласие и с опубликованными ранее экспериментальными данными, и с результатами, полученными в рамках квантовомеханического метода *ab initio* (детали сравнений приведены в статье [12]).

В данной работе рассмотрены дислокации краевого и винтового типов с вектором Бюргерса $(1/2) \langle 110 \rangle$. Было принято, что оси декартовой системы координат X , Y , Z , параллельные граням прямоугольного модельного кристалла, ориентированы вдоль кристаллографических направлений $\langle 110 \rangle$, $\langle 112 \rangle$, $\langle 111 \rangle$, соответственно. Периодические граничные условия применялись вдоль осей X , Y ; плоскости граней (111) являлись свободными поверхностями, перпендикулярными оси Z . Размеры модельных боксов, соответствующее число атомов и плотность дислокаций приведены в табл. 1 для краевой и винтовой дислокаций. Шаг интегрирования уравнений движения атомов был равен 5 фс.

Для атомных конфигураций, содержащих дислокации, была проведена процедура релаксации (минимизация энергии кристалла) при нулевой температуре, а затем полученные конфигурации использовались в качестве начальных для молекулярно-динамического моделирования при конечных температурах $T = 300, 600$ и 900 К.

Таблица 1

Характеристики моделируемых дислокаций

Использованная величина		Значение для дислокации	
		краевой	винтовой
Число атомов	Общее	1470936	1481884
	Интегрируемое	1075800	1085040
Размер модельного бокса, ед. a_0		$84,5 \times 61,2 \times 52,0$	$62,3 \times 83,9 \times 52,0$
Плотность дислокаций, m^{-2}		$1,8 \cdot 10^{15}$	

Примечание. Общее число атомов включало в себя верхний подвижный и нижний неподвижный блоки модельного кристалла, а также те атомы, для которых производилось интегрирование уравнений движения в рамках МД-моделирования.

Обозначение: a_0 – постоянная решетки.

Температура инициализировалась путем раздачи скоростей каждому из атомов согласно следующей процедуре: вначале всем атомам системы раздавались импульсы случайным образом, в соответствии с распределением Максвелла для температуры $2T$ (где T – требуемая температура). Далее рассчитывался полный импульс системы, после чего производился одновременный пересчет всех скоростей таким образом, чтобы обнулить полный импульс системы. Мы использовали следующую процедуру для установления динамического равновесия: на протяжении 10 тыс. шагов происходит интегрирование уравнений движения, при этом через каждые 100 шагов по времени импульсы всех атомов перенормируются таким образом, чтобы полная кинетическая энергия системы соответствовала требуемой температуре. После этого начинается приложение внешней нагрузки, согласно нижеописанному алгоритму.

Внешняя нагрузка была реализована путем сдвига нескольких верхних атомных плоскостей (111) модельного кристалла. Атомы в этих слоях жестко фиксированы в своих позициях, и интегрирование уравнений Ньютона для них не производится. Скорость приложения внешней нагрузки (путем сдвига) варьировалась в пределах от $2,0 \cdot 10^7$ до $4,0 \cdot 10^8$ c^{-1} , что соответствует скорости движения дислокации в диапазоне от 43,8 до 874,9 м/с. Атомы в нижних слоях кристалла также были жестко зафиксированы в своих начальных позициях, и резуль-

тирующее напряжение сдвига, вызванное сдвигом верхних слоев кристалла, определяли, исходя из расчета силы, действующей на нижний фиксированный слой атомов в направлении приложенной нагрузки.

При анализе конечной конфигурации атомов использовалась численная процедура метода «связанных ячеек», обеспечивающая наиболее эффективный поиск ближайших соседей каждого атома в модельном кристалле [11]. Атомы ядра дислокации и дефекта упаковки анализировались по критериям координационного числа, подсчета числа соседей, соответствующих ГЦК-структуре и потенциальной энергии каждого атома. Конфигурация локального окружения каждого атома сравнивалась с идеальной ГЦК-решеткой (мы исходили из количества соседей, соответствующих ГЦК-структуре). Атомы ядра дислокации были идентифицированы по наличию 10 или 11 ГЦК-соседей; дефект упаковки определялся по двойному слою атомов, имеющих по 9 ГЦК-соседей.

Результаты и их обсуждение

Верификация модели дислокаций. Согласно модели Орована [13], скорость движения дислокаций связана со скоростью приложения внешней нагрузки и плотностью дислокаций следующим образом:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{d\varepsilon}{dt} = b\rho_m v, \quad (1)$$

где ε – абсолютная величина прилагаемой

Таблица 2

Сравнение используемой модели движения (скольжения) дислокаций с теоретической моделью Орована

Тип дислокации	Температура, К	Скорость движения, м/с	
		Результат расчета методом МД	Согласно формуле Орована
Краевая	300	45,0 ± 1,3	43,8
	600	44,0 ± 1,3	43,9
	900	45,4 ± 1,5	44,0
Винтовая	300	41,7 ± 1,8	43,4
	600	41,8 ± 1,9	43,6
	900	42,9 ± 1,6	43,7

Обозначение: МД – молекулярная динамика.

нагрузки, b – модуль вектора Бюргера дислокации, ρ_m – плотность подвижных дислокаций, v – скорость движения дислокации, t – время.

В результате проведенных МД-вычислений на основе анализа позиции дислокации, была вычислена ее скорость (табл. 2).

При всех рассмотренных температурах скорость движения дислокаций соответствовала величине, рассчитанной по формуле (1). Дислокационные сегменты двигались равномерно, и средняя ширина расщепления дислокации d составляла $23,90a_0$; $23,90a_0$; $24,69a_0$ (a_0 – постоянная решетки) в случае краевой дислокации и $10,9a_0$; $12,6a_0$; $13,0a_0$ для случая винтовой дислокации при температурах $T = 300, 600$ и 900 К, соответственно. Согласно работе [13], для величины d справедливы следующие соотношения:

$$d_e = \frac{Gb^2(2 + \nu)}{4\pi\gamma(1 - \nu)}; \quad (2)$$

$$d_s = \frac{Gb^2(2 - 3\nu)}{4\pi\gamma(1 - \nu)}, \quad (3)$$

где G – модуль сдвига, b – модуль вектора Бюргера дислокации, ν – коэффициент Пуассона, γ – энергия дефекта упаковки.

Формулы (2) и (3) приведены для краевой и винтовой дислокаций, соответственно. Поделив уравнение (2) на уравнение (3), можно получить соотношение, позволяющее вычислить коэффициент Пу-

ассона при известных значениях ширины расщепления краевой (d_e) и винтовой (d_s) дислокаций. Величины d_e и d_s , полученные из МД-расчетов, были использованы нами для вычисления коэффициента Пуассона. Он оказался равным 0,28; данный результат хорошо согласуется с экспериментальным значением коэффициента Пуассона 0,29, измеренным для аустенитных сталей [14].

Полученные нами результаты показывают, что использованная атомистическая модель периодических дислокаций и алгоритмы идентификации дефектов предсказывают величины, которые полностью согласуются с теорией упругости.

Расчет активационного объема и энергии активации. На рис. 1 приведена усредненная по типу дислокации зависимость напряжения нагрузки σ от температуры при различных скоростях приложения внешней нагрузки. Показаны результаты, полученные с помощью компьютерного моделирования, а также на основе экспериментальных данных для аустенитных сталей 304L и 316L [10]. Результирующее напряжение сдвига σ_γ было найдено путем усреднения мгновенных значений напряжения сдвига σ после того, как дислокация достигала расчетной скорости.

На основе этих данных нами была вычислена энергия активации ΔH^* и активационный объем V^* для рассматриваемых дислокаций с использованием следующих соотношений [15]:

$$V^* = \frac{k_B \ln(\dot{\epsilon}_2 / \dot{\epsilon}_1)}{\Delta\sigma_Y}; \quad (4)$$

$$\Delta H^* = -V^* T \left(\frac{\partial \sigma_Y}{\partial T} \right)_{\dot{\epsilon}}, \quad (5)$$

где k_B – постоянная Больцмана, $\left(\frac{\partial \sigma_Y}{\partial T} \right)_{\dot{\epsilon}}$ – производная от σ_Y по температуре при постоянной скорости приложения внешней нагрузки $\dot{\epsilon}$.

Активационный объем был получен путем ряда тестовых расчетов при условиях постоянной температуры и варьируемой скорости нагрузки. Энергия активации рассчитывалась при постоянной скорости приложения внешней нагрузки и варьируемой температуре. Результаты расчетов приведены на рис. 2.

На основе анализа полученных результатов следует отметить, что при принятой нами плотности дислокаций экспериментальное значение предела текучести реализуется при скоростях дислокаций около 225 и 45 м/с для температур $T = 300$ и 600 К, соответственно, при заданных значениях плотности и длины сегмента.

Рассчитанные нами температурные зависимости активационного объема и энергии активации позволяют экстраполировать полученные величины σ_Y на другие диапазоны температур.

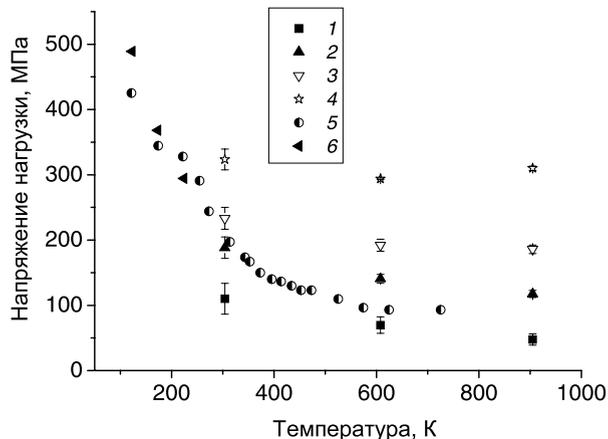
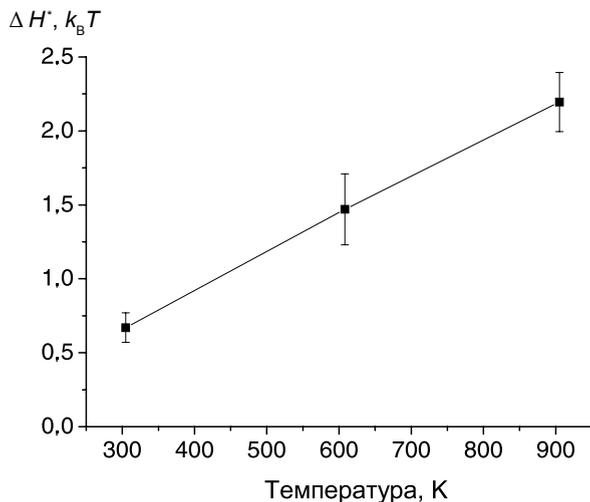


Рис. 1. Сравнение расчетных (1 – 4) и экспериментальных (5, 6) зависимостей результирующего напряжения нагрузки σ_Y от температуры при различных значениях средней скорости движения дислокаций v , м/с: 45 (1), 225 (2), 450 (3), 900 (4). Экспериментальные зависимости получены в работе [10] для аустенитных сталей 304L (5) и 316L (6) при $v = 0,4$ мкм/с

Кроме того, с помощью алгоритма, описанного в работе [16], появляется возможность прогнозирования ситуаций, в которых скорости движения дислокаций отличаются от их типичных значений при тестировании аустенитной стали на растяжение. При таком тестировании типичная скорость приложения внешней нагрузки составляет 10^{-3} с^{-1} .

а)



б)

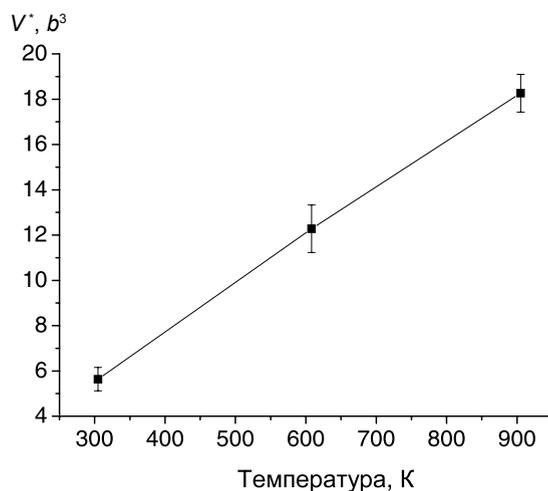


Рис. 2. Температурные зависимости энергии активации в единицах $k_B T$ (а) и активационного объема в единицах b^3 (б); k_B – постоянная Больцмана, b – вектор Бюргерса

Заключение

Таким образом, в настоящей работе подтверждено согласие использованной атомистической модели периодических дислокаций (включая алгоритм их идентификации) с теорией упругости. Кроме того, определена скорость приложения внешней нагрузки, при которой предел текучести в моделируемом кристалле соответствует пределу текучести аустенитной стали марки 304L (ее российский аналог – сталь марки 03X18H11) в рассматриваемом диапазоне температур $T = 300 - 900$ К. Это позволяет перейти к следующему этапу работы – выяснению механизмов взаимодействия дислокаций и радиационных

дефектов в аустенитных сплавах. В последующих работах предполагается не только изучить возможные механизмы такого взаимодействия на атомарном уровне, но и провести соответствующие оценки критического напряжения сдвига (напряжение, необходимое для преодоления дислокацией дефекта-барьера). Полученные оценки в дальнейшем могут быть использованы для параметризации метода дислокационной динамики, позволяющего моделировать движение дислокаций в поле дефектов на масштабе расстояний порядка нескольких микрон. Проведенные исследования, на наш взгляд, вносят вклад в понимание механизмов пластической деформации аустенитных сталей при облучении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Кирсанов В.А.** ЭВМ-эксперимент в атомном материаловедении. М.: Энергоатомиздат, 1990. 303 с.
2. **Pokor C., Brechet Y.** Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part I: Evolution of the microstructure // *Journal of Nuclear Materials*. 2004. Vol. 326, pp. 19-29.
3. **Pokor C., Brechet Y.** Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part II: Irradiation induced hardening // *Journal of Nuclear Materials*. 2004. Vol. 326, pp. 30-37.
4. **Zinkle S.J., Maziasz P.J., Stoller R.E.** Dose dependence of the microstructural evolution in neutron-irradiated austenitic stainless steel // *Journal of Nuclear Materials*. 1993. Vol. 206, pp. 266-286.
5. **Nogaret T., Robertson C., Rodney D.** Atomic-scale plasticity in the presence of Frank loops // *Philosophical Magazine*. 2007. Vol. 87, pp. 945-966.
6. **Rodney D., Martin G.** Dislocation pinning by glissile interstitial loops in a nickel crystal: a molecular dynamics study // *Physical Review B*. 2000. Vol. 61, pp. 8714-8730.
7. **Rodney D.** Molecular dynamics simulation of screw dislocations interacting with interstitial Frank loops in a model FCC crystal // *Acta Materialia*. 2004. Vol. 52, pp. 607-614.
8. **Osetsky Y.N., Rodney D., Bacon D.J.** Atomic-scale simulations of dislocation-stacking fault tetrahedron interaction // *Philosophical Magazine*. 2006. Vol. 86, pp. 2295-2313.
9. **Osetsky Y.N., Bacon D.J.** An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2003. Vol. 11, pp. 427-446.
10. **Byun T.S., Hashimoto N., Farrell K.** Temperature dependence of strain hardening and plastic instability behavior in austenitic stainless steels // *Acta Materialia*. 2004. Vol. 52, pp. 3889-3899.
11. **Allen M.P., Tildesley D.J.** Computer simulation of liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987. 387 p.
12. **Bonny G., Terentyev D., Pasianot R.C., Ponce S., Bakaev A.** Interatomic potential to study plasticity in stainless steels: the FeNiCr model alloy // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2011. Vol. 19. P. 085008.
13. **Bacon D.J., Hull D.** Introduction to dislocations. 4th edition. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2001. 242 p.
14. **Dong-Gyu Ahn, Gyung-Je Moon, Chang-Gyun Jung, Gil-Young Han, Dong-Yol Yang.** Impact behavior of a st 304 h sheet with a thickness of 0.7 mm // *The Arabian Journal for Science and Engineering*. 2009. Vol. 34, pp. 57-71.
15. **Tapasa K., Osetsky Y.N., Bacon D.J.** Computer simulation of interaction of an edge dislocation with a carbon interstitial in alpha-iron and effects on glide // *Acta Materialia*. 2007. Vol. 55, pp. 93-104.
16. **Domain C., Monnet G.** Simulation of screw dislocation motion in iron by molecular dynamics simulations // *Physical Review Letters*. 2005. Vol. 95. P. 215506.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАКАЕВ Александр Викторович – аспирант кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
bakaev_vic@mail.ru

ЖУРКИН Евгений Евгеньевич – доктор физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ezhurkin@phmf.spbstu.ru

Bakaev A.V., Zhurkin E.E. ATOMIC-SCALE SIMULATION OF DISLOCATIONS IN THE IRON AUSTENITIC ALLOY.

We have investigated the movement of dislocations in a model iron alloy with 10 % Ni and 20 % Cr by means of computer simulation in order to study an interaction of dislocations with radiation defects in metals afterwards. Among other things, we tested the model of periodical dislocations and calculated a set of dislocation characteristics.

DISLOCATION, AUSTENITIC ALLOY, MOLECULAR DYNAMICS, MODELING.

REFERENCES

1. **Kirsanov V.A.** *EVM-eksperiment v atomnom materialovedenii*. Moscow, Energoatomizdat, 1990, 303 p. (rus)
2. **Pokor C., Brechet Y.** Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part I: Evolution of the microstructure. *Journal of Nuclear Materials*, 2004, Vol. 326, pp. 19-29.
3. **Pokor C., Brechet Y.** Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part II: Irradiation induced hardening. *Journal of Nuclear Materials*, 2004, Vol. 326, pp. 30-37.
4. **Zinkle S.J., Maziasz P.J., Stoller R.E.** Dose dependence of the microstructural evolution in neutron-irradiated austenitic stainless steel. *Journal of Nuclear Materials*. 1993. Vol. 206, pp. 266-286.
5. **Nogaret T., Robertson C., Rodney D.** Atomic-scale plasticity in the presence of Frank loops. *Philosophical Magazine*, 2007, Vol. 87, pp. 945-966.
6. **Rodney D., Martin G.** Dislocation pinning by glissile interstitial loops in a nickel crystal: a molecular dynamics study. *Physical Review B*, 2000, Vol. 61, pp. 8714-8730.
7. **Rodney D.** Molecular dynamics simulation of screw dislocations interacting with interstitial frank loops in a model FCC crystal. *Acta Materialia*, 2004, Vol. 52, pp. 607-614.
8. **Osetsky Y.N., Rodney D., Bacon D.J.** Atomic-scale simulations of dislocation-stacking fault tetrahedron interaction. *Philosophical Magazine*, 2006, Vol. 86, pp. 2295-2313.
9. **Osetsky Y.N., Bacon D.J.** An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2003, Vol. 11, pp. 427-446.
10. **Byun T.S., Hashimoto N., Farrell K.** Temperature dependence of strain hardening and plastic instability behavior in austenitic stainless steels. *Acta Materialia*, 2004, Vol. 52, pp. 3889-3899.
11. **Allen M.P., Tildesley D.J.** *Computer simulation of liquids*. Oxford: Clarendon Press, 1987, 387 p.
12. **Bonny G., Terentyev D., Pasianot R.C., Ponce S., Bakaev A.** Interatomic potential to study plasticity in stainless steels: the FeNiCr model alloy. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2011, Vol. 19. P. 085008.
13. **Bacon D.J., Hull D.** *Introduction to dislocations*. 4th edition. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2001, 242 p.
14. **Dong-Gyu Ahn, Gyung-Je Moon, Chang-Gyun Jung, Gil-Young Han, Dong-Yol Yang.** Impact behavior of a sts 304 h sheet with a thickness of 0.7 mm. *The Arabian Journal for Science and Engineering*, 2009, Vol. 34, pp. 57-71.
15. **Tapasa K., Osetsky Y.N., Bacon D.J.** Computer simulation of interaction of an edge dislocation with a carbon interstitial in alpha-iron and effects on glide. *Acta Materialia*, 2007, Vol. 55, pp. 93-104.
16. **Domain C., Monnet G.** Simulation of screw dislocation motion in iron by molecular dynamics simulations. *Physical Review Letters*, 2005, Vol. 95, P. 215506.

THE AUTHORS

BAKAEV Alexander V.

St. Petersburg State Polytechnical University

29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

bakaev_vic@mail.ru

ZHURKIN Evgeny E.

St. Petersburg State Polytechnical University

29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

ezhurkin@phmf.spbstu.ru



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 538.9

С.И. Иголкин, А.И. Мелькер

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ГИДРОДИНАМИКА ПОДВОДНОГО ВЗРЫВА

В работе рассматривается молекулярно-динамический подход к изучению подводного взрыва. Была разработана компьютерная программа, которая позволяет производить моделирование подводного взрыва для жидкости Леннард-Джонса. Численное моделирование этого процесса с помощью указанного метода является естественной альтернативой эксперименту. Результаты расчета динамического процесса, который должен развиваться после подводного взрыва, показывают поразительное сходство с известной эволюцией системы, а именно: распространение фронта ударной волны, формирование кратера, распад ударной волны при достижении границ свободной поверхности с последующим подъемом слоя воды над областью взрыва.

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ, УДАРНАЯ ВОЛНА, ПОДВОДНОЕ ВОЗМУЩЕНИЕ, ЖИДКОСТЬ ЛЕННАРД-ДЖОНСА, ГИДРОДИНАМИКА.

Введение

Современную науку сейчас уже сложно представить без компьютерного моделирования (эксперимента), которое используется наряду с традиционными экспериментальными и теоретическими исследованиями. С его помощью могут быть даны ответы на вопросы, которые относятся к процессам, развивающимся в условиях, где не представляется возможным провести реальный эксперимент. Именно при решении сложных задач главной является степень применимости того или иного численного метода, вычислительного алгоритма, т. е. насколько точно они описывают изучаемую систему с учетом аппроксимации исходных дифференциальных уравнений, неточностей задания начального состояния и ошибок округления. Практика показывает, что к разрешению сложных, нетривиальных задач проявляют интерес исследователи по всему миру, ставя перед собой цели по изучению самых разных проблем, применимости различных вычислительных методов и

подходов к решению таких систем.

К одному из таких сложных процессов относится подводный взрыв. Интерес к его исследованию изначально был вызван необходимостью решения широкого спектра технических задач, возникших в годы второй мировой войны. Внимание, уделяемое данной проблеме в тот период времени, привело к интенсивному развитию представлений о характере взрывных движений. Исследователями было отмечено, что работа над проблемой механики взрыва послужила толчком к значительному прогрессу в смежных разделах прикладной математики и механики сплошных сред [1].

Учеными проводились исследования подводного взрыва, взрыва в грунтах; изучалось поведение металлов под действием продуктов детонации взрывчатых веществ; эти продукты создают для среды экстремальные условия в виде гигантских давлений (в сотни кбар) и температур (достигают нескольких тысяч градусов). Установлено, что при таких условиях многие твердые сре-

ды «забывают» о своих прочностных свойствах, жесткой кристаллической структуре и ведут себя по законам гидродинамики. В работах по данной тематике рассматриваются теоретические и экспериментальные методы исследования подводного взрыва, при этом задачи о поведении различных сред при взрывном нагружении, в основном, описывают в рамках существующих математических постановок и моделей [2]. Как следует из монографии В.К. Кедринского [3], в исследованиях подводного взрыва условно выделяют три основных блока проблем:

ударные волны, уравнения состояния и динамика полости с продуктами детонации (при этом предполагается, что рассматриваемая среда безгранична);

поведение среды со свободными границами при взрывном нагружении, микроненормодности в жидкости и растягивающие напряжения;

течение жидкости с неизвестными свободными границами, высокоскоростные струйные течения при малоуглубленных подводных взрывах.

При этом все перечисленные выше направления связаны, прежде всего, с пониманием физики рассматриваемых явлений, поиском управляющих механизмов, разработкой экспериментальных исследований и созданием математических моделей, которые могли бы адекватно описывать эти высокоскоростные процессы и динамику их структуры.

В данной работе приведена реализация описания подводного взрыва путем создания пакета уникальных вычислительных программ, в основе которых лежит метод молекулярной динамики.

Общие сведения о подводном взрыве

Взрывом называется любой процесс быстрого превращения одного вида энергии в другой. Данный процесс характеризуется высокоскоростными изменениями в физическом и химическом состоянии среды, сопровождается практически мгновенным выделением тепла, увеличением давления и температуры, возникновением больших напряжений в среде, разрушением материа-

ла и неустановившимся движением среды. Химические среды, способные к превращениям такого рода, называют взрывчатыми веществами. Процессы, происходящие со скоростями порядка 1 км/с и выше, называют взрывными.

Ввиду сложности механизма энергетического превращения и его непредсказуемости в каждой конкретной ситуации, при постановке задач о взрывном процессе часто используются различные приближения и модельные представления [4], поскольку в общем случае распределение физических величин на поверхностях раздела произвольно. Именно существование поверхности раздела двух сред оказывается несовместимым с законами сохранения массы, количества движения и энергии. Происходит мгновенный распад начальной поверхности с образованием новых поверхностей. На каждой из этих поверхностей разрыва такие гидродинамические переменные, как давление, плотность, температура и скорости частиц, меняются скачкообразно. Нестационарная поверхность сильного разрыва, которая распространяется по окружающей среде, носит название «фронт ударной волны»; поверхность, разделяющая продукты взрыва и среду, является поверхностью сильного разрыва (ее называют поверхностью «газового пузыря»).

Таким образом, теоретические исследования касались, в основном, изучения неустановившегося движения жидкости между граничными поверхностями: фронтом ударной волны, поверхностью газового пузыря и продуктами детонации взрывчатых веществ [5 – 7]. В данной работе затрагиваются такие аспекты, как образование ударной волны [8] и развитие образовавшегося при этом пузыря [9].

Метод молекулярной динамики

Молекулярная динамика является одним из современных методов компьютерного моделирования, в котором для изучения поведения системы с течением времени используется классическая механика. Применение метода молекулярной динамики включает численное решение следующей системы уравнений:

$$m_i \ddot{x}_i = F_i; \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (1)$$

Интегрирование второго закона Ньютона с помощью различных схем от простейших методов Эйлера первого порядка до схем предиктор-корректор позволяет определять траектории атомов. Наиболее важные требования, налагаемые на такие схемы, — это устойчивость, точность и высокая скорость работы. Сила F_i , действующая на i -ю частицу, определяется как отрицательная производная потенциальной энергии U :

$$F_i = - \frac{\partial U(x_1, \dots, x_N)}{\partial x_i}; \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2)$$

где N — число частиц.

Если заданы начальные координаты x_i и скорости частиц, то эволюция системы во времени зависит только от потенциала, который определяет взаимодействие между атомами.

Использованный в данной работе потенциал Леннард-Джонса [10 – 12] выражает простую модель парного взаимодействия неполярных молекул и описывает зависимость энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между ними. Эта модель хорошо описывает взаимодействие сферических неполярных молекул и поэтому используется в расчетах, а также при компьютерном моделировании.

Для получения траекторий атомов в пространстве и времени, существуют различные численные схемы решения системы классических уравнений движения: от простейших методов Эйлера первого порядка до схем предиктор-корректор высоких порядков точности [13]. В данной работе нами использован Метод Гира [14, 15] в представлении вектором Нордсика [16] шестого порядка точности. К преимуществам данного метода относятся его надежность и высокий порядок точности при относительно умеренных (по сравнению с другими методами) временных шагах.

Методика компьютерного моделирования

Изучаемая система представляет собой жидкость Леннард-Джонса в двумерном пространстве с периодическими или жесткими границами в продольном направлении

и стенкой на нижней границе. На частицы жидкости действует внешнее гравитационное поле в направлении, перпендикулярном поверхности жидкости. Параметры, использованные в потенциале Леннард-Джонса, соответствуют таковым для воды: $\sigma = 0,317$ нм, $\epsilon = 0,6502$ кДж/моль.

Преыдушие компьютерные эксперименты, проведенные с водой [17, 18], показали, что структура ее молекулы сложнее, чем ранее предполагалось. Было найдено, что для правильного описания такого объекта необходимо использовать теорию зарядов связей, где в дополнение к межатомному взаимодействию следует учитывать электрическое взаимодействие между рядами ковалентных связей [19, 20]. Поскольку такой глобальный подход ведет к большим трудностям вычислительного плана и к усложнению модели, было решено построить более простую модель воды, заменив молекулу одной частицей. Взаимодействие таких частиц описывалось с помощью потенциала Леннард-Джонса, рассмотренного подробно в работе [21].

Проблема моделирования взрывчатого вещества представляет собой отдельную задачу. При исследовании плоских ударных волн в воде взрывчатку можно исключить. Вместо компьютерного моделирования на атомарном уровне сложная модель молекулы взрывчатки заменяется одной частицей.

В данной работе в круговую область заданного размера (с определенными координатами) помещалось известное количество частиц, подвергнутых равномерному сжатию. Вследствие изменения расстояния между частицами данная структура накапливает большое количество упругой энергии (рис. 1). В результате декомпрессии данной области частицы приобретают огромную скорость и, как следствие этого, высокую температуру. Таким образом осуществлялось моделирование взрыва. Данная методика нашла отражение и в других наших работах [22 – 25].

Результаты

Визуальные картины моделирования, полученные расчетным путем, позволили судить о внешнем сходстве полученных дан-

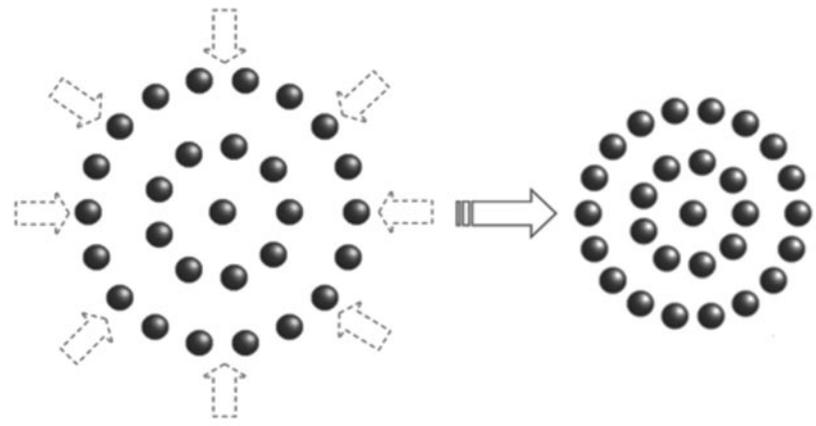


Рис. 1. Моделирование взрывчатки:
 ее сложные молекулы заменяются частицами в виде шариков; пунктирными стрелками показано воздействие сил всестороннего сжатия; сплошной стрелкой обозначен переход системы в новое состояние с высвобождением большой энергии

ных с известной последовательностью явлений, возникающих при подводном взрыве.

Приведенный далее расчет моделирует взрыв на мелкой воде. Эволюция данного процесса с течением безразмерного времени t' (значение $t' = 1$ соответствует моменту времени $t = 7,044$ пс) наглядно представле-

на на рис. 2, 3 и 4.

Момент времени $t' = 0$ отображает начало итерационного процесса с помещенным в моделируемую область зарядом, после установления состояния равновесия при температуре 300 К. Спустя 4 тыс. итерационных шагов при $t' = 1$ явно очерчивается

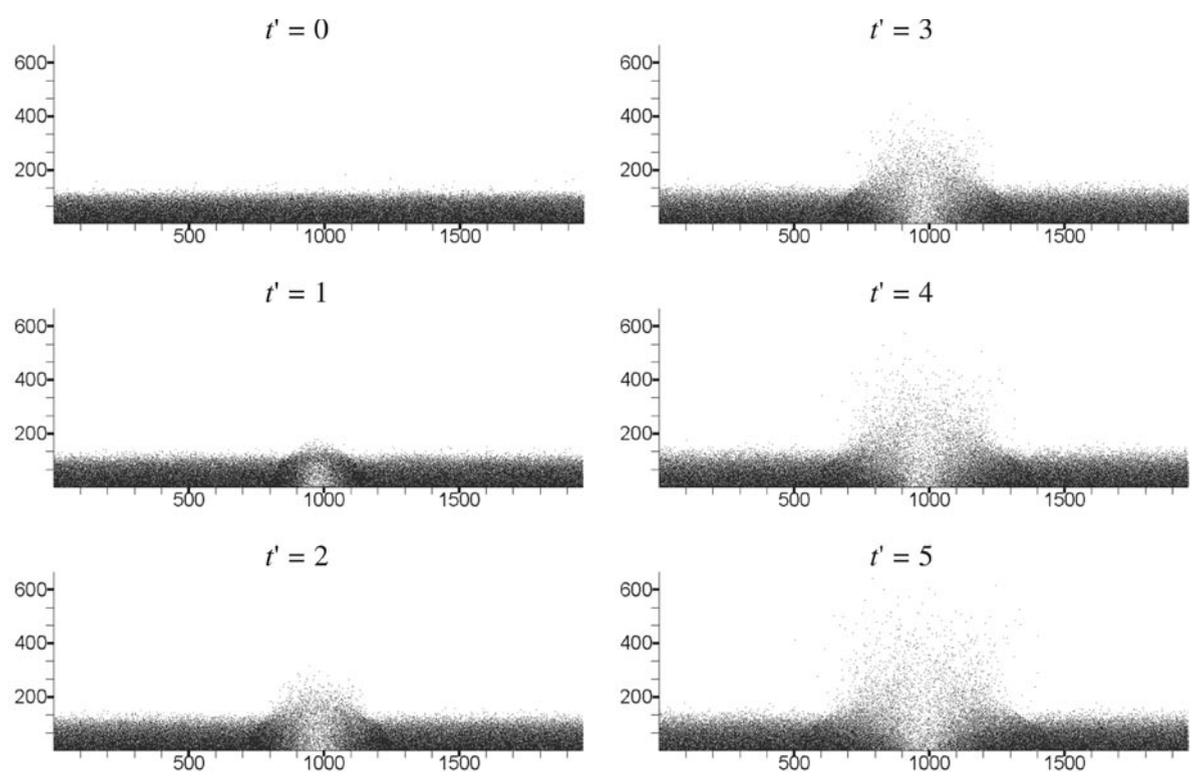


Рис. 2. Временная эволюция подводного взрыва при значениях безразмерного времени $t' = 0 - 5$. По обеим осям отложены координаты частиц (Å) в выбранной системе отсчета

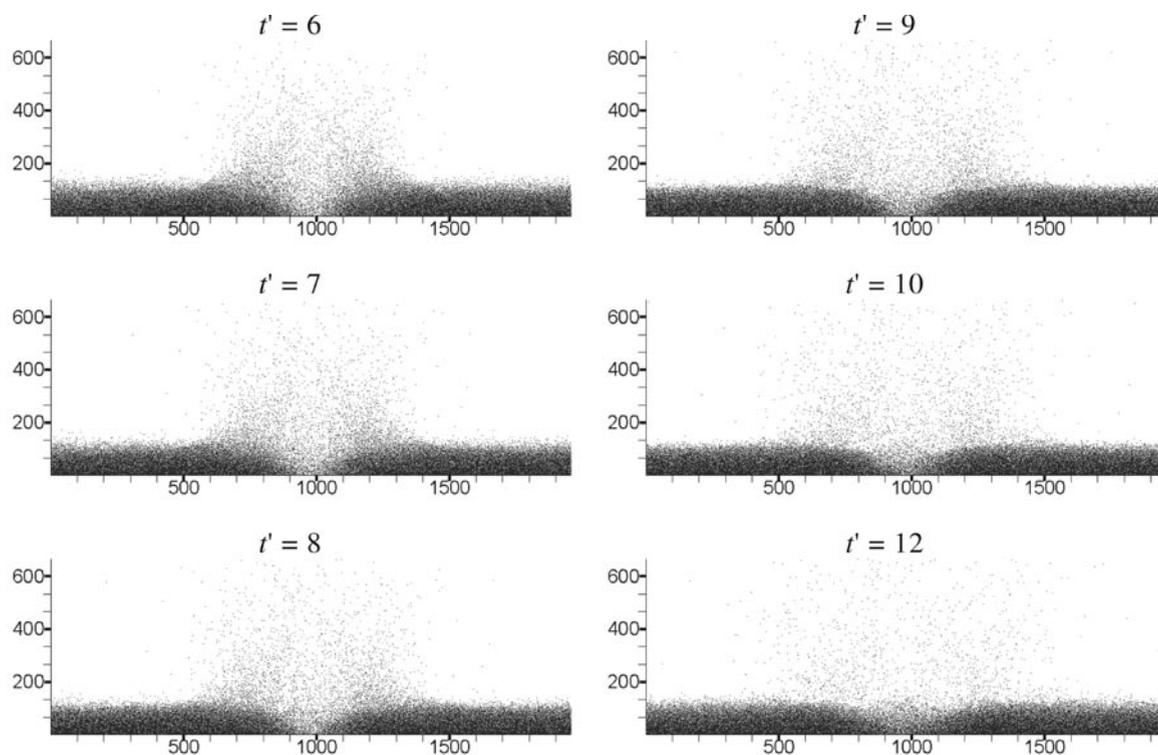


Рис. 3. Временная эволюция подводного взрыва при значениях безразмерного времени $t' = 6 - 12$. По обеим осям отложены координаты частиц (Å) в выбранной системе отсчета

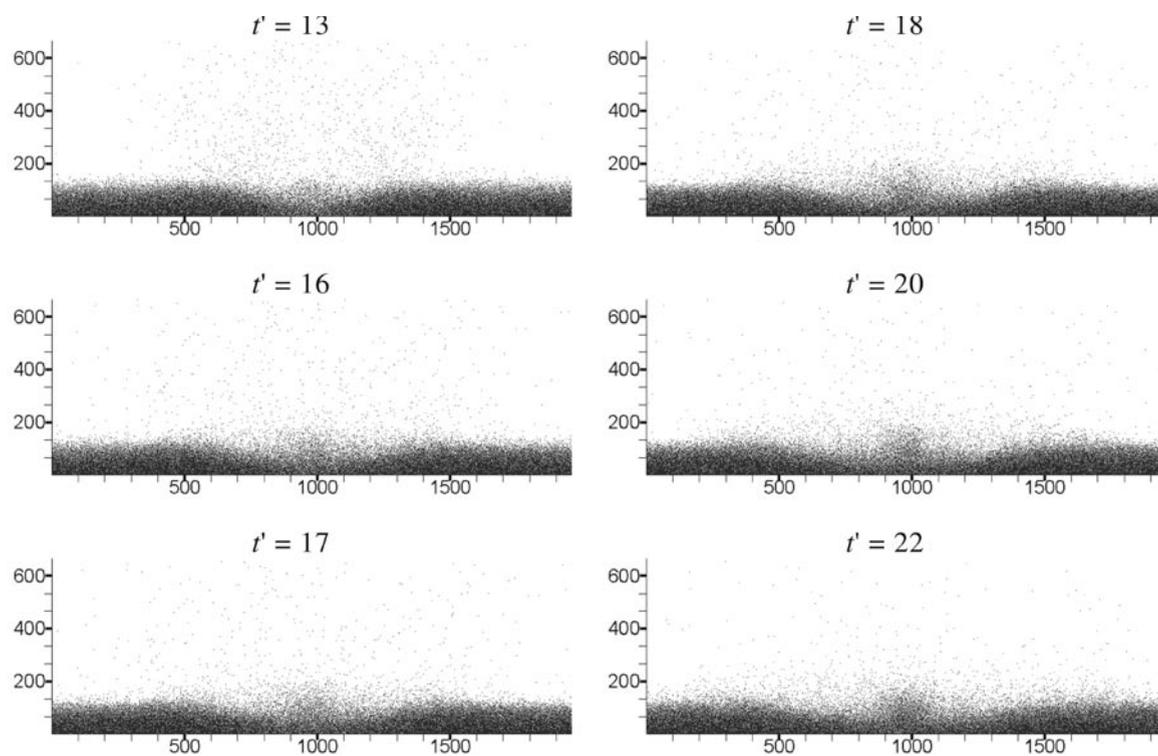


Рис. 4. Временная эволюция подводного взрыва при значениях безразмерного времени $t' = 13 - 22$. По обеим осям отложены координаты частиц (Å) в выбранной системе отсчета

контур расширения области, в которой произошёл взрыв. Расширение наблюдается до момента достижения данной областью поверхностного слоя, что примерно соответствует $t' = 2$. В интервале от момента $t' = 2$ и до $t' = 10$ наблюдается выброс поверхностного слоя частиц, выталкиваемых быстро расширяющейся областью, и образование кратера $t' = 2 - 10$.

С моментом времени $t' = 10$ связан также процесс отхода первых базисных волн в обе стороны от эпицентра. Далее кратер, образованный взрывом, начинает схлопываться, в результате чего в моменты $t' = 10 - 22$ появляется всплеск частиц над областью взрыва. В середине этого процесса, при $t' = 16 - 17$, частицы среды сдвигаются в сторону в продольном направлении, и образуются более сильные волны, достигающие уже края расчетной области после момента времени $t' = 22$.

Заключение

В результате проведенного исследования доказана применимость молекулярно-динамического подхода для изучения подводного взрыва. В рамках молекулярной динамики была разработана процедура, которая моделирует такой взрыв. Разработанная модель позволяет изучать развитие этого быстро протекающего процесса в двумерном пространстве, заполненном жидкостью Леннарда-Джонса. Проведенный расчет динамической структуры подводного взрыва обнаруживает поразительное сходство с известной эволюцией системы: распространение фронта ударной волны с последующим формированием кратера, затем распад ударной волны при достижении границ свободной поверхности и последующий подъем слоя воды над областью взрыва.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Николаевский В.Н. Подводные и подземные взрывы. М.: Мир, 1974. 416 с.
2. Кузнецов В.М. Математические модели взрывного дела. Новосибирск: Изд-во «Наука». Сибирское отделение, 1977. 262 с.
3. Кедринский В.К. Гидродинамика взрыва: эксперимент и модели. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000. 434 с.
4. Седов Л.И. Методы подобия и размерности в механике. М.: Наука, 1977. 440 с.
5. Mader Ch.L. Compressible numerical calculations of underwater detonations (a report). Los Alamos Scientific Laboratory. LA-4594, 1971. 7 p.
6. Mader Ch.L. Detonations near the water surface (a report). LA-4958, UC-34, Los-Alamos, New Mexico, 87544, 1972. 30 p.
7. Sternberg H.M., Walker W.A. Calculated flow and energy distribution following underwater detonation of a pentolite sphere // Physics of Fluids. 1971. Vol. 14, No. 9, pp. 1869-1878.
8. Kot C.A. Intense underwater explosions // Astronautica Acta. 1972. Vol. 17, No. 4-5, pp. 421-433.
9. Pritchett J.W. Incompressible calculations of underwater explosion phenomena // Proc. Second Internat. Conf. on Numerical Methods in Fluid Dynamics. 1971, pp. 422-428.
10. Lennard-Jones J.E. On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas // Proc. Roy. Soc. London A. 1924. Vol. 106, pp. 463-477.
11. Lennard-Jones J.E., Ingham A.E. On the calculation of certain crystal potential constants, and on the cubic crystal of least potential energy // Proc. Roy. Soc. London A. 1925. Vol. 107, pp. 636-653.
12. Lennard-Jones J.E. Cohesion // Proceedings of the Physical Society. 1931. Vol. 43. No. 5, pp. 661-482.
13. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989. 432 с.
14. Gear C.W The numerical integration of ordinary differential equations of various orders. Report ANL 7126, Argonne National Laboratory, 1966. 10 p.
15. Gear C.W Numerical initial value problems in ordinary differential equations. New Jersey: Englewoods Cliffs, Prentice-Hall, 1971. 253 p.
16. Nordsieck, A. On numerical integration of ordinary differential equations // Mathematics of Computation. 1962. Vol. 16, pp. 22-49.
17. Silvestrelli P.L., Parrinello M. Structural, electronic, and bonding properties of liquid water from first principles // J. Chem. Phys. 1999. Vol. 111, pp. 3572-3580.
18. Liem X.D., Tsun-Mei C. Molecular dynamics study of water clusters, liquid, and liquid-vapor interface of water with many-body potentials // J. Chem. Phys. 1997. Vol. 106. No. 19J, pp. 8149-8160.
19. Melker A.I., Vorobyeva M.A. Electronic theory of molecule vibrations // Proceedings of

SPIE. 2006. Vol. 6253:6253.05, pp. 1-15.

20. **Sharma M., Resta R., Car R.** Intermolecular dynamical charge fluctuations in water: a signature of the H-bond network // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 95. P. 187401.

21. **Melker A.I.** Potentials of interatomic interaction in molecular dynamics // *Reviews on Advanced Materials Science.* 2009. Vol. 20. No. 1, pp. 1-13.

22. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular dynamics of underwater explosion // *Proceedings of*

JSC'2010. 2010. P. 83.

23. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular dynamics approach to modeling of underwater explosion // *Proceedings of NDTCS-14.* 2011. P. 37.

24. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular hydrodynamics of underwater explosion // *Materials Physics and Mechanics.* 2012. Vol. 13. No. 2, pp. 147-156.

25. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Structure of shock waves in underwater explosion // *Proceedings of NDTCS-15.* 2013. P. 37.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ИГОЛКИН Сергей Игоревич – аспирант кафедры «Математика и естественнонаучные дисциплины» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
igolson@gmail.com

МЕЛЬКЕР Александр Иосифович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Механика и процессы управления» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
newton@physics.spbstu.com

Igolkin S.I., Melker A.I. MOLECULAR HYDRODYNAMICS OF UNDERWATER EXPLOSION.

In this contribution we report on modeling underwater explosion in the framework of molecular dynamics. We have developed a computer program which allows studying the underwater explosion in two dimensional Lennard-Jones liquid. Calculations of the dynamical structure of underwater explosion displayed the striking resemblance of the underwater-explosion evolution obtained and the real process; namely, generation of a shock wave and its expanding; formation of a cavity; disintegrating the shock wave, when reaching a surface, into two parts which begin to move in the opposite direction parallel to the surface; transforming the cavity into a water crater of an arising water volcano; its activity and decay.

MOLECULAR DYNAMICS METHOD, SHOCK WAVE, UNDERWATER DISTURBANCE, LENNARD-JONES LIQUID, UNDERWATER EXPLOSION.

REFERENCES

1. **Nikolaevskiy V.N.** *Podvodnye i podzemnye vzryvy.* Moscow, Mir, 1974, 416 p. (rus)

2. **Kuznetsov V.M.** *Matematicheskie modeli vzryvnogo dela.* Novosibirsk, Nauka SO, 1977, 262 p. (rus)

3. **Kedrinskiy V.K.** *Gidrodinamika vzryva: eksperiment i modeli.* Novosibirsk, SO RAN, 2000, 434 p. (rus)

4. **Sedov L.I.** *Metody podobiya i razmernosti v mekhanike.* Moscow, Nauka, 1977, 440 p. (rus)

5. **Mader Ch.L.** *Compressible numerical calculations of underwater detonations.* Los Alamos Scientific Laboratory, LA-4594, 1971, 7 p.

6. **Mader Ch.L.** *Detonations near the water surface.* LA-4958, UC-34, Los-Alamos, New Mexico, 87544, 1972, 30 p.

7. **Sternberg H.M., Walker W.A.** Calculated flow and energy distribution following underwater detonation of a pentolite sphere. *Physics of Fluids*, 1971, Vol. 14, No. 9, pp. 1869-1878.

8. **Kot C.A.** Intense underwater explosions. *Astronautica Acta*, 1972, Vol. 17, No. 4-5, pp. 421-433.

9. **Pritchett J.W.** Incompressible calculations of underwater explosion phenomena. *Proc. Second Internat. Conf. on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, 1971, pp. 422-428.

10. **Lennard-Jones J.E.** On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas. *Proc. Roy. Soc. London A*, 1924, Vol. 106, pp. 463-477.

11. **Lennard-Jones J.E., Ingham A.E.** On the

calculation of certain crystal potential constants, and on the cubic crystal of least potential energy. *Proc. Roy. Soc. London A*, 1925, Vol. 107, pp. 636-653.

12. **Lennard-Jones J.E.** Cohesion. *Proceedings of the Physical Society*, 1931, Vol. 43, No. 5, pp. 661-482.

13. **Samarskiy A.A., Gulin A.B.** *Chislennye metody*. Moscow, Nauka, 1989, 432 p. (rus)

14. **Gear C.W.** *The numerical integration of ordinary differential equations of various orders*. Report ANL 7126, Argonne National Laboratory, 1966. 10 p.

15. **Gear C.W.** *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*. NJ, Prentice-Hall, Englewoods Cliffs, 1971, 253 p.

16. **Nordsieck A.** On numerical integration of ordinary differential equations. *Mathematics of Computation*, 1962, Vol. 16, pp. 22-49.

17. **Silvestrelli P.L., Parrinello M.** Structural, electronic, and bonding properties of liquid water from first principles. *J. Chem. Phys.*, 1999, Vol. 111, pp. 3572-3580.

18. **Liem X.D., Tsun-Mei C.** Molecular dynamics study of water clusters, liquid, and liquid-vapor interface of water with many-body

potentials. *J. Chem. Phys.*, 1997, Vol. 106, No. 19J, pp. 8149-8160.

19. **Melker A.I., Vorobyeva M.A.** Electronic theory of molecule vibrations. *Proceedings of SPIE*, 2006, Vol. 6253:6253.05, pp. 1-15.

20. **Sharma M., Resta R., Car R.** Intermolecular dynamical charge fluctuations in water: a signature of the H-bond network. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, Vol. 95. P. 187401.

21. **Melker A.I.** Potentials of interatomic interaction in molecular dynamics. *Reviews on Advanced Materials Science*, 2009, Vol. 20, No. 1, pp. 1-13.

22. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular dynamics of underwater explosion. *Proceedings of JSC'2010*, 2010, P. 83.

23. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular dynamics approach to modeling of underwater explosion. *Proceedings of NDTCS-14*, 2011, P. 37.

24. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular hydrodynamics of underwater explosion. *Materials Physics and Mechanics*, 2012, Vol. 13, No. 2, pp. 147-156.

25. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Structure of shock waves in underwater explosion. *Proceedings of NDTCS-15*, 2013, P. 37.

THE AUTHORS

IGOLKIN Sergei I.

St. Petersburg State Polytechnical University,
 29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
 igolson@gmail.com

MELKER Alexander I.

St. Petersburg State Polytechnical University,
 29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
 newton@physics.spbstu.com

УДК 621.373.826

А.П. Погода ¹, В.М. Петров ²

¹ Балтийский государственный технический университет «Военмех»

² Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

СПЕКТРАЛЬНАЯ СЕЛЕКТИВНОСТЬ ОТРАЖАТЕЛЬНЫХ ГОЛОГРАММ В КРИСТАЛЛЕ $\text{BaTiO}_3:\text{Co}$

Проведено экспериментальное исследование спектральной селективности отражательных решеток показателя преломления в кристалле $\text{BaTiO}_3:\text{Co}$. Предложена методика измерения спектральной селективности толстых отражательных голограмм, позволяющая производить прямое измерение спектральной селективности решетки с помощью считывающего лазера, перестраиваемого по длине волны. Получено хорошее согласие расчета с результатами измерений.

ГОЛОГРАФИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА, СПЕКТРАЛЬНАЯ СЕЛЕКТИВНОСТЬ, ДИНАМИЧЕСКАЯ ГОЛОГРАФИЧЕСКАЯ СРЕДА.

Спектральная селективность объемных голограмм, возникающих в активной среде твердотельных лазеров, способствует сужению полосы генерации таких лазеров. Подобные голограммы образуются в результате многократного прохождения излучения через среду и образования в ней стоячей интерференционной картины. Такая картина приводит к возникновению набора взаимосвязанных решеток: коэффициента усиления, коэффициента поглощения и показателя преломления активного вещества. Все эти решетки имеют одинаковый период, но в общем случае могут иметь фазовый сдвиг относительно исходной интерференционной картины.

Образованные в активной среде лазера пространственные решетки по своим физическим свойствам являются толстыми отражательными голограммами. Благодаря высоким спектральным селективным свойствам, такие голограммы работают как оптические спектральные фильтры и существенно влияют на характеристики излучения, в том числе на ширину полосы генерации лазера. Например, как показал эксперимент в работе [1], наличие отра-

жательных голограмм толщиной до 11 см в активном элементе оказывает существенное влияние на характеристики излучения лазеров, реализующих явление обращения волнового фронта.

Из теории связанных волн Когельника [2] следует, что спектральная селективность отражательной голограммы $\delta\lambda$ определяется выражением

$$\delta\lambda / \lambda = \Lambda / T, \quad (1)$$

где Λ – период решетки; T – толщина голограммы; λ – длина волны излучения, взаимодействующего с решеткой.

Экспериментальное подтверждение зависимости (1) является одной из целей представленной работы.

Ранее [3] нами был рассмотрен импульсный голографический Nd-YAG лазер, генерирующий излучение с длиной волны 1064 нм, в активном элементе которого возникают решетки коэффициента усиления. Достоверная оценка спектральной селективности решеток в таком лазере имеет принципиальное значение для его практических применений. В работе [1] была экспериментально подтверждена достовер-



ность обратно пропорциональной зависимости ширины полосы генерации от толщины голограммы. При этом спектральная селективность решеток измерялась путем исследования ширины полосы генерации лазера.

Другие работы, посвященные прямой проверке соотношения (1), нам не известны. Ввиду этого в настоящей работе проведено непосредственное экспериментальное исследование спектральной селективности отражательных решеток в зависимости от их толщины и произведено сравнение результатов с теоретическими расчетами, полученными на основании теории Когельника.

Методика измерения спектральной селективности решеток

Для того чтобы произвести прямое экспериментальное исследование спектральной селективности решетки, необходимо использовать широкополосный источник излучения или перестраиваемый по длине волны лазер, причем использование лазера предпочтительнее ввиду высокой спектральной плотности яркости его излучения. Очевидно, что спектральная область чув-

ствительности материала должна совпадать с диапазоном излучения лазера, используемого для записи решеток. В настоящее время доступны лазеры с излучением в инфракрасной (ИК) области спектра, перестраиваемые в диапазоне 1,5 – 1,6 мкм. Использовать данные длины волн для записи голограмм невозможно из-за отсутствия материалов, чувствительных к длинам волн инфракрасного диапазона. Отсюда возникает необходимость такой экспериментальной методики, которая бы позволяла создавать решетки, отвечающие условиям Брэгга в отражательной геометрии из указанного диапазона длин волн. Поэтому нами была использована схема, позволяющая записывать голограмму излучением зеленой области спектра, к которому светочувствительны многие материалы, а за счет выбора угла между записывающими лучами подстраивать период решетки под условия считывания отражательной геометрии (рис. 1). Такие схемы успешно используются для изготовления оптических фильтров [4, 5].

Действительно, голограмма может быть записана способом, показанным на рис. 1. В этом случае период решетки $\Lambda = \lambda_w / 2\sin\theta$. Чтобы обеспечить дифракцию на такой го-

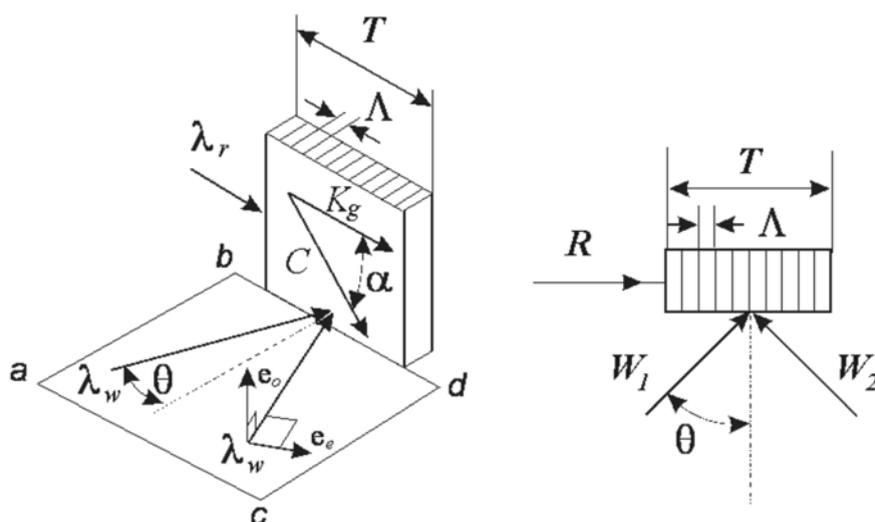


Рис. 1. Геометрия эксперимента (в двух проекциях):

W_1, W_2 – записывающие лазерные пучки с длиной волны λ_w ; R – считывающий луч с λ_r ;
 $abcd$ – плоскость падения записывающих лучей; Λ, T, K_g – период, толщина и волновой вектор решетки;
 C – оптическая ось кристалла; e_o, e_e – векторы поляризации обыкновенного и необыкновенного лучей;
 θ – угол падения записывающего луча; α – угол между вектором K_g и осью C (обеспечивает наибольшую эффективность записи решетки за счет фоторефрактивного эффекта)

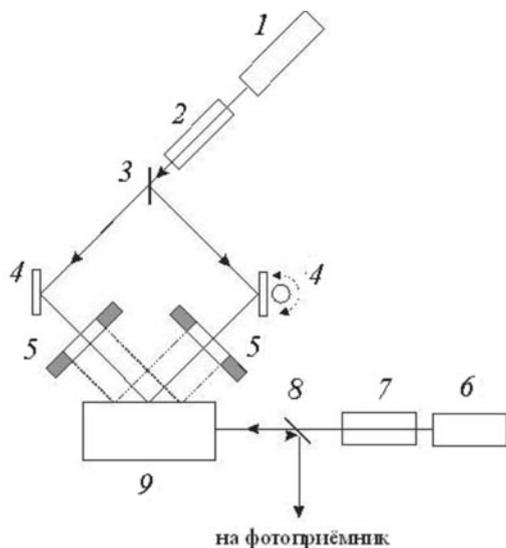


Рис. 2. Схема экспериментальной установки:
 1 – Nd-YAG- лазер с удвоением частоты;
 2, 7 – расширители пучка; 3, 8 – светоделители;
 4 – зеркала (одно из них помещено на вращающуюся станину); 5 – диафрагма с перестраиваемым диаметром; 6 – перестраиваемый ИК лазер;
 9 – кристалл ВаTiO₃:Co

логограмме в отражательной геометрии, необходимо выполнить условия Брэгга:

$$\lambda_r = 2 \Lambda n,$$

где n – показатель преломления вещества на длине волны считывающего излучения.

Примечательно, что длина волны излучения, осуществляющего запись, не зависит от показателя преломления, так как при записи пропускающей решетки уменьшение

в n раз скорости прохождения волны в среде приводит к сжатию максимумов распределения интенсивности решетки вдоль их направления, то есть пространственное распределение минимумов и максимумов решетки в кристалле, а значит и период, не изменяются. В случае же уменьшения в n раз скорости прохождения считывающей волны период решетки изменяется, поэтому длина этой волны зависит от показателя преломления. Однако поскольку угол между считывающей волной и опорной близок к прямому, его синус можно полагать равным единице.

Очевидно, что данная схема позволяет отдельно исследовать процессы, связанные как с записью, так и со считыванием. Выбирая нужным образом длину волны записывающего света и угол между записывающими лучами, мы можем записать голограмму с периодом решетки, отвечающим условию резонанса:

$$\Lambda = \lambda_w / 2 \sin \theta = \lambda_r / 2n.$$

Схема эксперимента представлена на рис. 2.

Экспериментальное исследование решеток с различными параметрами приводит к необходимости использовать материалы, в которых возможна быстрая перезапись решеток, так как это значительно сокращает время измерений. Таким материалом в нашем случае являлся кристалл титаната бария.

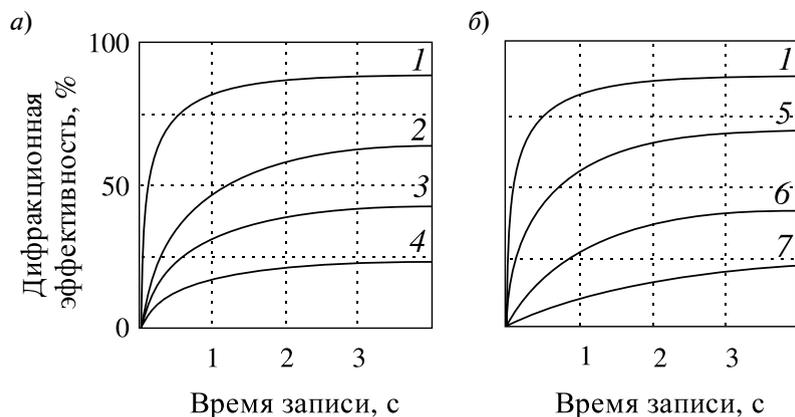


Рис. 3. Зависимости дифракционной эффективности голограмм от времени записи при различных интенсивностях I_w (а) и при значениях контраста m (б) записывающего излучения; а – значения I_w , МВт/см²: 25 (1), 18 (2), 7 (3), 2 (4); $m = 0,98$; б – значения m : 0,98 (1), 0,92 (5), 0,56 (6), 0,28 (7); $I_w = 25$ МВт/см²

В качестве материала, в котором проводилась запись решеток, использовался титанат бария, легированный кобальтом ($\text{BaTiO}_3:\text{Co}$); это были два образца кристалла размерами $3 \times 4 \times 6$ мм и $3 \times 4 \times 10$ мм; легирование кобальтом составляло 0,2 и 0,1 % вес. соответственно. На рис. 3 представлены осциллограммы, показывающие зависимости дифракционной эффективности η от времени записи при различных интенсивностях записывающего излучения и различных значениях контраста. Отметим, что характерная длительность записи голограммы составляла около 3 с, а дифракционная эффективность в некоторых экспериментах достигала 85 – 90 %.

Запись решеток в кристалле осуществлялась излучением твердотельного Nd-YAG лазера, преобразованным во вторую гармонику ($\lambda_w = 532$ нм). Записывающие пучки пересекались под углом 2θ так, что биссектриса угла их пересечения совпадала с нормалью к освещаемой плоскости кристалла. В этом случае волновой вектор записанной голограммы ориентирован параллельно этой плоскости. Считывание голографических решеток проводилось вдоль длинной стороны кристалла, при этом на соответствующе грани было нанесено антиотражающее интерференционное покрытие. Считывание производилось в отражательной геометрии перестраиваемым полупроводниковым лазером с диапазоном

излучения 1456 – 1583 нм. Считывающий пучок дифрагировал на толстой голограмме, в результате чего нулевой порядок дифракции проходил сквозь кристалл, а первый порядок – отражался. Интенсивность отраженного света измерялась широкополосным инфракрасным фотоприемником; измерялась также интенсивность падающего света. Отношение этих величин задавало дифракционную эффективность записанной решетки.

За меру спектральной селективности голограммы принималась ширина главного максимума на зависимости дифракционной эффективности от длины волны считывающего излучения – это разность длин волн между центральным максимумом и первым минимумом.

Экспериментальные результаты

Были получены экспериментальные зависимости дифракционной эффективности решетки от длины волны считывающего света для толщин решеток T в диапазоне от 2 до 9 мм. Примеры таких зависимостей для значений $T = 9$ и 5 мм показаны на рис. 4.

Теоретические расчеты зависимостей дифракционной эффективности от длины волны проводился в соответствии с теорией Когельника (см. соотношения (2) и (3)) для случая стационарной решетки, когда дифракционную эффективность решетки можно считать постоянной:

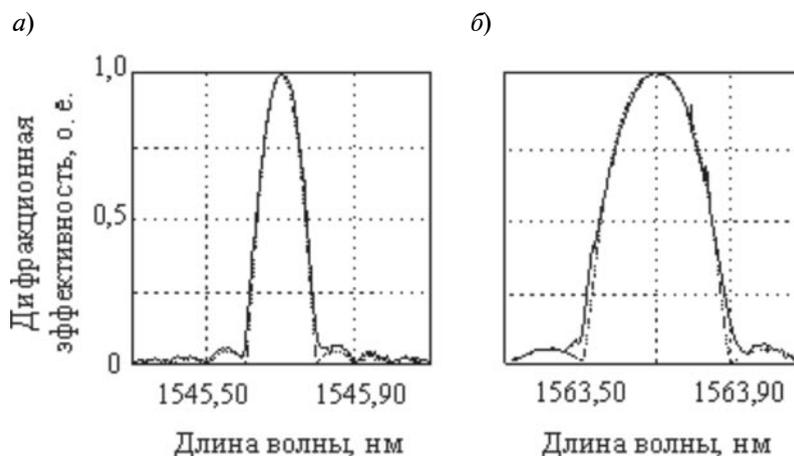


Рис. 4. Зависимости дифракционной эффективности голограмм от длины волны считывающего излучения при значениях толщины решетки $T = 9$ мм (а) и 5 мм (б). Экспериментальные кривые аппроксимированы расчетными (пунктир) согласно теории Когельника

$$\eta = \left\{ \left(\frac{\xi_r}{v_r} \right)^2 + \left[1 - \left(\frac{\xi_r}{v_r} \right)^2 \right] \times \right. \\ \left. \times \operatorname{cth}^2(\sqrt{v_r^2 - \xi_r^2}) \right\}^{-1}, \quad (2)$$

где

$$\xi_r = \frac{\Gamma T}{2 \sin \theta_0}; \quad (3a)$$

$$v_r = \frac{\pi n_1 T}{\lambda \sin \theta_0}. \quad (3b)$$

Из экспериментально измеренной величины дифракционной эффективности была получена оценка амплитуды решетки n_1 . Напомним, что $\sin \theta_0 = 1$ (см. рис. 1). Величина Γ в данном случае является варьируемым параметром, который можно определить из величины спектральной селективности решетки.

На следующем этапе по этим зависимостям (см. рис. 4) была определена спектральная селективность $\delta\lambda$ решетки как разность между длиной волны максимума дифракционной эффективности и длиной волны, соответствующей первому минимуму.

В наших экспериментах вариация толщины решетки (0 – 10 мм) достигалась изменением ширины пучков, записывающих голограмму. Для этого указанные пучки

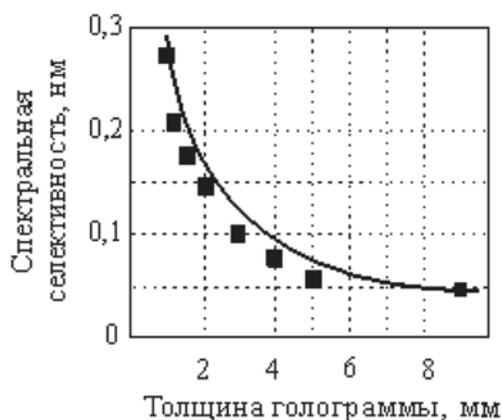


Рис. 5. Экспериментальная (символы) и теоретическая (линия) зависимости спектральной селективности отражательной голограммы от толщины решетки; $\lambda = 1,5$ мкм, $n = 2,4$

пропускались через щели с зазором, перестраиваемым в данном диапазоне. Данное дополнение отличает схему от приведенной в работе [4].

На рис. 5 представлена полученная нами экспериментальная зависимость спектральной селективности решеток показателя преломления от толщины голограммы, а также теоретическая кривая, рассчитанная по теории Когельника согласно соотношению (1), где $\Lambda = \lambda/2n$. Отсюда следует, что спектральная селективность следует выражению

$$\delta\lambda = \lambda^2/2nT.$$

Видно, что экспериментальные точки хорошо ложатся на кривую, полученную теоретическим расчетом.

Обсуждение и выводы

В результате проведенной работы представлена оригинальная методика создания объемных отражательных голограмм с управляемыми параметрами в кристалле и измерения их спектральной селективности. Особенностью данной методики является запись и считывание голограммы в ортогональной геометрии, что позволяет использовать для записи и считывания два независимых источника излучения. Эта независимость позволяет нам выбрать для записи источник с длиной волны, находящейся в области максимальной чувствительности материала. Для считывания используется перестраиваемый по длине волны источник, причем его длина волны может существенно отличаться от длины волны записывающего лазера.

Оригинальная геометрия записи и считывания решеток дала возможность измерить зависимость дифракционной эффективности голограммы от длины волны считывающего излучения. Это позволяет сделать выводы о спектральной селективности решеток в кристалле. Получено соответствие результатов эксперимента и теоретического расчета зависимости спектральной селективности от толщины решетки. Продемонстрировано, что при изменении толщины отражательной решетки от 1 до 9 мм ее спектральная селективность



изменяется примерно от 275 до 52 пм, что соответствует изменению ширины частотной полосы отраженного излучения от 33,1 до 6,5 ГГц.

Разработанная методика дает возможность оценить ширину полосы генерации лазера, в активной среде которого формируются пространственные решетки.

Сравнивая результаты проделанной работы с результатами статьи [1], можно отметить следующее. Нами в этой работе исследовались решетки показателя преломления, причем толщина решетки изменялась в диапазоне от 1 до 9 мм, тогда как в работе [1] – решетки коэффициента

усиления толщиной от 35 до 105 мм. Кроме того, различались методики измерения спектральной селективности: в этой работе проводилось прямое измерение параметров контура дифракционной эффективности, тогда как в работе [1] оценка спектральной селективности проводилась путем измерения ширины полосы генерации лазера, в активном элементе которого образованы решетки. На основании проведенного сравнения можно заключить, что спектральная селективность решеток определяется исключительно их геометрическими параметрами – толщиной и периодом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Погода А.П., Ермолаев А.А., Лебедев В.Ф., Сметанин С.Н., Борейшо А.С. Спектральная селективность голографических решеток коэффициента усиления в мощном твердотельном лазере с петлевым резонатором // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 2(170). С. 121–129.

2. Кольер Р., Беркхарт К., Лин Л. Оптическая голография. М.: Мир, 1973. 686 с.

3. Pogoda A.P., Lebedeva T.B., Yusupov M.R., Liventsov R.A., Lebedev V.F., Boreysho A.S., Gavrilo A.V., Smetanin S.N., Fedin A.V. High power Nd:YAG laser with self-pumped phase-conjugate

loop cavity and repetitive pulsed diode-matrix side-pumping // Proc. SPIE. 2013. Vol. 8677. P. 86770Z.

4. Петров В.М., Лихтенберг С., Шамрай А. Спектральный оптический фильтр с управляемой передаточной характеристикой на основе динамических объемных голограмм в титанате бария // ЖТФ. 2004. Т. 74. № 12. С. 56–60.

5. Breer S., Buse K. Wavelength demultiplexing with volume phase holograms in photorefractive lithium niobate // Appl. Phys. B. 1998. Vol. 66, pp. 339–345.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПОГОДА Анастасия Павловна – ассистент кафедры И1 «Лазерная техника» Балтийского государственного технического университета «Военмех» им. Д.Ф. Устинова.

190005, Россия, г. Санкт-Петербург, Красноармейская ул., 1
pogoda@systems.ru

ПЕТРОВ Виктор Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vikpetrov@mail.ru

Pogoda A.P., Petrov V.M. THE SPECTRAL SELECTIVITY OF REFLECTIVE HOLOGRAPHIC GRATINGS IN THE BaTiO₃: Co CRYSTAL.

The spectral selectivity of refractive-index gratings in the BaTiO₃: Co crystal has been investigated. A new technique for the spectral selectivity measurement of thick reflective holograms was suggested. That technique allowed direct measurement of the spectral selectivity of gratings using a tunable wavelength laser reader. A good agreement between experimental data and theoretical calculations was obtained.

HOLOGRAPHIC GRATING, SPECTRAL SELECTIVITY, DYNAMIC HOLOGRAPHIC MEDIUM.

REFERENCES

1. **Pogoda A.P., Ermolaev A.A., Lebedev V.F., Smetanin S.N., Boreysho A.S.** Spectral selectivity of holographic gain gratings in the multiloop cavity laser. *St. Petersburg Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2013, No. 2 (170), pp. 121-129. (rus)
2. **Collier R.J., Burkhardt C.B., Lin L.H.** *Opticheskaya golografiya* [Optical Holography]. Moscow, Mir, 1973. 686 p. (rus)
3. **Pogoda A.P., Lebedeva T.B., Yusupov M.R., Liventsov R.A., Lebedev V.F., Boreysho A.S., Gavrilov A.V., Smetanin S.N., Fedin A.V.** High power Nd:YAG laser with self-pumped phase-conjugate loop cavity and repetitive pulsed diode-matrix side-pumping. *Proc. SPIE*, 2013, Vol. 8677, P. 86770Z.
4. **Petrov V.M., Likhtenberg S., Shamray A.** Spektral'nyy opticheskiy fil'tr s upravlyаемой peredatochnoy kharakteristikoy na osnove dinamicheskikh ob'emnykh gologramm v titanate bariya. *ZhTF*, 2004, Vol. 74, No. 12, pp. 56-60. (rus)
5. **Breer S., Buse K.** Wavelength demultiplexing with volume phase holograms in photorefractive lithium niobate. *Appl. Phys. B*, 1998, Vol. 66, pp. 339-345.

THE AUTHORS

POGODA Anastasiya P.

Baltic State Technical University,
1st Krasnoarmeyskaya St., St. Petersburg, 190005, Russia
pogoda@lsystems.ru

PETROV Viktor M.

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
vikpetrov@mail.ru



УДК 537.876.22

С.Н. Семенов, С.И. Воробьев, В.И. Дудкин

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

МЕТОДИКА ПОСТРОЕНИЯ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ ОБЪЕКТА С ПРИМЕНЕНИЕМ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ

В статье рассматривается методика расчета электромагнитного поля для построения микроволнового изображения объекта. Представленная методика протестирована на экспериментальной установке АМУ256. Доказана возможность построения микроволнового изображения в режиме реального времени на используемой установке.

АМПЛИТУДА ПОЛЯ, МИКРОВОЛНОВОЕ ИЗОБРАЖЕНИЕ ОБЪЕКТА, ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ДИФРАКЦИИ, РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ.

Задача о построении микроволнового изображения в настоящее время приобретает большую популярность в связи с быстрым развитием вычислительной техники. Физические основы метода такого построения были заложены еще в 1960-е годы и основаны на успешных работах в области голографии.

Целью данной работы является разработка методики построения изображения в микроволновом диапазоне длин волн и поиск полезных практических применений полученного метода.

Для построения микроволнового изображения решалась обратная задача дифракции. Дифракционная задача имеет два этапа: так называемые прямая и обратная задачи. Первая заключается в поиске распределения комплексной амплитуды в плоскости z от рассеянной на неоднородности плоской либо сферической волны. Обратная задача по распределению комплексной амплитуды в плоскости z восстанавливает неоднородность, рассеивающую волну. Микроволновым изображением мы будем называть распределение комплексной амплитуды в заданной плоскости пространства в микроволновом диапазоне [1], а микроволновым изображением объекта — набор точек из одного или нескольких микроволновых изображений, соответствующих геометрическому расположению на поверхности исследуемого объекта. Исходными данными для вычисления микроволнового изображения

служат расположение исследуемого объекта, а также приемников и передатчиков экспериментальной установки в избранной системе координат. На рис. 1 представлена схема их взаимного расположения.

Распределение комплексных амплитуд мы будем вычислять, исходя из системы координат, а также конфигурации приемников и передатчиков в плоскостях $z = \text{const}$.

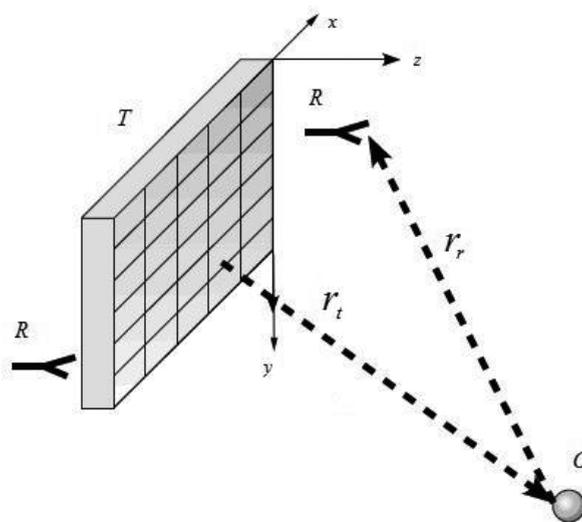


Рис. 1. Схема взаимного расположения объекта (O), плоскости решетки передатчиков (T) и приемных антенн (R) в избранной системе координат; пунктирами показаны направления распространения электромагнитных волн; r_t , r_r — расстояния от передающей антенны до объекта и от объекта до приемной антенны, соответственно

Для вычисления указанного распределения нам необходимо знать таковое для комплексных амплитуд в эталонной плоскости. За последнюю принималась плоскость, в которой распределение комплексных амплитуд известно. В качестве эталонной выбрана плоскость решетки передатчиков (ее координата z принята равной нулю). Для определения поля $p(x, y, z)$ в плоскости $z = \text{const}$ используем следующее выражение [1]:

$$p(x, y, z) = \frac{1}{i\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} p(x', y', 0) \frac{e^{ikr}}{r} dx' dy', \quad (1)$$

где $p(x', y', 0)$ – поле в плоскости $z = 0$; λ – длина волны электромагнитного излучения; k – модуль волнового вектора; r – характерное расстояние между объектом и передающим элементом,

$$r = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + z^2}. \quad (2)$$

Выражение (1) является сверткой поля в плоскости $z = 0$ с импульсным откликом свободного пространства e^{ikr} / r . С физической точки зрения это выражение отражает принцип Гюйенса–Френеля в интеграль-

ном виде.

Эксперименты проводились на экспериментальной установке АМУ256 (рис. 2), основой которой являлся антенный массив 1, состоящий из 256 элементарных излучателей, генерирующих микроволновое излучение в диапазоне 8–18 ГГц. Конструкция системы также включала две приемные антенны 2 и видеосистему 3 (две видеокамеры). В качестве спектра излучения был выбран набор из 14 эквидистантных частот.

Для компьютерного расчета поля была произведена дискретизация формулы (1):

$$E(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{13} \sum_{i=0}^{255} f_k E_0(f_k)_{i,j} \times \exp\left(\frac{-2\pi i f_k}{c} (r_{ii} + r_{ij})\right), \quad (3)$$

где $E(\mathbf{r})$ – поле в точке с радиус-вектором \mathbf{r} ; f_k – излучаемая частота; $E_0(f_k)_{i,j}$ – напряженность поля на антенне от i -го передатчика на j -м приемнике и на k -й частоте; c – скорость света в вакууме; r_{ii} , r_{ij} – оптические пути до и после рассеяния, соответственно.

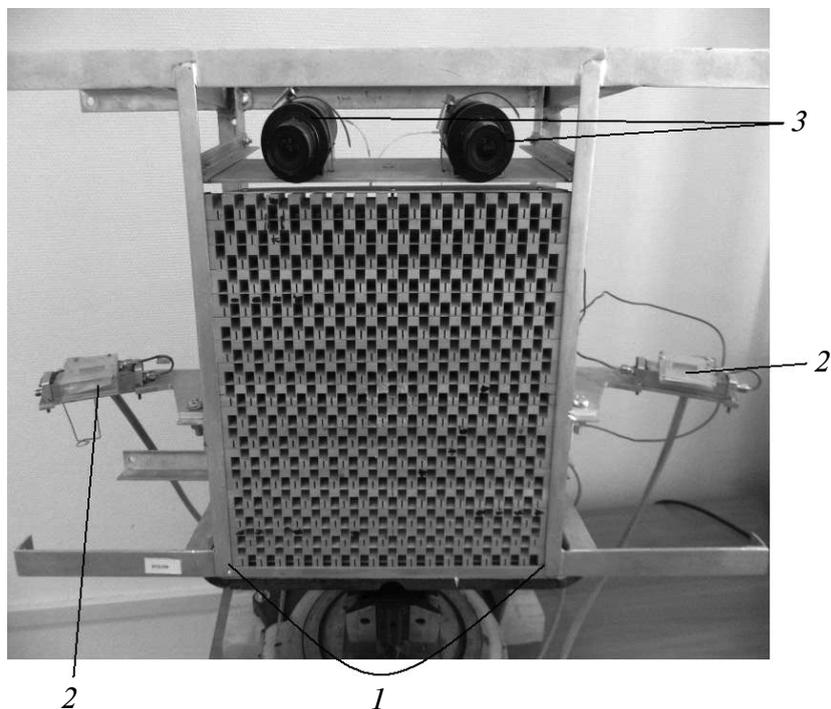


Рис. 2. Фотография экспериментальной установки АМУ256: 1 – массив передающих антенн, 2 – две приемные антенны, 3 – видеосистема



В экспериментах по построению микроволнового изображения задавалась область видимости системы – ограниченная область пространства, в которой находится исследуемый объект. Ее границы определялись зоной видимости видеосистемы. В момент, когда исследуемый объект оказывается в области видимости, видеосистема его «захватывает» и определяет у него центральную точку (это точка, по координатам которой определяется центр той подобласти пространства, где восстанавливается поле). Данная подобласть представляет собой прямоугольный параллелепипед с заранее известными размерами (высота, ширина, глубина). В нем задается сетка точек (имеет равномерный шаг для каждого направления), в которых вычисляется комплексная амплитуда поля. Вычисленные комплексные амплитуды определяют набор микроволновых изображений, т. е. плоскостей с известным распределением поля. Этот набор вычисляется для каждой приемной антенны в одних и тех же точках пространства. В итоге для каждой приемной антенны мы получаем набор микроволновых изображений. Затем эти наборы для дальнейшей обработки объединяются в один набор по следующей формуле:

$$\text{Amp}_i = \sqrt{k * \text{Amp}_{0,i} + (1 - k) * \text{Amp}_{1,i}}, \quad (4)$$

где Amp_i – модуль комплексной амплитуды поля в объединенном наборе в i -й точке восстановления; $\text{Amp}_{0,i}$, $\text{Amp}_{1,i}$ – модули комплексной амплитуды на нулевой и первой приемных антеннах, соответственно (в той же точке восстановления); k – коэффициент баланса между приемными антеннами.

В наших измерениях коэффициент баланса принимался равным 0,5. После процесса объединения микроволновых изображений в один набор, производилась фильтрация поля по модулю амплитуды. Фильтрация представляла собой отброс тех точек пространства, в которых модуль комплексной амплитуды поля не превышал заранее установленного порога, поскольку точки с малыми амплитудами были, по сути, шумами восстановления и не несли информации о формируемых микроволновых изображениях. В результате процесса

фильтрации оставалось примерно 5 % от начального количества точек. По полученному после фильтрации объединенному набору микроволновых изображений необходимо было определить микроволновое изображение объекта. С этой целью в параллелепипеде, в котором производилось вычисление поля, выбирались линии преимущественного направления, проходящие через точки с идентичными координатами по ширине и высоте. В системе отсчета установки линии преимущественного направления совпадали с направлением оси z , а координаты, отвечающие ширине и высоте, соответствовали осям координат x и y соответственно. Каждая линия преимущественного направления была перпендикулярна микроволновым изображениям, т. е. перпендикулярна плоскостям, в которых восстанавливалась комплексная амплитуда поля. Вдоль каждой линии определялась точка с наибольшей по модулю комплексной амплитудой. Множество точек, в котором модуль комплексной амплитуды поля принимал максимальное значение по преимущественному направлению, принималось за микроволновое изображение объекта.

Для ускорения вычислений комплексной амплитуды поля по формуле (2) была использована технология параллельных вычислений CUDA и ATI Stream. Это дало возможность исследовать микроволновые изображения не только покоящихся объектов, но и движущихся со скоростью до 4 – 5 км/ч.

Эксперименты по построению микроволнового изображения объекта проводились на неподвижных и движущихся целях. Перед началом измерений проводилась калибровка экспериментальной установки. Процесс калибровки заключался в измерении распределения комплексной амплитуды поля в эталонной плоскости, т. е. в плоскости с координатой $z = 0$. Для измерения распределения комплексной амплитуды поля, в эталонной плоскости размещался точечный рассеиватель (металлический шарик) в положение с известными пространственными координатами. Для повышения точности, измерения с точечным рассеивателем производились несколько раз с их последующим усреднением. Полученная

калибровка экспериментальной установки замерялась один раз, затем использовалась во всех дальнейших испытаниях и не требовала повторных измерений.

Для экспериментов выбирались объекты из материалов с достаточно хорошими рассеивающими свойствами в микроволновом диапазоне. Такими свойствами обладают металлы, соляные растворы; кроме того, что представляет главную цель, — тела людей и животных. Эксперименты проводились с манекенами, т. е. с макетами человеческих тел (рис. 3, *а*) для стационарных случаев и с людьми — в движении. Стационарные случаи включали два этапа: на первом в зоне видимости системы помещали только один манекен, на втором — два.

На первом указанном этапе видеосистема производила «захват» исследуемого объекта, затем в соответствующем блоке установки вычислялась его центральная точка. По этой точке строился параллелепипед, в котором восстанавливалось микроволновое поле. Микроволновое изображение объекта визуализировалось в отдельном окне на дисплее монитора. В наших экспериментах манекены размещались на разных участках зоны видимости системы. Для микроволновых изображений манекенов при их одинаковых геометрических положениях в зоне видимости системы были характерны следующие общие свойства:

изображение не менялось по x -координате и по фиксированной z -координате

при различных положениях манекена;

качество изображения постепенно снижалось при увеличении расстояния по z -координате между системой и манекеном.

На втором этапе стационарного случая, как уже отмечалось, в зону видимости системы мы помещали одновременно два манекена. Было установлено, что на микроволновое изображение одного из манекенов наличие второго никак не влияет, если расстояние между ними составляет не менее 30 см и манекены не перекрывают друг друга по углу обзора. На рис. 3, *б* представлены микроволновые изображения макетов человеческого тела на расстоянии примерно 180 см от экспериментальной установки (взаимное расположение объектов приведено на рис. 3, *а*). Яркие круги на микроволновых изображениях манекенов соответствовали наибольшей величине модуля комплексной амплитуды поля. Небольшое (но по порогу допустимое) значение модуля комплексной амплитуды поля наблюдалось для каждого манекена по краям. Параллелепипед, в котором расположены микроволновые изображения манекенов (рис. 3, *б*), — это область видимости системы. В представленных условиях эксперимента размеры параллелепипеда составляли $2 \times 1 \times 3$ м по координатам x, y, z соответственно.

В экспериментах с двигающимися людьми размер области видимости системы составлял $2,5 \times 1,5 \times 5,0$ м по координатам x, y, z соответственно. При скорости обработки

а)



б)

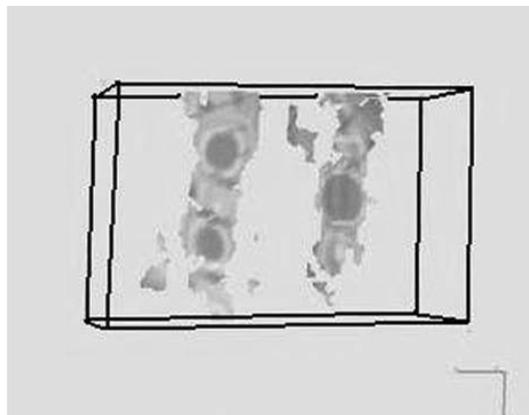


Рис. 3. Используемые макеты человеческих тел, обернутые в фольгу для создания рассеивающих свойств (*а*), и их микроволновые изображения (позиции объектов — те же самые) (*б*).
Размеры параллелепипеда — $2 \times 1 \times 3$ м

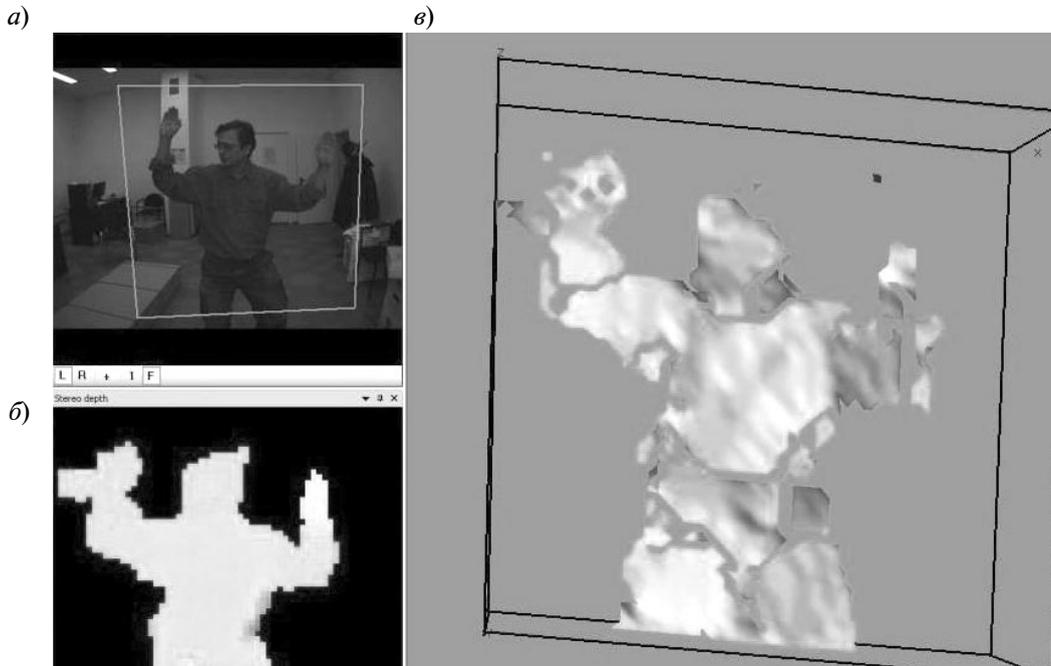


Рис. 4. Получение микроволнового изображения движущегося человека с помощью установки АМУ256:

а – ракурс с одной из видеокамер, *б* – изображение с видеосистемы, *в* – микроволновое изображение

данных в 10 – 12 кадр./с допустимая скорость человека в зоне видимости системы была 4 – 5 км/ч. На рис. 4 представлен интерфейс программы обработки данных на установке АМУ256. Видно, что микроволновое изображение человека окрашено более равномерно, чем манекена. Это означает, что модуль комплексной амплитуды поля не имеет яркой выраженной тенденции убывать по мере приближения к краям объекта.

Итак, в настоящей статье описана методика построения микроволнового изображения объекта. Представленная методика была успешно применена в методах поиска диэлектрических объектов на теле человека [2, 3].

В работах [4, 5] представлено использо-

вание аналогичной методики. В частности, в докладе [4] авторы предложили ее использовать для поиска металлических объектов под одеждой; был выбран частотный диапазон 72 – 80 ГГц. В статье [5] было предложено внедрить методику в прибор видения при плохих метеоусловиях (35 ГГц).

Разработанная нами методика была успешно внедрена в установку АМУ-256×2. Работа выполнена в рамках программы «Фонд содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере» (НИОКР по проекту № 9677 «Разработка установки для обнаружения предметов, скрытых на теле человека», государственный контракт №7232р/9677 от 30.07.2009 г).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зверев В.А. Физические основы формирования изображений волновыми полями. Нижний Новгород: ИПФ РАН, 1998. 252 с.
2. Аверианов В.П., Кузнецов А.В. Способ дистанционного досмотра цели в контролируемой области пространства. Патент № 2294549, РФ. 2005. 13 с.
3. Аверианов В.П., Воробьев С.И., Горшков И.Ю. Способ определения диэлектрической

проницаемости диэлектрического объекта. Патент № 2408005, РФ. 2008. 6 с.

4. Longstaff I. D., Ashoka H., AbuShaaban M., Beere W., Liu X. A longer range body scanner // 6th EMRS DTC Technical Conference. Edinburgh 2009, A8, 7 p .

5. Sherif Sayed Ahmed, Andreas Schiessl, Lorenz-Peter Schmidt. Novel fully electronic active real-time millimeter-wave imaging sys-

tem based on a planar multistatic sparse array // Microwave Symposium Digest (MTT), 2011
IEEE MTT-S International. June 5–10, 2011, pp. 1-4.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СЕМЕНОВ Семён Николаевич – аспирант кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ussrcom@mail.ru

ВОРОБЬЕВ Станислав Игоревич – аспирант кафедры распределенных вычислений и компьютерных сетей Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
s.vorobjev@gmail.com

ДУДКИН Валентин Иванович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
vidoodkin@mail.ru

Semenov S.N., Vorobyov S.I., Dudkin V.I. CONSTRUCTING A MICROWAVE IMAGE OF AN OBJECT USING THE INVERSE DIFFRACTION PROBLEM.

The paper designs a calculation procedure for the electromagnetic field to construct a microwave image of an object. The procedure suggested was tested with the AMU256 experimental setup. We proved it was possible to create the construction required in real-time using this setup.

FIELD AMPLITUDE, MICROWAVE IMAGE OF OBJECT, INVERSE DIFFRACTION PROBLEM, CALCULATION OF ELECTROMAGNETIC FIELD.

REFERENCES

1. **Zverev V.A.** *Fizicheskie osnovy formirovaniya izobrazheniy volnovymi polyami.* Nizhny Novgorod: IPF RAN, 1998, 252 p. (rus)

2. **Averianov V.P., Kuznetsov A.V.** Sposob distantsionnogo dosmotra tseli v kontroliruemoy oblasti prostranstva. *Patent No. 2294549, RF, 2005, 13 p. (rus)*

3. **Averianov V.P., Vorob'ev S.I., Gorshkov I.Yu.** Sposob opredeleniya dielektricheskoy pronitsaemosti dielektricheskogo ob'ekta. *Patent No. 2408005, RF, 2008, 6 p. (rus)*

4. **Longstaff I. D., Ashoka H., AbuShaaban M., Beere W., Liu X.** A longer range body scanner. *6th EMRS DTC Technical Conference.* Edinburgh 2009, A8, 7 p.

5. **Sherif Sayed Ahmed, Andreas Schiessl, Lorenz-Peter Schmidt.** Novel fully electronic active real-time millimeter-wave imaging system based on a planar multistatic sparse array. *Microwave Symposium Digest (MTT), 2011 IEEE MTT-S International.* June 5–10, 2011, pp. 1-4.

THE AUTHORS

SEMENOV Semen N.

St. Petersburg State Polytechnical University,
29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.
ussrcom@mail.ru

VOROB'YEV Stanislav I.

St. Petersburg State Polytechnical University,
29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.
s.vorobjev@gmail.com

DUDKIN Valentin I.

St. Petersburg State Polytechnical University,
29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.
vidoodkin@mail.ru

УДК 577.322.4

К.А. Мирошников¹, М.Н. Симакова²¹ Институт биоорганической химии
им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН² Военно-космическая академия им. А. Ф. Можайского
(филиал, г. Ярославль)

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ЛИТИЧЕСКОГО ФЕРМЕНТА gp181 БАКТЕРИОФАГА phiKZ

В данной работе исследован белок gp181 бактериофага phiKZ *Pseudomonas aeruginosa*, который является пептидогликановой гидролазой (структурным лизином). Изучение белка проводилось с помощью направленного делеционного мутагенеза. Экспериментально подтверждено предположение о том, что С-концевая часть белка gp181 может участвовать в процессе инфицирования бактериофагом phiKZ клетки как сенсорная молекулярная игла для протыкания клеточной стенки бактерии.

СТРУКТУРНЫЙ ЛИЗИН, БАКТЕРИОФАГ, PSEUDOMONAS AERUGINOSA, ЛИТИЧЕСКИЙ ФЕРМЕНТ gp181, ДЕЛЕЦИОННЫЙ МУТАГЕНЕЗ.

Введение

Бактериофаг phiKZ семейства *Myoviridae* — это вирус, который инфицирует бактерию *Pseudomonas aeruginosa* (далее *P.aeruginosa*), известную своими патогенными свойствами для человека. Геном такого вируса имеет размер 280334 пар оснований в виде линейной, (A+T)-богатой двухнитевой молекулы ДНК [1, 2].

Структура вириона phiKZ была определена с помощью криоэлектронной микроскопии [3]. Он имеет большой икосаэдрический капсид диаметром около 1450 Å, содержащий двухнитевую ДНК, и сократимый хвост длиной приблизительно 2000 Å, заканчивающийся базальной пластинкой [2, 4].

Бактерия *P.aeruginosa* — один из основных патогенов в ICU-пневмонии, в первичной бактериемии при СПИДе и кистозном фиброзе. Она устойчива почти ко всем общеизвестным антибиотикам [5].

Бактериофаг phiKZ эффективно инфицирует различные штаммы бактерии

P.aeruginosa. Поэтому он может быть полезен для разработки фаговой терапии — способов борьбы с бактериальными инфекциями, которые не лечатся с помощью антибиотиков. Но в указанной терапии имеется несколько ограничений: трудность доставки фага к инфицированной области организма, иммуногенность фаговых частиц, потенциально патогенные участки ДНК в составе фагов. Так, в бактериофаге phiKZ обнаружены белки, которые имеют значительное сходство с белками опасных вирусов.

Другим новым методом борьбы с бактериальными инфекциями, в том числе с *P.aeruginosa*, является использование энзимов — литических ферментов бактериофагов, что было показано в работах [6 – 10].

Геном phiKZ кодирует два литических фермента: литическую трансгликозилазу (gp144) и пептидогликановую гидролазу (структурный лизин gp181), разрушающих пептидогликановый слой бактериальной

клетки *P.aeruginosa* в процессе ее инфицирования фагом.

Таким образом, исследование литического фермента gp181 фага phiKZ является актуальной задачей молекулярной биологии и медицины.

Цель данной работы – выяснение роли белка gp181 в процессе инфицирования клетки с помощью направленного делеционного мутагенеза.

Материалы и методы исследования

Перед началом исследований предполагалось, что белок gp181 по структуре и функциям может иметь сходство с белком gp5 – литическим ферментом бактериофага T4. Белок gp5 имеет лизоцимный домен и следующий за ним C-концевой домен, который формирует иглу, протыкающую мембрану [11]. Предполагалось, что C-концевая часть белка gp181 также участвует в процессе инфицирования бактериофагом phiKZ клетки как сенсорная молекулярная игла для протыкания клеточной стенки бактерии.

Штаммы бактериальных культур. Для экспрессии гена 181 бактериофага phiKZ, клонированного в плазмидный вектор pQE-30 *E.coli* (QIAGEN, США) с промотора фага T5, нами был использован штамм *E.coli* AD494(DE3) (Novagen, США). Для наработки плазмидных конструкций со вставкой гена 181 был использован штамм *E.coli* Top10 (Invitrogen, США).

Среды для выращивания бактерий. Использовалась жидкая питательная среда 2xTY: 16 г триптона (ДИА-М, Россия), 10 г дрожжевого экстракта (DIFCO, США) и 5 г NaCl (Реахим, Россия) на 1 л воды. В качестве твердой питательной среды использовали 2xTY среду, содержащую 1,5 % агара (DIFCO, США). Все среды стерилизовали автоклавированием.

Векторы для клонирования. Плазмиды. Для клонирования и экспрессии гена 181 использовался вектор pQE-30 (QIAGEN, США). Данный вектор имеет «гистидиновый хвост» (His-tag), состоящий из шести остатков гистидина (His). Белок, экспрессированный в таком векторе, будет содержать на своем N-конце шесть дополнительных

остатков гистидина, а это облегчает процесс очистки белка с помощью аффинной никель-хелатной хроматографии.

В процессе исследований нами получены следующие плазмиды с фрагментами ДНК (векторы pQE-30 со вставками по сайтам *Bam*HI-*Hind*III, содержащими соответствующие гены):

pl_g181M, с геном g181M;

pl_g181MA, с геном g181MA;

pl_g181E, с геном g181E.

Ферменты. В работе использовались рестриктирующие эндонуклеазы *Nco*I, *Bam*HI, *Hind*III, *Xho*I, *Bgl*II и ДНК лигаза фага T4 (фирма Fermentas, Литва), ДНК полимеразы *Thermophilus aquaticus* (Taq-полимераза) (фирма New England Biolabs, США).

Реакции рестрикции и лигирования проводили согласно рекомендациям фирм-изготовителей с использованием прилагаемых буферов.

Олигонуклеотиды. Для проведения полимеразной цепной реакции (ПЦР) были использованы следующие праймеры:

прямой (g181M-FOR): 5'-aga gga tcc gct caa gct aca-3';

прямой (g181E-FOR): 5'-tat gga tcc atg gag aat aag-3';

обратный (g181-REV): 5'-tat aag ctt acc aag tga ttg act att-3'.

Реактивы. Использовали агарозу, акриламид, ТЕМЕД, PMSF, ампициллин, фенол, хлороформ, IPTG, бромистый этидий (фирма Sigma, США), бакто-триптон, дрожжевой экстракт (фирма Difco, США), SDS (Serva, Германия), Coomassie R (Sigma, США), уксусную кислоту (Реахим, Россия), Tris-HCl (Sigma, США), EDTA (Serva, Германия), лизоцим (Serva, Германия). Растворы приготавливались с использованием воды Milli-Q, полученной на установке Millipore (США).

Экспрессия клонированных генов в *E.coli*. Экспрессию генов, клонированных в плазмидный вектор pQE-30 и находящихся под контролем промотора фага T5, осуществляли по методу Стадиера [12]. Сконструированными плазмидами pl_g181E, pl_g181M и pl_g181MA трансформировали компетентные клетки AD494(DE3), имеющие генетическую устойчивость к канамицину. Затем

клетки, трансформированные плазмидами соответственно pl_g181M, pl_g181MA и pl_g181E, высевали на чашки Петри с агаром, содержащим ампициллин (100 мкг/мл) и канамицин (50 мкг/мл). Чашки с содержимым инкубировали при 37 °С в течение 12 – 18 ч. Затем колонии трансформантов, несущих плазмиды pl_g181M, pl_g181MA и pl_g181E, инокулировали в 150 мл среды 2xTY, содержащей ампициллин (100 мкг/мл) и канамицин (50 мкг/мл). Нарастивали при 37 °С до плотности A_{600} , примерно равной 0,6 о.е. Для индукции экспрессии добавляли IPTG до конечной концентрации 1 мМ и продолжали инкубацию в течение ночи при 18 °С. Клетки осаждали центрифугированием при частоте вращения 3000 об/мин в течение 10 мин. Для препаративной работы полноразмерных рекомбинантных gp181MA и gp181E объем среды культивирования увеличивали до 500 мл.

Выделение белков и их анализ на растворимость. После центрифугирования клетки ресуспендировали в 20 мл буфера (25 мМ Tris-HCl (pH 8,0), 200 мМ NaCl, 10 % сахарозы, 0,2 % Tween 20), добавляли 1 мМ RMsF. Детергент Tween 20 и сахарозу использовали для улучшения солюбилизации. Клеточную суспензию обрабатывали в течение 2 – 3 мин на ультразвуковом дезинтеграторе UD-20 (Techrap, Польша) за несколько циклов: разрушение – в течение 15 с, затем перерыв – в 15 – 20 с. Остатки клеточных стенок удаляли центрифугированием при 15000 g в течение 15 мин (J2-21, Beckman, Германия). Супернатант и осадок анализировали в 12 %-ном SDS-ПААГ.

Очистка белков. После выделения растворимые белки gp181MA и gp181E очищали с помощью аффинной хроматографии на колонке (High-Trap chelating Ni, 5 мл, фирмы Pharmacia Biotech, Швеция) при скорости $v = 2$ мл/мин в ступенчатом градиенте имидазола (0–50 мМ–200 мМ) в буфере 20 мМ Tris-HCl (pH 8,0), 200 мМ NaCl.

Белок gp181M при экспрессии в системе *E.coli* AD494(DE3) давал нерастворимые тельца включения. Поэтому данный белок, содержащийся в промытом осадке телец включения, ресуспендировали в 10 мл 8 М мочевины (pH 8,1). После удаления нерас-

творившихся частиц центрифугированием солюбилизированный белок очищали на колонке с носителем Ni-NTA agarose (QIAGEN, США), элюируя его натрий-фосфатным буфером в ступенчатом градиенте pH (pH = 8,1 – 6,3 – 5,0): 100 мМ фосфата натрия, 10 мМ Tris HCl, 8 М мочевины. Искомый белок gp181M элюировали мочевиной при pH 5,0.

Затем все белки диализовали в буфере, содержащем 20 мМ Tris HCl (pH 7,5), 200 мМ NaCl, 0,5% Tween 80, 0,1 % сахарозы. Диализ проводили в течение ночи. Продукты диализа анализировали в 12 %-ном SDS-ПААГ.

Условия взаимодействия белков с различными штаммами. В исследовании взаимодействия белков с различными штаммами бактерии *P. aeruginosa* использовалось три штамма: PAO, 1 и 37. К 200 мкл суспензии клеток добавляли 10 мкл белка gp181E, центрифугировали в течение 6 мин при частоте вращения 11 000 об/мин. Супернатант и осадок анализировали в 12 %-м SDS-ПААГ.

Спектроскопия кругового дихроизма. Очень важную роль в определении вторичной структуры белков играет метод кругового дихроизма (КД). Он не требует знания общей пространственной структуры белка. Наоборот, структурное исследование белка обычно начинается с получения спектров КД. Метод КД основан на различии в поглощении право- и лево-поляризованного света в спиральях различной закрученности. Из-за этого различия в поглощении плоскополяризованный свет превращается в эллиптически-поляризованный [13]. Для белков gp181E и gp181MA на спектрополяриметре Jasco J-500 (Япония) были зарегистрированы спектры эллиптичности в ультрафиолетовой области 190 – 250 нм. Белки gp181E и gp181MA имели концентрацию 1,38 и 0,98 мг/мл соответственно.

Определение олигомерности гель-фильтрацией. Препарат очищенного белка gp181E наносили на колонку Superose12 HR10/30 (Pharmacia Biotech, Швеция), уравновешенную буфером, содержащим Tris-HCl (pH 8,0), и элюировали со скоростью 0,5 мл/мин. Предварительно колонку

калибровали стандартами белков. По графику зависимости логарифма молекулярной массы белка от объема элюции определяли наблюдаемую молекулярную массу белка gp181E.

Результаты исследования и их обсуждение

Расчет спектра Фурье для белка gp181 бактериофага phiKZ. Как было установлено в работе [14], в спектре Фурье для С-концевой части литического фермента gp5С (структурного лизоцима бактериофага T4) имеют место повторы с периодом $T = 8$ а.о. (аминокислотных остатков), образующие уникальный паттерн. При исследовании данного белка с помощью рентгеноструктурного анализа эта периодичность тоже была выявлена. Кроме того, в структуре gp5 был обнаружен уникальный мотив – тримерная β -спираль [11]. Результаты, полученные при исследовании gp5, явились новыми и интересными для фундаментальной и прикладной наук.

Поэтому нам представлялось целесообразным изучить литический фермент gp181 (структурный лизоцим бактериофага phiKZ) с целью обнаружить в нем аналогичную периодичность, а также проанализировать его структуру для выяснения механизма его действия при инфицировании клетки бактериофагом phiKZ. В исследовании применялись как теоретические (преобразование Фурье [14]), так и экспериментальные методы, описанные выше.

На рис. 1 приведен Фурье-спектр для группы гидрофобных аминокислот белка gp181, полученный для С-концевой части полипептидной цепи длиной $L = 1570$.

Самым интенсивным в этом спектре оказался пик с периодом $T = 7,7 \pm 0,4$ а.о. $\cong 8$ а.о. Этот результат практически совпадает с периодом $T = 8$ а.о., полученным для gp5. Но при выравнивании аминокислотной последовательности по выявленному периоду $T = 8$ а.о. не было найдено набора аминокислот, аналогичного обнаруженному в С-концевой части gp5 бактериофага T4.

Экспериментальные результаты по направленному делеционному мутагенезу. Исследование белка gp181 проводилось с помощью направленного делеционного

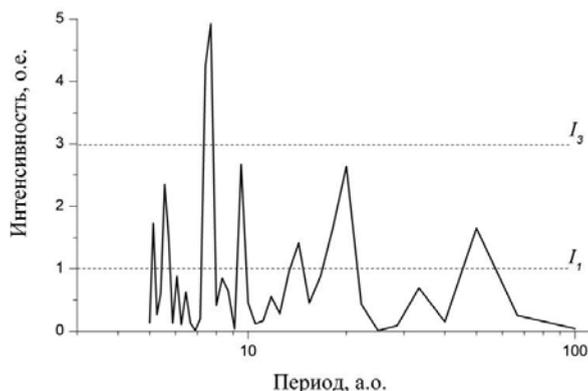


Рис. 1. Спектр Фурье для группы гидрофобных аминокислот в белковой последовательности gp181C; самый интенсивный пик отмечается при значении $T = 7,7 \pm 0,4$ а.о.; I_1 , I_3 – уровни интенсивности, вероятность случайного превышения которых составляет 16,00 и 0,13 %, соответственно

мутагенеза. Ген 181 имеет размер 6726 п.н. (пар нуклеотидов), а белок gp181, кодируемый этим геном, – соответственно, 2242 а.о.; вычисленная же молекулярная масса белка составляет 246,6 кДа.

Прежде чем приступить к исследованию gp181 с помощью делеционного мутагенеза, мы проанализировали его аминокислотную последовательность с помощью программы BLAST [15] с целью выявить консервативные домены в структуре этого белка. Используя эту программу, нам удалось предсказать, что в С-концевой части (672 – 2242 а.о.) белка gp181 находится домен пептидогликановой гидролазы или лизоцимный домен.

С учетом этих данных, а также данных об одинаковой периодичности в С-концевых частях gp181 и gp5 (т. е. с учетом имеющейся аналогии этих белков), были получены три делеционных мутанта гена 181, а именно: ген g181MA (582 п.н.), кодирующий лизоцимный домен; ген g181E (603 п.н.), кодирующий С-концевую часть белка gp181, расположенную после лизоцимного домена, а также ген g181M, который представляет собой объединение генов g181MA и g181E (рис. 2).

Нами были созданы три плазмидные конструкции с использованием вектора

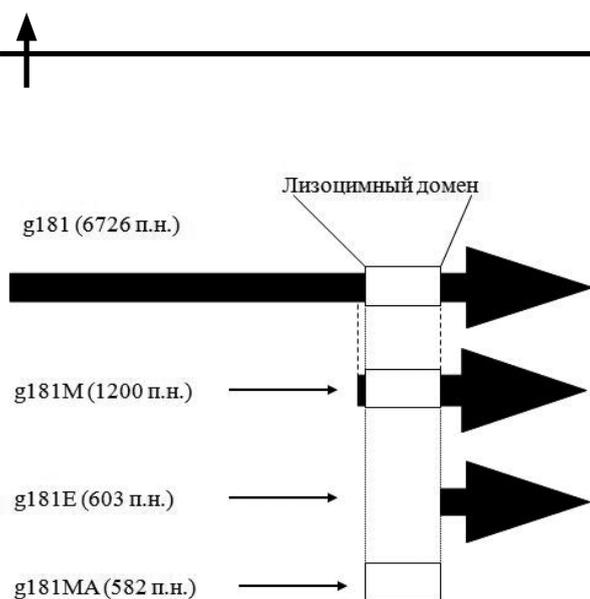


Рис. 2. Полученные делеционные мутанты гена *g181*. Стрелки указывают направление транскрипции

pQE-30 E.coli, содержащие гены *g181M*, *g181MA* и *g181E* бактериофага *phiKZ*, — это, соответственно, *pl_g181M*, *pl_g181MA* и *pl_g181E*.

Гены были амплифицированы с помощью ПЦР, в качестве матрицы использовалась ДНК фага *phiKZ*. ПЦР-продукты были клонированы в вектор *pQE-30* по сайтам *Bam*HI и *Hind*III.

Вектор и вставка были линейаризованы с помощью рестрикции по сайтам *Bam*HI и *Hind*III, соответственно. Затем была проведена реакция лигирования.

После лигирования полученными плазмидными конструкциями трансформировали компетентные клетки *Top10* и отбирали клоны, содержащие вставку. Клонами со вставкой *g181M*, *g181MA* и *g181E* был трансформирован экспрессионный штамм *AD494(DE3) E.coli*, содержащий ген РНК-полимеразы T5.

Затем был проведен анализ рекомбинантных белков на растворимость, который показал, что при температуре 37 °C белок *gp181M* экспрессируется полностью в нерастворимой форме, белок *gp181E* частично находится в супернатанте, а белок *gp181MA* полностью растворим. При проведении экспрессии при пониженной температуре (18 °C) белок *gp181M* по-прежнему экспрессировался в нерастворимой форме, однако доля белка *gp181E*, экспрессировав-

шегося в растворимой форме, существенно повысилась.

На рис. 3 представлены картины электрофореза белков из экстракта клеток в 12 %-м SDS-ПААГ. Видно, что *gp181M* находится во фракции осадка, а *gp181E* — во фракции супернатанта.

Известно, что белки, которые экспрессируются в виде телец включения, можно перевести в растворимую форму с помощью рефолдинга. Поэтому последний был проведен для белка *gp181M*, предварительно очищенного в денатурирующих условиях с целью получения этого белка в растворимой форме. Белок *gp181M* диализовали в буфере, содержащем 20 мМ Tris HCl (pH 7,5), 200 мМ NaCl, 0,5 % Tween 80, 0,1 % сахарозы. После диализа, проведенного против использованного буфера в течение ночи, продукт рефолдинга *gp181M* оказался нерастворимым.

Белки *gp181MA* и *gp181E* диализовали для того, чтобы избавиться от избытка имидазола в буфере. Поскольку диализ белков *gp181MA* и *gp181E* прошел успешно, было проведено их концентрирование с помощью концентратора *Centricon10* (фирма *Amicon*, США). Для этого белковые растворы были четыре раза центрифугированы на

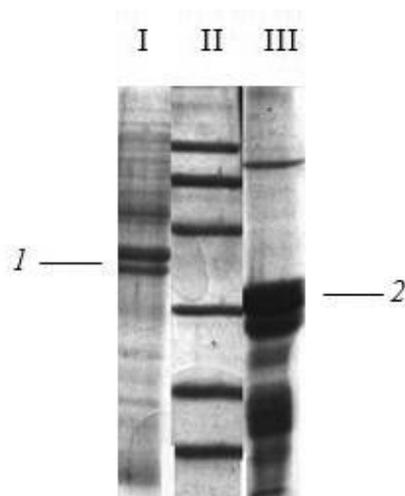


Рис. 3. Картина электрофореза при экспрессии белков:
 1 — *gp181M*, 2 — *gp181E*. Номерам дорожек (обозначены римскими цифрами) соответствуют:
 I — осадок белка 1, II — белковый маркер,
 III — супернатант белка 2

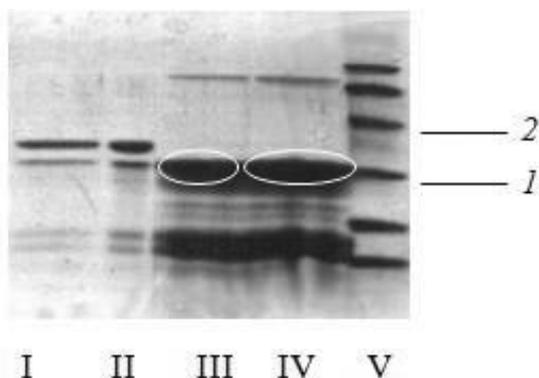


Рис. 4. Картина электрофореза при концентрировании двух белков: I, II – для белка gp181MA до (I) и после (II) концентрирования; III, IV – то же для белка gp181E; V – белковый маркер: значения 30 кДа (1) и 43 кДа (2).

Белыми овалами разделены две разные области, соответствующие белку gp181E до и после концентрирования

частоте 3000 об/мин (каждый раз в течение 15 мин). При этом белки сконцентрировались в 2,5 раза.

На рис. 4 представлена картина электрофореза белков в 12%-м SDS-ПААГ до и после концентрации. Белки gp181E и

gp181MA имели расчетный молекулярный вес 21,3 и 21,4 кДа, соответственно. Но из рисунка видно, что их подвижность в SDS-ПААГ соответствует молекулярному весу около 30 кДа. Это можно объяснить устойчивостью этих белков к SDS и тем, что они не являются мономерами.

После концентрирования также был проведен анализ взаимодействия белков с различными штаммами бактерии *P.aeruginosa*. Белок gp181MA, являясь цитолитическим ферментом, а именно пептидогликановой гидролазой, лизирует клетки. Белок gp181E взаимодействует со всеми тремя штаммами бактерии, но не лизирует их. На рис. 5 представлена картина электрофореза в 12 %-м SDS-ПААГ. Белок gp181E находится во фракции осадка при взаимодействии со штаммом PAO *P.aeruginosa*. В качестве контроля использовали бактерию *E.coli*; при ее добавлении к gp181E взаимодействия не наблюдается: на рис. 5 белок gp181E находится полностью во фракции супернатанта.

Как отмечалось выше, во введении, перед началом экспериментальных исследований белка gp181 предполагалось, что его С-концевая часть (gp181E) может играть

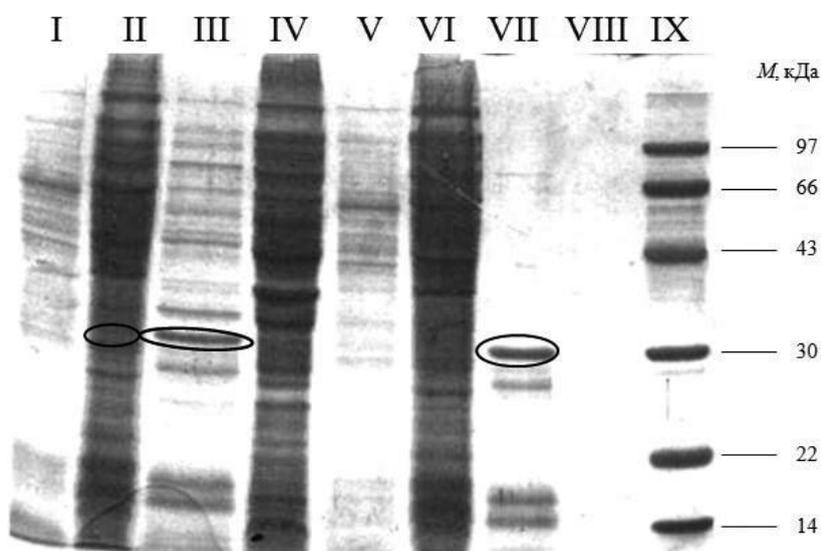


Рис. 5. Картина электрофореза при взаимодействии белка gp181E со штаммом PAO бактерии *P.aeruginosa*: VII, VIII – супернатант (gp181E) и его осадок; V, VI – супернатант PAO и его осадок; I, II – супернатант (gp181E + PAO) и его осадок; III, IV – супернатант (gp181E + *E.coli*) и его осадок; IX – белковый маркер.

Справа дана шкала молекулярных весов *M*. Черными овалами отмечены данные о взаимодействии белка gp181E со штаммом PAO и бактерией *E.coli*

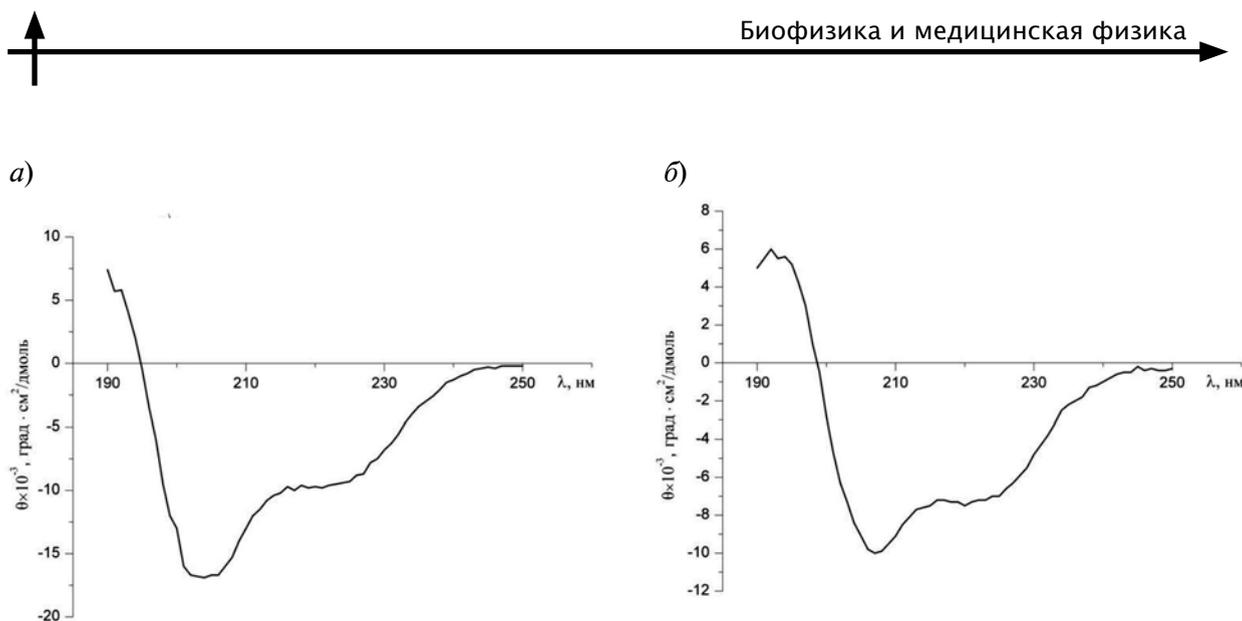


Рис. 6. Спектры кругового дихроизма белков gp181E (а) и gp181MA (б) (представленные спектры – это зависимости эллиптичности света от его длины волны)

роль сенсорной «молекулярной иглы». Это предположение согласуется с наблюдавшимся взаимодействием gp181E с клетками *P.aeruginosa*.

Однако вторичная структура С-концевого домена не является родственной β-спирали белка gp5 бактериофага T4, а представляет собой, вероятно, свернутую α-спираль (coiled coil), что было установлено при анализе приведенных здесь КД-спектров. Указанное отличие вторичных структур этих белков может определять различие механизмов их взаимодействия с клетками. Можно предположить, что gp181 представляет собой не функциональный гомолог gp5 бактериофага T4, а довольно распространенный альтернативный случай, когда структурный литический фермент является продолжением «белка-рулетки», который определяет длину хвоста вируса. Однако механизм взаимодействия gp181 с клетками до конца еще не исследован.

Необходимо отметить, что недавно в работах [16, 17] был приведен вывод о роли С-концевого домена gp181 как сенсорной «молекулярной иглы», аналогичный тому, что был сделан ранее на основании описанных здесь исследований. В статьях [16, 17] приводятся данные о том, что указанный вывод о роли gp181 подтвержден в других исследованиях методами масс-спектрометрии [18] и криоэлектронной микроскопии [19].

Для белков gp181E и gp181MA были получены спектры кругового дихроизма. Они представлены на рис. 6. Для оценки вкладов вторичных структур (α-спиралей, β-структур и неупорядоченных структур) нами было использовано программное обеспечение CDPro (Colorado State University, Fort Collins, CO), алгоритм CONTINLL с набором базисных белков IBasis7 [SDP48] (λ = 240 – 190 нм). Результаты приведены в табл. 1 и 2.

Таблица 1

Контрольные наборы белков SDP48 при расчетах по программе CONTINLL

Белок	Доля элемента структуры в белке; СКО							
	$H(r)$	$H(d)$	$S(r)$	$S(d)$	Turn	Unrd	СКО	Норма СКО
gp181E	0,375	0,340	0,002	0,000	0,077	0,207	0,414	0,041
gp181M	0,390	0,289	0,000	0,001	0,098	0,222	0,186	0,030

Обозначения: $H(r)$, $H(d)$ – регулярные и нерегулярные α-спирали; $S(r)$, $S(d)$ – регулярные и нерегулярные β-структуры; Turn – изгибы, Unrd – неупорядоченные структуры; СКО – среднеквадратичное отклонение.

Таблица 2

Результаты расчетов структуры белков gp181E и gp181M, полученные из КД-спектров

Величина	Значение	
	gp181E	gp181M
Количество сегментов спиралей (на 100 остатков)	8,493	7,223
Количество тяжей (на 100 остатков)	0,000	0,047
Средняя длина спиралей, а.о.	8,419	9,402
Средняя длина тяжей, а.о.	0,000	2,000
Доля α -спиралей, %	71,5	68,0
Средняя длина α -спиралей, а.о.	Около 8	

Обработка спектров показала, что вторичная структура исследованных белков состоит в основном из α -спиралей (gp181E – на 71,5 %, gp181MA – на 68 %) длиной около 8 а.о. Это обстоятельство указывает на их существенное сходство с многими внутриклеточными белками, например тропомиозином, миозином, кератином, фибриногеном, трансмембранным белком оболочечных вирусов и с некоторыми глобулярными белками.

Наше предположение о том, что вторичная структура C-концевого домена белка gp181 может представлять собой свернутую α -спираль (coiled coil), сделанное нами после анализа КД-спектров, также высказывалось в работах [17, 20]. Однако процентное содержание α -спиралей в этих работах не было указано.

Заключение

Таким образом, в результате комплексного исследования продукта гена 181 бактериофага phiKZ и его делеционных мутантов получены следующие результаты.

Установлено наличие периодичности в белке gp181 бактериофага phiKZ с тем же периодом $T = 8$ а.о., который был обнаружен авторами работы [14] в белке gp5 бактериофага T4.

Созданы плазмидные векторы для экспрессии трех делеционных мутантов гена 181 в клетках кишечной палочки *E. coli*.

Выделены и очищены три полученных рекомбинантных белка.

Экспериментально установлены свойства растворимости белков: белок gp181M экспрессируется в нерастворимой форме –

в виде телец включения (перевести его в растворимую форму не удалось), а белок gp181MA полностью растворим. Белок gp181E экспрессируется при пониженной температуре и становится растворимым в присутствии детергента и сахара; солиubilization в присутствии детергента и сахара косвенно свидетельствует об аффинности этого белка к полисахаридным (LPS) рецепторам клеточной стенки бактерии.

Экспериментально установлены другие физические свойства белков, например, белок gp181E является гидрофобным и взаимодействует с различными штаммами клеточек *Pseudomonas aeruginosa*, но не лизирует их, в отличие от gp181MA.

Получена информация о степени полимеризации белка gp181E: он не является мономером, а представляет собой димер или тример (это установлено с помощью гель-фильтрации).

Установлено, что вторичная структура белков gp181E и gp181MA состоит в основном из α -спиралей (результат анализа КД-спектров), что указывает на их существенное сходство с многими внутриклеточными белками, например тропомиозином, миозином, кератином, фибриногеном, трансмембранным белком оболочечных вирусов и с некоторыми глобулярными белками.

Получено дополнительное экспериментальное подтверждение выдвинутой нами гипотезы относительно того, что C-концевой домен белка gp181 может играть роль сенсорной «молекулярной иглы» в процессе инфицирования клетки бактериофагом phiKZ. Предположение вы-



двинуто с учетом установленной периодичности аминокислотной последовательности этого домена ($T = 8$ а.о.).

Итак, предположение о том, что С-концевая часть белка gp181 может уча-

ствовать в процессе инфицирования бактериофагом phiKZ клетки как сенсорная молекулярная игла для протыкания клеточной стенки бактерии, нашло экспериментальное подтверждение в описанном здесь исследовании.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тяглов Б.В., Крылов В.Н., Плотникова Т.Г., Минаев И.Е., Пермогоров В.И. Некоторые физико-химические свойства бактериофага phiKZ // Молекулярная биология. 1980. Т. 14. № 5. С. 1019–1022.
2. Mesyanzhinov V.V., Robben J., Grymonprez B., Kostyuchenko V.A., Bourkaltseva M.V., Sykilinda N.N., Krylov V.N., Volckaert G. The genome of bacteriophage phiKZ of *Pseudomonas aeruginosa* // J. Mol. Biol. 2002. Vol. 317. No. 1, pp. 1-19.
3. Fokine A., Kostyuchenko V.A., Efimov A.V., Kurochkina L.P., Sykilinda N.N., Robben J., Volckaert G., Hoenger A., Chipman P.R., Battisti A.J., Rossmann M.G., Mesyanzhinov V.V. A three-dimensional cryo-electron microscopy structure of the bacteriophage phiKZ head // J. Mol. Biol. 2005. Vol. 352. No. 1, pp. 117-124.
4. Крылов В.Н., Смирнова Т.А., Ребентиш Б.А., Миненкова И.Б. Структура частиц бактериофага phiKZ // Вопросы вирусологии. 1978. № 5. С. 568–571.
5. Giamarellou H. Therapeutic guidelines for *Pseudomonas aeruginosa* infections // Int. J. Antimicrob. Agents. 2000. Vol. 16. No. 2, pp. 103-106.
6. Nelson D., Loomis L., Fischetti V.A. Prevention and elimination of upper respiratory colonization of mice by group A streptococci by using a bacteriophage lytic enzyme // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2001. Vol. 98. No. 7, pp. 4107-4112.
7. Loeffler J.M., Nelson D., Fischetti V.A. Rapid killing of *Streptococcus pneumoniae* with bacteriophage cell wall hydrolase // Science. 2001. Vol. 294. Iss. 5549, pp. 2170-2172.
8. Loeffler J.M., Fischetti V.A. Synergistic lethal effect of a combination of phage lytic enzymes with different activities on penicillin-sensitive and -resistant *Streptococcus pneumoniae* strains // Antimicrob. Agents Chemoter. 2003. Vol. 47. No. 1, pp. 375-377.
9. Jado I., Lopez R., Garcia E., Fenoll A., Casal J., Garcia P. Phage lytic enzymes as therapy for antibiotic-resistant *Streptococcus pneumoniae* infection in murine sepsis model // J. Antimicrob. Chemoter. 2003. Vol. 52. No. 6, pp. 967-973.
10. Schuch R., Nelson D., Fischetti V.A. Bacteriolytic agent that detects and kill *Bacillus anthracis* // Nature. 2002. Vol. 418. No. 6900, pp. 884-889.
11. Kanamaru S., Leiman P.G., Kostyuchenko V.A., Chipman P.R., Mesyanzhinov V.V., Arisaka F., Rossmann M.G. Structure of the cell-puncturing device of bacteriophage T4 // Nature. 2002. Vol. 415. Iss. 6871, pp. 553-557.
12. Studier F.W., Moffatt B.A. Use of bacteriophage T7 RNA polymerase to direct selective high-level expression of cloned genes // J. Mol. Biol. 1986. Vol. 189. No. 1, pp. 113-130.
13. Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка. Курс лекций с цветными и стереоскопическими иллюстрациями; 2-е изд., испр. и доп. М.: Книжный дом «Университет», 2002. 376 с.
14. Симакова М.Н., Симаков Н.Н. Исследование периодичности расположения аминокислот в фибриллярных белках бактериофага T4 // Молекулярная биология. 2005. Т. 39. № 2. С. 321–329.
15. Altschul S.F., Madden T.L., Schäffer A.A., Zhang J., Zhang Z., Miller W., Lipman D.J. Gapped BLAST and PSI-BLAST: a new generation of protein database search programs // Nucleic Acids Res. 1997. Vol. 25. No. 17, pp. 3389-3402.
16. Fokine A., Miroshnikov K.A., Shneider M.M., Mesyanzhinov V.V., Rossmann M.G. Structure of the bacteriophage phiKZ lytic transglycosylase gp144 // J. Biol. Chem. 2008. Vol. 283. No. 11, pp. 7242-50.
17. Briers Y., Miroshnikov K., Chertkov O., Nekrasov A., Mesyanzhinov V., Volckaert G., Lavigne R. The structural peptidoglycan hydrolase gp181 of bacteriophage phiKZ // Biochem. Biophys. Res. Commun. 2008. Vol. 374. No. 4, pp. 747-51.
18. Briers Y., Volckaert G., Cornelissen A., Lagert S., Michiels C.W., Hertveldt K., Lavigne R. Muralytic activity and modular structure of the endolysins of *Pseudomonas aeruginosa* bacteriophages phiKZ and EL // Mol. Microbiol. 2007. Vol. 65. No. 5, pp. 1334-1344.
19. Fokine A., Battisti A.J., Bowman V.D., Efimov A.V., Kurochkina L.P., Chipman P.R., Mesyanzhinov V.V., Rossmann M.G. Cryo-EM study of the *Pseudomonas* bacteriophage phiKZ // Structure. 2007. Vol. 15. No. 9, pp. 1099-1104.
20. Tang L., Marion W.R., Cingolani G., Prevelige P.E. Jr., Johnson J.E. Three-dimensional structure of the bacteriophage P22 tail machine // EMBO J. 2005. Vol. 24. No. 12, pp. 2087-2095.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МИРОШНИКОВ Константин Анатольевич — доктор химических наук, старший научный сотрудник, и.о. руководителя лаборатории молекулярной биоинженерии Института биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук.

117997, Россия, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, 16/10
kmi@bk.ru

СИМАКОВА Мария Николаевна — преподаватель кафедры физики Военно-космической академии имени А.Ф. Можайского Министерства обороны РФ (филиал, г. Ярославль).

150001, Россия, г. Ярославль, Московский пр., 28
m_simakova@mail.ru

Miroshnikov K.A., Simakova M.N. THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF gp181 LYTIC ENZYME OF phiKZ BACTERIOPHAGE.

In this paper the gp181 peptidoglycan hydrolase (structural lysin) of phiKZ bacteriophage *Pseudomonas aeruginosa* has been investigated. The study of gp181 was performed using directed deletion mutagenesis. The assumption that the C-terminal part of gp181 may be involved in the infection process as the sensory molecular needle-like cell-puncturing device of phiKZ was experimentally confirmed.

STRUCTURAL LYSIN, BACTERIOPHAGE, PSEUDOMONAS AERUGINOSA, gp181 LYTIC ENZYME, DELETION MUTAGENESIS.

REFERENCES

1. Tyaglov B.V., Krylov V.N., Plotnikova T.G., Minaev I.E., Permogorov V.I. Nekotorye fiziko-khimicheskie svoystva bakteriofaga phiKZ [Some physical and chemical properties of bacteriophage phiKZ]. *Molecular Biology*, 1980, Vol. 14, No. 5, pp. 1019-1022. (rus)
2. Mesyanzhinov V.V., Robben J., Grymonprez B., Kostyuchenko V.A., Bourkaltseva M.V., Sykilinda N.N., Krylov V.N., Volckaert G. The genome of bacteriophage phiKZ of *Pseudomonas aeruginosa*. *J. Mol. Biol.*, 2002, Vol. 317, No. 1, pp. 1-19.
3. Fokine A., Kostyuchenko V.A., Efimov A.V., Kurochkina L.P., Sykilinda N.N., Robben J., Volckaert G., Hoenger A., Chipman P.R., Battisti A.J., Rossmann M.G., Mesyanzhinov V.V. A three-dimensional cryo-electron microscopy structure of the bacteriophage phiKZ head. *J. Mol. Biol.*, 2005, Vol. 352, No. 1, pp. 117-124.
4. Krylov V.N., Smirnova T.A., Rebentish B.A., Minenkova I.B. Struktura chastits bakteriofaga phiKZ [The structure of particles of bacteriophage phiKZ]. *Problems of Virusology*, 1978, No. 5, pp. 568-571. (rus)
5. Giamarellou H. Therapeutic guidelines for *Pseudomonas aeruginosa* infections. *Int. J. Antimicrob. Agents*, 2000, Vol. 16, No. 2, pp. 103-106.
6. Nelson D., Loomis L., Fischetti V.A. Prevention and elimination of upper respiratory colonization of mice by group A streptococci by using a bacteriophage lytic enzyme. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2001, Vol. 98, No. 7, pp. 4107-4112.
7. Loeffler J.M., Nelson D., Fischetti V.A. Rapid killing of *Streptococcus pneumoniae* with bacteriophage cell wall hydrolase. *Science*, 2001, Vol. 294, Iss. 5549, pp. 2170-2172.
8. Loeffler J.M., Fischetti V.A. Synergistic lethal effect of a combination of phage lytic enzymes with different activities on penicillin-sensitive and -resistant *Streptococcus pneumoniae* strains. *Antimicrob. Agents Chemoter.*, 2003, Vol. 47, No. 1, pp. 375-377.
9. Jado I., Lopez R., Garcia E., Fenoll A., Casal J., Garcia P. Phage lytic enzymes as therapy for antibiotic-resistant *Streptococcus pneumoniae* infection in murine sepsis model. *J. Antimicrob. Chemoter*, 2003, Vol. 52, No. 6, pp. 967-973.
10. Schuch R., Nelson D., Fischetti V.A. Bacteriolytic agent that detects and kill *Bacillus anthracis*. *Nature*, 2002, Vol. 418, Iss. 6900, pp. 884-889.
11. Kanamaru S., Leiman P.G., Kostyuchenko V.A., Chipman P.R., Mesyanzhinov V.V., Arisaka F., Rossmann M.G. Structure of the cell-puncturing device of bacteriophage T 4. *Nature*, 2002, Vol. 415, Iss. 6871, pp. 553-57.
12. Studier F.W., Moffatt B.A. Use of bacteriophage T7 RNA polymerase to direct selective high-level expression of cloned genes. *J. Mol. Biol.*, 1986, Vol. 189, No. 1, pp. 113-130.
13. Finkel'shteyn A.V., Ptitsyn O.B. *Fizika*

belka. Kurs lektiy s tsvetnymi i stereoskopicheskimi illyustratsiyami [Protein physics: a course of lectures with colour and stereoscopic illustrations]. 2nd edition. Moscow, Knizhnyy dom Universitet, 2002, 376 p. (rus)

14. **Simakova M.N., Simakov N.N.** Issledovanie periodichnosti raspolozheniya aminokislot v fibrillyarnykh belkakh bakteriofaga T4 [Investigation of periodic distributions of amino acids in the sequences of fiber proteins of bacteriophage T4]. *Molecular Biology*, 2005, Vol. 39, No. 2, pp. 321-329. (rus)

15. **Altschul S.F., Madden T.L., Schäffer A.A., Zhang J., Zhang Z., Miller W., Lipman D.J.** Gapped BLAST and PSI-BLAST: a new generation of protein database searchprograms. *Nucleic Acids Res.*, 1997, Vol. 25, No. 17, pp. 3389-3402.

16. **Fokine A., Miroshnikov K.A., Shneider M.M., Mesyanzhinov V.V., Rossmann M.G.** Structure of the bacteriophage phiKZ lytic transglycosylase gp144. *J. Biol. Chem.* 2008. Vol. 283, No. 11, pp. 7242-50.

17. **Briers Y., Miroshnikov K., Chertkov O., Nekrasov A., Mesyanzhinov V.V., Volckaert G., Lavigne R.** The structural peptidoglycan hydrolase gp181 of bacteriophage phiKZ. *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, 2008, Vol. 374, No. 4, pp. 747-51.

18. **Briers Y., Volckaert G., Cornelissen A., Lagaert S., Michiels C.W., Hertveldt K., Lavigne R.** Muralytic activity and modular structure of the endolysins of *Pseudomonas aeruginosa* bacteriophages phiKZ and EL. *Mol. Microbiol.*, 2007, Vol. 65, No. 5, pp. 1334-1344.

19. **Fokine A., Battisti A.J., Bowman V.D., Efimov A.V., Kurochkina L.P., Chipman P.R., Mesyanzhinov V.V., Rossmann M.G.** Cryo-EM study of the *Pseudomonas* bacteriophage phiKZ. *Structure*, 2007, Vol. 15, No. 9, pp. 1099-1104.

20. **Tang L., Marion W.R., Cingolani G., Prevelige P.E. Jr., Johnson J.E.** Three-dimensional structure of the bacteriophage P22 tail machine. *EMBO J.*, 2005, Vol. 24, No. 12, pp. 2087-2095.

THE AUTHORS

MIROSHNIKOV Konstantin A.

Shemyakin-Ovchinnikov Institute of Bioorganic Chemistry of Russian Academy of Sciences.

16/10 Miklukho-Maklaya St., Moscow, 117997, Russian Federation

kmi@bk.ru

SIMAKOVA Maria N.

A.F. Mozhaiskiy Military Space Academy of Ministry of Defense of the Russian Federation (the Yaroslavl branch).

28 Moskovskiy prospect, Yaroslavl, 150001, Russian Federation

m_simakova@mail.ru

ИЛЛЮСТРАЦИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕДУР РАЗБИЕНИЯ

Данная статья продолжает цикл работ, посвященных численному решению практических смешанных задач оптимизации. Ранее была сформулирована и доказана теорема о разбиении указанной смешанной задачи максимизации. В этой статье способы решения задач путем разбиения, включающие графический метод, трехшаговую процедуру, а также итерационные процедуры 1 и 2, показаны на конкретном примере решения простейшей смешанной задачи максимизации. В рамках решения задачи графически представлены допустимое множество задачи и выпуклая оболочка этого множества.

СМЕШАННАЯ ЗАДАЧА, ЛИНЕЙНАЯ ЗАДАЧА, ОПТИМИЗАЦИЯ, ДВОЙСТВЕННОСТЬ, МНОГОГРАННЫЙ КОНУС, ГРАФИЧЕСКИЙ МЕТОД, ПРОЦЕДУРА РАЗБИЕНИЯ.

Введение

При численном решении практических смешанных задач оптимизации используются два основных подхода: метод ветвей и границ (частичный перебор) и метод секущих гиперплоскостей (представление дискретного множества системой линейных неравенств). Настоящая работа посвящена второму подходу.

Доказательства эквивалентности двух задач максимизации, а также теоремы и двух лемм представлены в работах [3 – 6]. Там же приведено описание двух итерационных вычислительных процедур разбиения.

В данной статье простейшая смешанная линейная задача максимизации (15) решена различными способами: графическим методом, трехшаговой процедурой, итерационными процедурами 1 и 2. Благодаря простейшей структуре предложенной задачи все вычисления выполняются очень просто и рекомендуются только как иллюстрация, дающая ключ к конструированию алгоритмов более высокого уровня сложности. Для машинных кодов, предназначенных для решения практических задач, разумеется, обычно необходимы алгоритмы

самой разной сложности. Это обстоятельство подразумевается и далее при описании всех решений простейших задач.

В этой статье, как и в предыдущей [4], используются общепринятые обозначения:

\mathbf{N} – множество всех натуральных чисел 1, 2, 3, ...;

\mathbf{B}^n – множество всех n -векторов, каждая компонента которых равна либо нулю, либо единице, $|\mathbf{B}^n| = 2^n, n \in \mathbf{N}$;

\mathbf{R}^n – множество всех n -векторов с действительными компонентами, $n \in \mathbf{N}$;

\mathbf{R}_+^n – множество всех n -векторов с неотрицательными действительными компонентами, $n \in \mathbf{N}$;

\mathbf{Z}^n – множество всех n -векторов с целочисленными компонентами, $n \in \mathbf{N}$;

\mathbf{Z}_+^n – множество всех n -векторов с неотрицательными целочисленными компонентами, $n \in \mathbf{N}$.

В частности, вектор-столбец записывается в строку без знака транспонирования. Вертикальная черта при записи задачи оптимизации с использованием фигурных скобок читается и понимается как «при условиях», а вертикальная черта в записи множества – как «для которых».

Постановка задачи

Рассмотрим смешанную линейную задачу максимизации:

$$\max\{cx + dy \mid Ax + By \leq b, x \geq 0, x \in \mathbf{R}^p, y \in S \subseteq \mathbf{R}^q, p \in \mathbf{N}, q \in \mathbf{N}\}, \quad (1)$$

Если в задаче (1) $S = \mathbf{B}^q (S = \mathbf{Z}_+^q)$, то она называется смешанной двоичной (целочисленной) линейной задачей максимизации.

Здесь $A - (m \times p)$ -матрица, $B - (m \times q)$ -матрица; $b - m$ -столбец; c и $d - p$ - и q -строки соответственно. Все элементы матриц A, B, b, c и $d -$ целые числа.

Переменная, принимающая все значения из некоторого интервала действительных чисел, называется непрерывной.

Переменная, принимающая значения из некоторого дискретного множества, называется дискретной.

Примерами дискретных переменных могут служить:

двоичная переменная, принимающая либо значение 0, либо 1;

целочисленная переменная, принимающая значения из множества \mathbf{Z}^1 ;

неотрицательная целочисленная переменная, принимающая значения из множества \mathbf{Z}_+^1 .

Задача, в которой присутствуют как непрерывные, так и дискретные переменные, называется смешанной. Простейшим примером такой задачи является смешанная двоичная линейная задача максимизации (1), в которой $S = \mathbf{B}^q$.

Определим следующие множества:

в \mathbf{R}^m конус $C = \{u \mid uA \geq 0, u \geq 0\}; \quad (2)$

в \mathbf{R}^m многогранник $P = \{u \mid uA \geq c, u \geq 0\}; \quad (3)$

в \mathbf{R}^{m+1} конус $C_0 = \{(u_0, u) \mid -u_0c + uA \geq 0, (u_0, u) \geq 0\}. \quad (4)$

Множества (2), (3), (4) связаны с задачей (1).

Введем непрерывную переменную x_0 , принимающую действительные значения, и сформулируем новую смешанную линейную задачу максимизации:

$$\max\{x_0 \mid x_0 - cx - dy \leq 0, Ax + By \leq b, x \geq 0, x \in \mathbf{R}^p, y \in S \subseteq \mathbf{R}^q, p \in \mathbf{N}, q \in \mathbf{N}\}. \quad (5)$$

Базовые предпосылки для решения задачи

Утверждение. Задачи (1) и (5) эквивалентны в следующем смысле.

Вектор (x_0^*, x^*, y^*) есть оптимальное решение задачи (5) тогда и только тогда, когда $x_0^* = cx^* + dy^*$ и вектор (x^*, y^*) является оптимальным решением задачи (1).

Доказательство утверждения представлено в работах [3, 4].

Каждой точке (u_0, u) конуса C_0 (4) сопоставим область в множестве \mathbf{R}^{q+1} , определенную как

$$\{(x_0, y) \mid u_0x_0 + uBy - u_0dy \leq ub, y \in S \subseteq \mathbf{R}^q, q \in \mathbf{N}\}. \quad (6)$$

Обозначим через G множество из \mathbf{R}^{q+1} , определенное как

$$G = \bigcap_{(u_0, u) \in C_0} \{(x_0, y) \mid u_0x_0 + uBy - u_0dy \leq ub, y \in S \subseteq \mathbf{R}^q, q \in \mathbf{N}\}. \quad (7)$$

Множество G может быть пустым.

Поскольку $C_0 -$ это заостренный выпуклый многогранный конус, он является выпуклой оболочкой конечного числа всех своих крайних лучей [1, 2]. Из этого следует существование H точек (u_0^h, u^h) , $h = 1, 2, \dots, H$, таких, что

$$G = \bigcap_{h=1}^H \{(x_0, y) \mid u_0^hx_0 + u^hBy - u_0^hdy \leq u^hb, y \in S \subseteq \mathbf{R}^q, q \in \mathbf{N}\}, H \in \mathbf{N}. \quad (8)$$

Теорема о разбиении. Для смешанной задачи оптимизации (1) справедливы следующие утверждения.

1. Задача (1) недопустима тогда и только тогда, когда задача максимизации

$$\max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G\} \quad (9)$$

недопустима, то есть тогда и только тогда, когда множество G пусто.

2. Задача (1) допустима, но не имеет оптимального решения тогда и только тогда, когда задача (9) допустима, но не имеет оптимального решения.

3. Если $(x^*, y^*) -$ оптимальное решение задачи (1) и $x_0^* = cx^* + dy^*$, то $(x_0^*, y^*) -$ оптимальное решение задачи (9) и $x^* -$ оптимальное решение линейной задачи максимизации

$$\max\{cx \mid Ax \leq b - By^*, x \geq 0\}. \quad (10)$$

4. Если (x_0^*, y^*) – оптимальное решение задачи (9), то задача (10) допустима и оптимальное значение целевой функции этой задачи равно $x_0^* - dy^*$. Если x^* – оптимальное решение задачи (10), то (x^*, y^*) – оптимальное решение задачи (1) с оптимальным значением x_0^* целевой функции.

Лемма 1. Если задача (9) допустима и множество S является замкнутым и ограниченным, то переменная x_0 не имеет верхней границы на множестве G тогда и только тогда, когда многогранник $P(3)$ пуст.

Пусть Q – некоторое конечное подмножество из конуса C_0 (4), $Q \neq \emptyset$, $Q \subseteq C_0$. Через $G(Q)$ обозначим множество из \mathbf{R}^{q+1} , определенное как

$$G(Q) = \bigcap_{(u_0, u) \in Q} \{(x_0, y) \mid u_0 x_0 + uBy - u_0 dy \leq ub, y \in S \subseteq \mathbf{R}^q, q \in \mathbf{N}\}. \quad (11)$$

Рассмотрим задачу максимизации

$$\max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G(Q)\}. \quad (12)$$

Если задача (12) недопустима, то и задача (9) недопустима, так как $G \subseteq G(Q)$. С другой стороны, если вектор (x_0^*, y^*) является оптимальным решением задачи (12), то нужно ответить на два вопроса: будет ли (x_0^*, y^*) также оптимальным решением задачи (9) и, если нет, какое «лучшее» подмножество Q' из C_0 может быть получено. Ответы на эти два вопроса даны в книге и статьях [3, 4, 6].

Условие оптимальности текущего решения формулируется в виде леммы 2. Выполнение условия оптимальности – это один из случаев завершения вычислительных процедур. В формулировке леммы 2 используется следующая линейная задача минимизации:

$$\min\{u(b - By^*) \mid uA \geq c, u \geq 0\}. \quad (13)$$

Лемма 2. Если вектор (x_0^*, y^*) является оптимальным решением задачи (12), то он также будет оптимальным решением задачи (9) тогда и только тогда, когда

$$\min\{u(b - By^*) \mid uA \geq c, u \geq 0\} = x_0^* - dy^*. \quad (14)$$

Простые примеры решения смешанной задачи минимизации

Рассмотрим простейшую конкретную смешанную целочисленную линейную задачу максимизации:

$$\begin{array}{r|l} x_1 & y_1 \\ \hline 1 & 5 \rightarrow \max \\ 3 & 8 \leq 12, \end{array} \quad (15)$$

$$x_1 \geq 0, y_1 \in \mathbf{Z}_+^1.$$

Графический метод решения. На рис. 1 изображено допустимое множество задачи (15). Оно представляет собой два параллельных замкнутых отрезка: один с концами $(0, 0)$ и $(4, 0)$, а другой с концами $(0, 1)$ и $(4/3, 1)$ (эти отрезки на рис. 1 выделены жирными линиями). Выпуклая оболочка допустимого множества задачи (15) – это замкнутая область, ограниченная трапе-

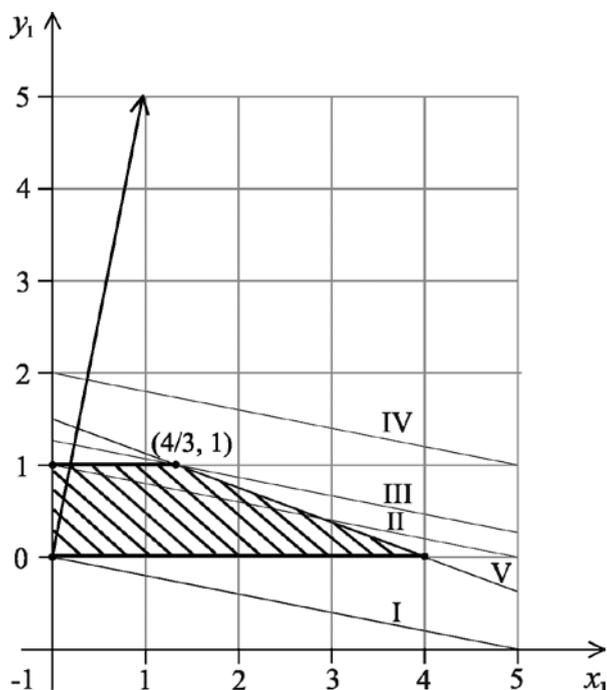


Рис. 1. Геометрическое построение к задаче (15):

вектор имеет координаты $(1, 5)$; два параллельных горизонтальных отрезка допустимого множества выделены жирными линиями; выпуклая оболочка этого множества заштрихована. Прямые I – IV – линии уровня целевой функции вида $x_1 + 5y_1 = t$, где $t = 0$ (I), 5(II), 19/3(III), 10(IV), прямая V – график функции $3x_1 + 8y_1 = 12$. Оптимальное решение задачи – $(4/3, 1)$, оптимальное значение – 19/3

цией с вершинами $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(4/3, 1)$, $(4, 0)$ (она на рис. 1 заштрихована). Там же показаны четыре линии уровня целевой функции. Если перемещать линию уровня, проходящую через начало координат, параллельно самой себе в направлении вектора $(1, 5)$, то она покидает (касается) выпуклую оболочку допустимых решений задачи (15) в точке $(4/3, 1)$.

Таким образом, графическим методом найдены как оптимальное решение $(4/3, 1)$, так и оптимальное значение, равное $19/3$, задачи (15).

Теперь покажем, как графическим методом можно найти систему всех крайних целочисленных направлений конуса C_0 (4) в задаче (15).

Начинаем с конуса, задаваемого неравенствами $u_0 \geq 0$, $u_1 \geq 0$, то есть совпадающего с неотрицательным квадрантом (этот конус выделен штриховкой на рис. 2, а). Очевидно, что одна из систем всех крайних направлений этого конуса представляет собой единичные векторы $e_0 = (1, 0)$ и $e_1 = (0, 1)$.

В задаче (15) имеется только одно основное линейное неравенство

$$-1u_0 + 3u_1 \geq 0,$$

задающее конус C_0 (выделен штриховкой на рис. 2, б). Прямая, задаваемая уравнением

$$-1u_0 + 3u_1 = 0,$$

разбивает плоскость на две полуплоскости.

В данном случае следует «положить» на прямую взвешенную (вес при каждом слагаемом – положительный) сумму двух единичных векторов e_0 и e_1 , находящихся в различных полуплоскостях, определяемых этой прямой. Каждый из этих векторов умножаем на положительное число так, чтобы взвешенная сумма этих векторов оказалась на прямой (правило треугольника или параллелограмма):

$$(3, 1) = 3e_0 + 1e_1,$$

где

$$3 = (-1, 3) \cdot (0, 1); 1 = |(-1, 3) \cdot (1, 0)|$$

(точкой обозначена операция скалярного умножения двух векторов).

В результате получаем систему всех крайних целочисленных направлений конуса C_0 (4) в задаче (15), состоящую из векторов

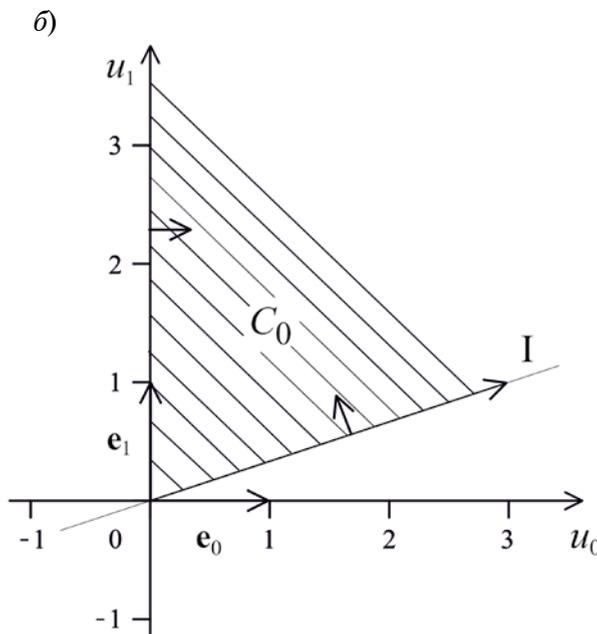
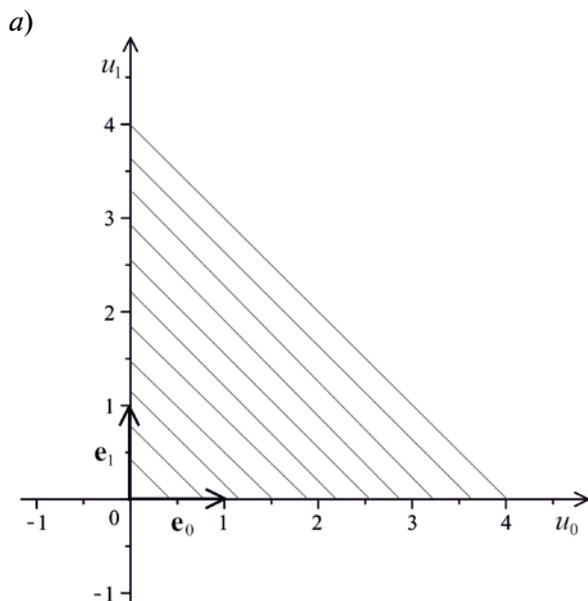


Рис. 2. Графическое представление конусов, задаваемых неравенствами $u_0 \geq 0$, $u_1 \geq 0$ (а) и $-1u_0 + 3u_1 \geq 0$ (б) (выделены штриховкой). Прямая I (отвечает уравнению $-1u_0 + 3u_1 = 0$) разбивает плоскость на две полуплоскости; e_0, e_1 – единичные векторы

$$u^1 = (0, 1) \text{ и } u^2 = (3, 1), \quad (16)$$

при этом $H = 2$ (см. определение (8)).

Алгоритм нахождения всех крайних направлений заостренного конуса, предназначенный для машинных кодов, детально описан и полностью обоснован нами в работах [1, 2]. В данном же случае мы воспользовались фрагментом этого алгоритма, допускающим простую графическую интерпретацию.

Трехшаговая процедура. Рассмотрим второй способ решения задачи.

Шаг 1. Находим систему всех крайних целочисленных направлений конуса C_0 (4) в задаче (15).

Этот шаг уже выполнен выше (см. формулу (16)). Итак, эта система состоит из векторов $u^1 = (0, 1)$ и $u^2 = (3, 1)$; $H = 2$. Выписываем конечную систему линейных неравенств (8), которая определяет множество G (оно определено формулой (7)):

x_0	y_1	
0	8	≤ 12
3	-7	≤ 12

при этом $y_1 \in \mathbf{Z}_+^1$.

Шаг 2. Решаем смешанную задачу максимизации (9).

Для задачи (15) имеем следующую логическую цепь:

$y_1 = 0$ влечет $x_0 \leq 4$; $y_1 = 1$ влечет $x_0 \leq 19/3$.

Оптимальное решение задачи есть вектор $(x_0^*, y_1^*) = (19/3, 1)$, а оптимальное значение $-x_0^* = 19/3$.

Шаг 3. Решаем линейную задачу минимизации (13).

Для (15) эта задача принимает вид

$$\min\{u_1(12 - 8 \cdot 1) \mid u_1 \geq 1, u_1 \geq 0\},$$

то есть

$$\min\{u_1 \mid u_1 \geq 1, u_1 \geq 0\}. \quad (17)$$

Оптимальное решение задачи (17) есть $(u_1^*) = (1/3)$, а оптимальное значение равно $4/3$.

Задача, двойственная к задаче (17), имеет вид

$$\max\{1x_1 \mid 3x_1 \leq 4, x_1 \geq 0\}. \quad (18)$$

Оптимальное решение задачи (18) есть $(x_1^*) = (4/3)$, а оптимальное значение также равно $4/3$.

Проверяем условие оптимальности (14). Для задачи (15) имеем

$$4/3 = 19/3 - 5 \cdot 1.$$

Таким образом, условие оптимальности выполнено. Оптимальное решение задачи (15) есть $(x_1^*, y_1^*) = (4/3, 1)$, а оптимальное значение равно $19/3$.

Итерационная процедура. В наших работах [3, 4] она была представлена как «итерационная процедура 1». Она может начинаться с произвольного конечного непустого подмножества Q^0 , $Q^0 \subseteq C_0$ (см. формулу (4)). Через v обозначаем счетчик итераций. Полагаем $v = 0$ [3, 4, 6].

Итерационная процедура, используемая для решения задачи (15), начинает свою работу с множества

$$Q^0 = \{(0, 0)\} \subset C_0 = \\ = \{(u_0, u_1) \mid -u_0 + u_1 \geq 0, (u_0, u_1) \geq 0\}.$$

Итерация 0. Если множество $G(Q^0)$ ($Q = Q^0$ в определении (11)) является пустым, то процедура завершается: задача (1) недопустима.

Если $u_0 \geq 0$ по крайней мере для одной точки $(u_0, u) \in Q^0$, то переходим на шаг 1 итерации 1.

Если же $u_0 = 0$ для любой точки $(u_0, u) \in Q^0$, то полагаем $x_0^0 = +\infty$, в качестве y^0 выбираем y в произвольной точке $(x_0, y) \in G(Q^0)$ ($Q = Q^0$ в (11)). Переходим на шаг 1 итерации 1.

Для задачи (15) $u_0 = 0$ для любой точки $(u_0, u) \in Q^0$. Полагаем $x_0^0 = +\infty$, $y_1^0 = 0$. Переходим на шаг 1 итерации 1.

Итерация 1. *Шаг 1.* Решаем смешанную задачу максимизации

$$\max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G(Q^0)\}. \quad (19)$$

Если эта задача недопустима, то процедура завершается: задача (1) недопустима. Если (x_0^0, y^0) найдено как оптимальное решение задачи (19), то переходим на шаг 2 этой же итерации.

Легко показать, что для задачи (15) вектор $(+\infty, 0)$ есть оптимальное решение задачи (19), а оптимальное значение выража-

ется как $+\infty$.

Шаг 2. Решаем линейную задачу минимизации

$$\min\{u(b - By^0) \mid uA \geq c, u \geq 0\}. \quad (20)$$

Для (15) задача (20) имеет вид

$$\min\{u_1(12 - 8 \cdot 0) \mid u_1 \geq 1, u \geq 0\},$$

то есть

$$\min\{u_1 \cdot 12 \mid u_1 \geq 1, u \geq 0\}.$$

Оптимальное решение последней задачи есть вектор $(u_1^0) = (1 / 3)$, а оптимальное значение равно 4.

Шаг 3 (реализуется один из пяти возможных случаев).

3.1. Если задача (20) недопустима, то задача (1) либо недопустима, либо не имеет конечного оптимального решения. С этой ситуацией можно столкнуться только на итерации 1.

3.2. Если задача (20) имеет конечное оптимальное решение u^0 и

$$u^0(b - By^0) = x_0^0 - dy^0,$$

то процедура завершается. В этом случае если x^0 есть оптимальное решение задачи, двойственной к задаче (20), то (x^0, y^0) есть оптимальное решение задачи (1) и x^0 есть оптимальное значение целевой функции этой задачи.

3.3. Если

$$u^0(b - By^0) < x_0^0 - dy^0,$$

то формируем множество

$$Q^{0+1} = Q^0 \cup \{(1, u^0)\},$$

увеличиваем нулевое значение счетчика итераций на единицу. Переходим на шаг 1 итерации 2.

3.4. Если значение целевой функции задачи (20) стремится к $-\infty$ вдоль луча

$$\{u \mid u = u^0 + \lambda v^0, \lambda \geq 0\},$$

где u^0 — вершина многогранника P (3), а v^0 — направление крайнего луча конуса S (2), и если

$$u^0(b - By^0) \geq x_0^0 - dy^0, \quad (21)$$

то формируем множество

$$Q^{0+1} = Q^0 \cup \{(0, v^0)\}.$$

3.5. Если неравенство (21) не выполняется, то есть если

$$u^0(b - By^0) < x_0^0 - dy^0,$$

то формируем множество

$$Q^{0+1} = Q^0 \cup \{(1, u^0), (0, v^0)\}.$$

В случаях 3.4 и 3.5 увеличиваем нулевое значение счетчика итераций на единицу и переходим на шаг 1 итерации 2.

Для задачи (15) имеет место случай 3.3, поскольку из шагов 1 и 2 этой же итерации следует неравенство

$$4 < +\infty - 5 \cdot 0 = +\infty.$$

Формируем множество

$$Q^{0+1} = Q^0 \cup \{(1, 1 / 3)\},$$

затем увеличиваем нулевое значение счетчика итераций v на единицу и переходим на шаг 1 итерации 2.

Вычисления итерации 1 полностью повторяются на итерациях 2, 3, ... соответственно для множеств Q^1, Q^2, \dots . В множествах Q^1, Q^2, \dots присутствует элемент $(0, 0)$, но он не влияет на множества $G(Q^1), G(Q^2), \dots$. Поэтому при записи смешанной задачи максимизации этот элемент не учитывается. На итерациях 2, 3, ... приводятся результаты вычислений только для исходной конкретной смешанной задачи максимизации, в данном случае только для задачи (15).

Итерация 2. *Шаг 1.* Для (15) решаем смешанную задачу максимизации

$$\max\{x_0 \mid (x_0, y_1) \in G(Q^1)\}. \quad (22)$$

Задача (22) принимает вид

$$\max\{x_0 \mid 1x_0 + \frac{1}{3} \cdot 8y_1 - 1 \cdot 5y_1 \leq \frac{1}{3} \cdot 12, y_1 \in \mathbf{Z}_+^1\},$$

то есть

$$\max\{x_0 \mid 1x_0 - \frac{7}{3}y_1 \leq 4, y_1 \in \mathbf{Z}_+^1\}. \quad (23)$$

Оптимальное решение задачи (23) есть вектор $(x_0^0, y_1^0) = (19/3, 1)$, а оптимальное значение равно 19/3.

Шаг 2. Для (15) решаем линейную задачу минимизации

$$\min\{u(b - By^1) \mid uA \geq c, u \geq 0\}. \quad (24)$$

Задача (24) имеет вид

$$\min\{u_1(12 - 8 \cdot 1) \mid u_1 \geq 1, u_1 \geq 0\},$$

то есть

$$\min\{u_1 \mid u_1 \geq 1, u_1 \geq 0\}. \quad (25)$$

Оптимальное решение задачи (25) есть вектор $(u_1^*) = (1/3)$, а оптимальное значение равно $4/3$.

Шаг 3. Для задачи (15) имеет место случай 3.2, поскольку из шагов 1 и 2 этой же итерации следует равенство

$$4/3 = 19/3 - 5 \cdot 1 = 4/3.$$

Рассмотрим линейную задачу максимизации

$$\max\{1x \mid 3x \leq 4, x \geq 0\}, \quad (26)$$

двойственную к задаче (25). Оптимальное решение задачи (26) есть вектор $(x^1) = (4/3)$, а оптимальное значение равно $4/3$.

Таким образом, оптимальное решение задачи (15) есть вектор $(4/3, 1)$, а оптималь-

ное значение равно $19/3$. Итерационная процедура завершает свою работу.

Анализ алгоритма показывает, что при решении задачи (15) предложенной итерационной процедурой используется только одно из двух возможных крайних направлений, что дает существенную экономию времени вычисления.

Заключение

Итак, на конкретном примере простейшей смешанной задачи максимизации показаны возможности трех способов ее решения и их преимущества перед используемыми в имеющейся вычислительной практике. Важно отметить, что предложенную задачу легко решить с помощью другой итерационной процедуры (она описана в наших работах [3, 4] и названа там итерационной процедурой 2), используя аналогию с итерационной процедурой, описанной в настоящей статье.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хохлюк В.И. Параллельные алгоритмы целочисленной оптимизации: Монография. М.: Радио и связь, 1987. 224 с.
2. Хохлюк В.И. Крайние лучи заостренного конуса // Труды ИСА РАН. 2008. Т. 32(3). Динамика неоднородных систем. С. 231–241.
3. Хохлюк В.И. Методы дискретной оптимизации: Учеб. пособие. Ч. 1. Новосибирск: Изд-во Новосиб. гос. ун-та, 2013. 154 с.
4. Хохлюк В.И. Процедуры разбиения смешанной задачи оптимизации // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 2 (170). С. 181–190.
5. Ху Т. Целочисленное программирование и потоки в сетях: Пер. с англ. М.: Мир, 1974. 519 с.
6. Benders J.F. Partitioning procedures for solving mixed-variables programming problems // Numer. Math. 1962. Vol. 4. No. 3, pp. 238–252.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ХОХЛЮК Виталий Иванович – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, доцент кафедры математической экономики Новосибирского государственного университета.

630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Коптюга, 4
vit@academ.org

Khokhlyuk V.I. THE ILLUSTRATION OF THE CALCULATING PARTITIONING PROCEDURES.

The present article continues a series of papers devoted to the numerical solution of practical mixed optimization problems. Previously the partitioning theorem of the indicated mixed maximization problem was formulated and proved. In this article some methods for solving problems by partitioning, including the graphical method, a three-step procedure, and the iterative procedures 1 and 2, are shown by a specific example of the solution of the simplest mixed maximization problem. A feasible set of the problem and the convex hull of this set are graphically presented within the framework of solving the problem.

MIXED PROBLEM, LINEAR PROBLEM, OPTIMIZATION, DUALITY, POLYHEDRAL CONE, GRAPHICAL METHOD, PARTITIONING PROCEDURE.

REFERENCES

1. **Khokhlyuk V.I.** *Parallel algorithms of integer optimization*. Moscow, Radio i svyaz, 1987. 224 p. (rus)
2. **Khokhlyuk V.I.** Extreme races of a pointed cone. *Proceedings of ISA RAS*, 2008, Vol. 32(3), Dynamics of heterogeneous systems, pp. 231-241. (rus)
3. **Khokhlyuk V.I.** *Discrete optimisation methods*. Novosibirsk, Novosibirsk State University, 2013. 154 p. (rus)
4. **Khokhlyuk V. I.** Partitioning procedures for a mixed optimisation problem. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal : Physics and mathematics*, 2013, No. 2(170), pp. 181-190. (rus)
5. **Hu T.** *Integer programming and network flows*. Moscow, Mir, 1974. 519 p. (rus)
6. **Benders J.F.** Partitioning procedures for solving mixed-variables programming problems *Numer. Math*, 1962, Vol. 4, No. 3, pp. 238-252.

THE AUTHOR

KHOKHLYUK Vitaly I.
Sobolev Institute of Mathematics
 4 Acad. Koptyug Ave., Novosibirsk, 630090, Russia
 vit@academ.org

УДК 512.81

М.Р. Петриченко

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА РЕШЕНИЙ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Рассмотрены рациональные приемы и свойства решений предельных задач для уравнений и предельных задач с частными производными параболического типа. Доказано, что такие предельные задачи для параболических уравнений, допускающие группу автомодельных преобразований, представляют собой необходимые условия минимума для положительных функционалов. Кроме того, доказывается, что уравнение Крокко равносильно канонической системе и для него соответствующий положительный функционал выписывается непосредственно. Показано, что в исходной записи уравнение параболического типа приводится к каноническому виду аддитивным удвоением переменных.

ГРУППА ПРЕОБРАЗОВАНИЙ, СЛОЙ, ЭКСТРЕМАЛЬ, ПАРАБОЛИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ, УРАВНЕНИЕ КРОККО, АДДИТИВНОЕ УДВОЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ.

Введение

Типичной особенностью решений предельных задач для параболических уравнений является наличие пограничных слоев, т. е. областей с большими градиентами на расслоениях. Для построения решения, обладающего всюду равномерной аппроксимацией, обычно используют специальные приемы. К ним следует отнести следующие:

масштабирование шкал переменных при разложении решений в ряды (метод Каплуна [1]);

«экспоненциальная подгонка» (метод Ильина [2]);

измельчение сетки в области пограничного слоя, пригодного для уравнений параболического и эллиптического типа с конвекцией, доминирующей над диффузией [3];

применение расщепляющих рядов, «разваливающих» исходную предельную задачу в счетную систему расщепленных линейных предельных задач с быстро (экспоненциально) убывающими решениями (континуальный вариант метода Ильина).

В основе метода Каплуна лежит следующая теорема.

Теорема Каплуна. Пусть $z \in \Delta$ — интервалу изменения z , на котором асимптотическое разложение решения равномерно сходится.

Тогда для любого $\varepsilon > 0$, где ε — параметр сингулярного возмущения, существует такое $\delta(\varepsilon) > 0$ и такой интервал $\Delta_\varepsilon \supset \Delta$, $\text{mes}(\Delta_\varepsilon - \Delta) < \delta$, на котором асимптотическое разложение равномерно пригодно.

Если Δ и Δ_ε — компакты, то теорема Каплуна может быть ослаблена до квазиравномерной (δ -точной) сходимости.

В связи с методом Ильина доказывается другая теорема, согласно которой для сингулярно возмущенного уравнения второго порядка с малым параметром $\varepsilon > 0$ при старшей производной погрешность равномерной разностной аппроксимации исходной предельной задачи составляет величину порядка $O(\varepsilon^2 \ln^2(1/\varepsilon))$, причем количество узлов сетки в пограничном слое $N = O(\varepsilon^{-1})$ [4 – 6].

Непосредственное решение предельных задач для параболических уравнений в сильной топологии и с сингулярным возмущением требует аккуратного структурирования множества значений независимых переменных (t, x) и точных оценок размеров пограничных слоев решений. Вероятно, некоторой альтернативой принятым схемам может служить ослабление топологии решения на множествах допустимых функций. Дело в том, что предельная задача для параболического уравнения, как правило, не рассматривается в связи с реализацией экстремальных задач. Известные экс-

тремальные «принципы» (введены М. Био и Л.Я. Айнолой [11, 12]) формулируются по принятой схеме как эвристические достаточные условия для отделения действительных решений от решений допустимых (виртуальных). Предельные же задачи возникают из эвристических принципов как необходимые условия экстремума.

Цель настоящей работы – показать, что имеет право на существование и альтернативная постановка проблемы.

Пусть дана предельная задача. Требуется построить функционал, для которого эта предельная задача служила бы необходимым условием экстремума.

В качестве первого шага решения доказывается, что предельная параболическая задача необходима для существования минимума положительного функционала. Затем для построения искомого функционала исходная предельная задача приводится к каноническому виду. Для этого полагают, что $M(z)$ – многообразие, заданное на D_z потоком из D_z в D_t ; $F(M)$ – множество гладких функций $C^{(1)}$ на многообразии M . Если векторы $f, g, D(f, g) = D_z$ являются элементами алгебры Ли над множеством F , то f и g образуют канонический поток:

$$\exists E(g, f) \Rightarrow \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = J \cdot \text{grad} E, \quad J := \begin{pmatrix} 0, & I \\ -I & 0 \end{pmatrix},$$

где I – матричная единица [7].

Типичная предельная задача для уравнения Крокко и условие минимума

Рассмотрим предельную задачу для уравнения параболического типа с частными производными в первом квадранте Ω плоскости

$$x, t\Omega := (x, t : t > 0, x > 0), \quad y \in C^{(2)}(\Omega) :$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(f(y) \frac{\partial y}{\partial x} \right) = \frac{\partial y}{\partial t}, \quad Dy = \Omega, \quad (1)$$

$$y(0, t) = y(\infty, t) - 1 = y(x, 0) - 1 = 0,$$

где $f(y)$ – неотрицательная и дифференцируемая на промежутке $(0, 1)$ функция, т. е. $f \in C^{(1)}(0, 1)$.

Тогда справедливы следующие утверждения.

1. Предельная задача (1) равносильна предельной задаче на полубесконечном промежутке

$$0 < \zeta < \infty, \quad \zeta := x/(2t^{1/2}), \quad Y(\zeta) = y(x, t), \\ DY = (0, \infty):$$

$$f(Y)Y'' + f'(Y)Y'^2 + 2\zeta Y' = 0, \\ Y(0) = Y(\infty) - 1 = 0. \quad (2)$$

2. Предельная задача (2) приводится к предельной задаче Крокко на компактном промежутке $0 < Y < 1$.

$$\text{Действительно, пусть } j := \frac{dY}{d\zeta} = j(Y).$$

Тогда порядок уравнения предельной задачи (2) понижается на единицу:

$$f(Y) \frac{dj}{dY} + f'(Y)j + 2\zeta = 0. \quad (3)$$

Очевидно, начальное (предельное) условие для (3) имеет вид $j(1) = 0$. Тогда в силу уравнения (3) справедливо равенство

$$f(Y)j(Y) = 2 \int_Y^1 \zeta(t) dt. \quad (4)$$

Далее, пусть

$$\varphi(Y) := \int_Y^1 \zeta(t) dt, \quad \varphi(1) = 0,$$

$$\varphi'(Y) = -\zeta, \quad \varphi'(0) = 0.$$

Тогда равенство (4) принимает вид

$$2\varphi\varphi'' + f(Y) = 0, \quad \varphi'(0) = \varphi(1) = 0, \quad (5)$$

что и требовалось доказать.

Есть и более простое доказательство.

Пусть

$$f(Y)j(Y) := w, \quad d\varphi = -\zeta dy,$$

и тогда

$$\frac{dw}{d\varphi} = 2, \quad w(0) = 0, \quad (5a)$$

откуда сразу же получается, что $w = 2\varphi$ – общее решение задачи (5) при любой функции $f(Y)$.

3. С предельной задачей (5) связано следующее тождество:

$$\int_0^1 \left(\frac{d\varphi}{dY} \right)^2 dY = \frac{1}{2} \int_0^1 f(Y) dY, \quad (6)$$

или

$$\int_0^1 \zeta^2 dY = \frac{1}{2} \int_0^1 f(Y) dY. \quad (6a)$$

В задачах с конкретным физико-механическим содержанием, тождества (6) и (6а) выражают некоторые законы сохранения. Например, если $y = u$ – скорость; $f(y) = u$; $t = \xi$, $x = \eta$ (ξ, η – продольная и поперечная координаты); $\zeta := \eta/(2\xi^{1/2})$ и если справедливо уравнение пограничного слоя Мизеса (1), то тогда в силу тождества (6) момент инерции эпюры скорости любого сечения относительно нулевой изотакхи равен 1/4.

Еще один пример. Пусть $f(y) = 1$; y – температура; t, x – время и координата. Тогда момент инерции температуры относительно нулевой изотермы равен 1/2.

4. Уравнение Крокко в предельной задаче (5) равносильно системе уравнений

$$\begin{cases} \frac{d\varphi}{dY} = \psi; \\ \frac{d\psi}{dY} = -\frac{f(Y)}{2\varphi}, \end{cases}$$

с гамильтонианом

$$\begin{aligned} E(Y, \varphi, \psi) &= \frac{\psi^2}{2} - \frac{1}{2} f(Y) \ln \frac{1}{\varphi} = \\ &= \frac{1}{2} \left(\left(\frac{d\varphi}{dY} \right)^2 - f(Y) \ln \frac{1}{\varphi} \right). \end{aligned}$$

Тогда вдоль действительного решения предельной задачи (5) выполняется условие:

$$s(\varphi) = \int_0^1 \left(\left(\frac{d\varphi}{dY} \right)^2 + f(Y) \ln \frac{1}{\varphi} \right) dY \rightarrow \inf \geq 0.$$

Таким образом, уравнение параболического типа связано с минимумом некоторого неотрицательного функционала (распределения), являясь для этого функционала необходимым условием минимума. Пусть интеграл энергии для (5) взят в виде:

$$E(Y, \varphi, \psi) = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{d\varphi}{dY} \right)^2 - f(Y) \ln \frac{\varphi_0}{\varphi} \right) = 0, \quad (6б)$$

$$0 < Y < 1,$$

если $f(0) = 0$.

Действительно, при $Y = 0$ это условие выполняется. При $Y = 1$

$$\frac{d\varphi}{dY} = -\zeta = -\infty,$$

и вполне естественно допустить, что неопределенность $\infty - \infty$ эквивалентна нулю. Тогда

$$\frac{d\varphi}{dY} = -\sqrt{f(Y) \ln \frac{\varphi_0}{\varphi}}, \quad \varphi(1) = 0, \quad (7)$$

где $\varphi_0 := \varphi(0)$.

Решение уравнения (7) имеет вид

$$\int_Y^1 \sqrt{f(z)} dz = \sqrt{\pi} \varphi_0 \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\varphi_0}{\varphi}} \right). \quad (8)$$

Далее, пусть $Y = 0$. Тогда $\varphi = \varphi_0$. В силу решения (8) φ_0 определяется как

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 \sqrt{f(z)} dz. \quad (8а)$$

Следовательно, задача Коши, представленная как

$$2\varphi\varphi'' + f(Y) = 0, \quad \varphi'(0) = \varphi(0) - \varphi_0 = 0, \quad (5б)$$

имеет решение $\varphi(Y)$ такое, что $\varphi(1) = 0$.

Другими словами, на промежутке $0 < Y < 1$ существует только одна точка, сопряженная с $Y = 0$, а именно точка $Y = 1$.

Например, если $f(Y) = 1$ (теплопроводность твердого тела), то

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}, \quad 1 - Y = \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\varphi_0}{\varphi}} \right).$$

Это решение совпадает с точным решением. Действительно, как известно, $Y = \operatorname{erf}(\zeta)$ – решение предельной задачи (2), $f(Y) - 1 = 0$. Но, в силу равенства (7),

$$\zeta = -\frac{d\varphi}{dY} = \sqrt{\ln \frac{\varphi_0}{\varphi}},$$

что и требовалось доказать.

Например, если $f(Y) = Y$, то в силу равенства (8),

$$\varphi_0 = \frac{2}{3\sqrt{\pi}};$$

и вообще, если $f(Y) = Y^m$, то

$$\varphi_0 = \frac{2}{2m+1} \frac{1}{\sqrt{\pi}}.$$

Далее, пусть вместо интеграла энергии (6б) первый интеграл уравнения Крокко имеет вид

$$\left(\frac{d\varphi}{dY} \right)^2 - f(Y) \ln \frac{1}{\varphi} = 0, \quad f(0) = 0, \quad (6в)$$

т. е.

$$\int_Y^1 \sqrt{f(z)} dz = \sqrt{\pi} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{1}{\Phi}} \right).$$

Тогда для определения Φ_0 получается следующее условие:

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 \sqrt{f(Y)} dY = \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{1}{\Phi_0}} \right). \quad (8б)$$

Теперь пусть $f(Y) - Y = 0$. Тогда в силу условия (8б) получаем выражение

$$\frac{2}{3\sqrt{\pi}} = \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{1}{\Phi_0}} \right).$$

С помощью таблиц интеграла ошибок можно найти Φ_0 ; $\Phi_0 = 0,335$, и этот результат практически совпадает с точным решением, равным 0,33206. Интересно отметить, что уравнение Блазиуса все-таки интегрируется, вопреки утверждениям, имеющимся в справочниках Э.Л. Айнса, В.Ф. Зайцева, Д. Форсайта и др.

В качестве еще одного примера, который показывает универсальность предельной задачи Крокко, целесообразно рассмотреть уравнение Стокса [1]:

$$u \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad D(u) = (x > 0, y > 0),$$

описывающее некоторое тривиальное расслоение $D(u)$. Сечение такого расслоения образует так называемое «скоростное поле».

Допускается группа автомодельных преобразований:

$$u = u \left(\frac{y}{2\sqrt{x}} \right) := u(\zeta) \rightarrow \frac{d^2 u}{d\zeta^2} + 2\zeta u \frac{du}{d\zeta} = 0,$$

$$\zeta := \frac{y}{2\sqrt{x}}.$$

Кроме того, пусть предельные условия имеют вид

$$u(0) = u(\infty) - 1 = 0.$$

Уравнение Крокко получается отображением $D(u)$ на компакт $0 < u < 1$:

$$\frac{du}{d\zeta} = \tau(u), \quad \tau(1) = 0, \quad \zeta = \int_0^u \frac{dz}{\tau(z)}.$$

Тогда либо $\tau = 0$, либо

$$\frac{d\tau}{du} + 2u \int_0^u \frac{dz}{\tau(z)} = 0, \quad \tau(1) = 0. \quad (3а)$$

Из последнего уравнения следует, что

$$\left(\frac{d\tau}{du} \right)_{u=0} = 0.$$

Предельную задачу (3а) можно привести к виду Крокко:

$$\tau\tau'' - \frac{\tau\tau'}{u} + 2u = 0, \quad \tau'(0) = \tau(1) = 0 \quad (3б)$$

либо к интегральному уравнению

$$\tau(u) = 2 \int_u^1 dv \cdot v \int_0^v \frac{dz}{\tau(z)} =$$

$$= \int_0^1 \frac{dz(1-z^2)}{\tau(z)} - \int_0^u \frac{dz(u^2-z^2)}{\tau(z)}. \quad (3в)$$

Это уравнение можно записать в другом виде: $\tau = U(\tau)$. Отображение (оператор) $U: W_2^{(1)} \rightarrow W_2^{(1)}$ — сжимающий эндоморфизм, а пространство $W_2^{(1)}(0, 1)$ — полное. При этом существует неподвижная точка отображения U .

Действительно, как известно, оператор $U: W_1^{(1)}(0, 1) \rightarrow W_1^{(1)}(0, 1)$ — сжимающий тогда и только тогда, если выполняется условие

$$\forall \tau \in B_\varepsilon(\tau_0),$$

$$\exists q \leq 1 \rightarrow \|U(\tau) - U(\tau_0)\| \leq q \|\tau - \tau_0\|,$$

или (что то же) $U \in \operatorname{Lip}^{loc}(\tau_0)$, с константой Липшица, не превосходящей единицы. Через $B_\varepsilon(\tau_0)$ здесь обозначена окрестность точки $\tau_0 \in W_1^{(1)}(0, 1)$, а примером τ_0 может служить значение $du/d\zeta$ в точке $\zeta = 0$ ($u = 0$). Ввиду монотонности, $\tau_0 > \tau$. Но, в силу интегрального уравнения (3в),

$$\tau(u) \geq \frac{2}{3\tau_0(u)}, \quad \forall \tau \in B_\varepsilon(\tau_0).$$

Далее, пусть $\tau = \tau_0 - \varepsilon$, причем $\varepsilon \rightarrow +0$. Тогда $\tau_0^2 \geq 2/3$. Так же просто можно получить неравенство

$$\|U(\tau_0) - U(\tau_0 - \varepsilon)\| \leq \frac{2\varepsilon}{3\tau_0(\tau_0 - \varepsilon)} =$$

$$= \frac{2\varepsilon}{3\tau_0^2} + O(\varepsilon^2) = q\varepsilon,$$

где q — константа, причем $q = 2 / (3\tau_0^2) \leq 1$.

Итерационный процесс можно организовать следующим образом. В первом приближении $\tau = \tau_0 = \tau(0)$. Тогда решение (3в), в первом приближении, есть

$$\tau(u)\tau_0 = \frac{2}{3}(1 - u^3), \quad \tau_0 = \sqrt{\frac{2}{3}}; \quad \frac{\tau}{\tau_0} = 1 - u^3.$$

Следующие итерации строятся по схеме $\tau_s = U(\tau_{s-1})$, где нижний индекс s означает номер итерации. Итерационный процесс сходится в силу теоремы о неподвижной точке.

Уравнение (3а) допускает каноническое преобразование

$$u^2 = w, \quad \tau = \tau(w),$$

приводящее его к типичному виду Крокко и к канонической системе:

$$\frac{d\tau}{dw} + \int_0^{\sqrt{w}} \frac{dz}{\tau(z)} = 0,$$

откуда

$$\tau \frac{d^2\tau}{dw^2} + \frac{1}{2\sqrt{w}} = 0, \quad \left(\frac{d\tau}{dw}\right)_{w=0} = \tau(1) = 0. \quad (3г)$$

Каноническая система записывается так:

$$\begin{cases} \frac{d\tau}{dw} = \sigma; \\ \frac{d\sigma}{dw} = -\frac{1}{2\tau\sqrt{w}}, \end{cases}$$

и имеет гамильтониан

$$\begin{aligned} E(w, \tau, \sigma) &= \frac{\sigma^2}{2} - \frac{1}{\sqrt{w}} \ln \frac{1}{\sqrt{\tau}} = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{d\tau}{dw}\right)^2 - \frac{1}{\sqrt{w}} \ln \frac{1}{\sqrt{\tau}} \end{aligned} \quad (3д)$$

и двойственную функцию

$$\Lambda\left(w, \tau, \frac{d\tau}{dw}\right) = \frac{1}{2} \left(\frac{d\tau}{dw}\right)^2 + \frac{1}{\sqrt{w}} \ln \frac{1}{\sqrt{\tau}}.$$

В действительном движении справедливо выражение

$$s(\tau) = \int_0^1 dw \left[\left(\frac{d\tau}{dw}\right)^2 + \frac{1}{\sqrt{w}} \ln \frac{1}{\tau} \right] \rightarrow \inf \geq 0$$

на функциях $\tau(w)$, удовлетворяющих предельным условиям из системы (3г).

В гамильтониане (3д) целесообразно вернуться к старой переменной u :

$$\frac{1}{8u^2} \left(\frac{d\tau}{du}\right)^2 - \frac{1}{2u} \ln \frac{1}{\tau} = E\left(u, \tau, \sigma = \frac{d\tau}{du}\right).$$

Пусть (так же, как и раньше)

$$\left(\frac{d\tau}{du}\right)^2 - 4u \ln \frac{1}{\tau} = 0, \quad \frac{d\tau}{du} = -2\sqrt{u \ln \frac{1}{\tau}}.$$

Тогда решение уравнения Стокса имеет вид

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau} \frac{dz}{\sqrt{\ln \frac{1}{z}}} &= \frac{4}{3}(1 - \sqrt{u^3}), \\ \operatorname{erfc} \sqrt{\ln \frac{1}{\tau}} &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}}(1 - \sqrt{u^3}). \end{aligned}$$

Пусть $u = 0$, тогда $\tau = \tau_0$, $\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{1}{\tau_0}}\right) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} = 0,7522$, $\tau_0 = 0,89$.

Примечание. Пусть дана неоднородная квазилинейная система с дивергентным членом q :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(f(z) \frac{\partial y}{\partial x} \right) + q &= \frac{\partial y}{\partial t}, \quad D(y) = (0 < x, t < \infty), \\ y : (0, \infty) &\rightarrow C^{(2)}(D(y)) \in R^1, \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(g(z) \frac{\partial z}{\partial x} \right) &= \frac{\partial z}{\partial t}, \quad D(z) = D(y), \\ y : (0, \infty) &\rightarrow C^{(2)}(D) \in R^1. \end{aligned}$$

Обычно в задачах с физическим содержанием переменные y, z – концентрации примеси (либо температура, влажность, парциальные давления и пр.); q – плотность распределения источников; f, g – коэффициенты переноса, зависящие от концентрации z -примеси. Если $4tq = \text{const}$, то эти уравнения допускают автомодельное преобразование переменных:

$$\zeta = \frac{x}{2\sqrt{t}}, \quad y = y(\zeta), \quad z = z(\zeta).$$

Решить первое (линейное) уравнения не представляет труда, второе же можно свести к уравнению Крокко. Роль «потенциала» z играет функция Крокко $\varphi(z)$. В физических задачах она играет роль «потенциала влагопереноса» [8].

Аддитивное удвоение переменных и прямое построение функционала

Приведение уравнения (2) к канонической системе можно упростить с помощью аддитивного удвоения переменных.

Пусть $Y := Y_1, \frac{dY_1}{d\zeta} = Y_2$. Тогда дифференциальное уравнение из предельной задачи (2) можно записать в виде

$$f(Y)Y'' + f'(Y)Y'^2 + 2\zeta Y' = 0, \quad \frac{dY_1}{d\zeta} = Y_2, \quad \frac{dY_2}{d\zeta} = -\frac{f'(Y_1)Y_2^2 + 2\zeta Y_2}{f(Y_1)}. \quad (9)$$

Система (9) – не каноническая.

Пусть $f(Y) - 1 = 0$. Тогда система (9) принимает следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{dY_1}{d\zeta} = Y_2; \\ \frac{dY_2}{d\zeta} = -2\zeta Y_2, \end{cases} \quad (9a)$$

или

$$\frac{d}{d\zeta} \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -2\zeta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Наряду с системой (9a) будет рассматриваться система с импульсом $Z = (0, Z_2)^T$, имеющая вид

$$\begin{cases} \frac{dY_1}{d\zeta} = Y_2 = \frac{\partial E}{\partial Z_1}; \\ \frac{dY_2}{d\zeta} = -2\zeta(Y_2 + Z_2) = \frac{\partial E}{\partial Z_2}, \end{cases}$$

и с гамильтонианом

$$E(\zeta, Y_1, Y_2, Z_1, Z_2) = Y_2 Z_1 - 2\zeta \left(Y_2 Z_2 + \frac{Z_2^2}{2} \right).$$

Частично аддитивно удвоенная система имеет вид

$$\begin{cases} \frac{dY_1}{d\zeta} = Y_2, \\ \frac{dY_2}{d\zeta} = -2\zeta(Y_2 + Z_2), \\ \frac{dZ_1}{d\zeta} = 0, \end{cases} \quad (10a)$$

$$\left| \frac{dZ_2}{d\zeta} = 2\zeta Z_2, \right. \quad (10a)$$

или

$$\frac{d}{d\zeta} \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Z_1 \\ Z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2\zeta & 0 & -2\zeta \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\zeta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Z_1 \\ Z_2 \end{pmatrix},$$

а эта система уже каноническая.

Не исключая общности, примем $Z_1 = 0$. Тогда функция $\Lambda(\zeta, Y_2, dY_2/d\zeta)$, двойственная по Юнгу – Лежандру $\tilde{E}(\zeta, Y_1, Y_2, Z_1, Z_2)$, задает плотность распределения инъективного отображения $s : Y_2 \in W_2^{(1)}(0, Z) \rightarrow E_1 :$

$$s(Y_2) = \int_0^Z \frac{1}{\zeta} \left(\frac{dY_2}{d\zeta} + 2\zeta Y_2 \right)^2 d\zeta, \quad Z \leq \infty, \quad (10b)$$

причем вдоль экстремали $s \rightarrow \inf \geq 0$.

Необходимое условие минимума есть

$$\frac{d^2 Y_2}{d\zeta^2} - \frac{1}{\zeta} \frac{dY_2}{d\zeta} - 4\zeta^2 Y_2 = 0. \quad (11)$$

Общее решение уравнения (11) имеет вид

$$Y_2(\zeta) = C_1 \exp(\zeta^2) + C_2 \exp(-\zeta^2), \quad (12)$$

где $C_{1,2}$ – постоянные интегрирования.

Из предельного условия следует, что $C_1 + C_2 = q, \zeta = 0$. В этом случае справедливы следующие утверждения:

1. Пусть $C_1 = 0$. Тогда $\forall Z > 0, s(Y_2) = 0$ (тривиально);

2. Пусть $Y_2 = 0, \zeta = Z$. В силу уравнения (12) можно записать:

$$Y_2 = q \frac{\text{sh}(Z^2 - \zeta^2)}{\text{sh}Z^2}, \quad (12a)$$

и тогда, в силу справедливости уравнения (10), получим следующие выражения:

$$Y_1(\zeta) = \frac{q}{\text{sh}Z^2} \int_0^\zeta \text{sh}(Z^2 - t^2) dt, \quad \zeta < Z, \quad (13)$$

$$Y_1(\zeta) = \frac{q}{\text{sh}Z^2} \int_0^Z \text{sh}(Z^2 - t^2) dt, \quad \zeta \geq Z,$$

и $Y_1(\zeta)$ достигает предельного значения при конечном значении Z .

Пусть теперь $Z \rightarrow \infty$. Тогда $Y_2 \rightarrow q \exp(-\zeta^2)$

(классическое решение). Следовательно, исходная траектория получается как предельная форма экстремали.

3. Пусть $C_2 = 0$. Тогда

$$s(Y_2) = 2(\exp(Z^2) - 1).$$

Удвоение переменных можно толковать в терминах оптимального управления, рассматривая z как вектор управления и интерпретируя гамильтониан E как псевдогамильтониан [9].

Периодические решения в методе аддитивного удвоения переменных

В случае так называемых периодических процессов теплопроводности используются, как правило, следующие уравнения [10]:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}, \quad D(y) = \Omega', \quad \Omega' = (t > -\infty, x > 0), \quad (1a)$$

причем предельные условия имеют вид

$$y(x, -\infty) = \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)_{x=0} + B(y_{ex} - y(0, t)) = 0. \quad (14)$$

Функции $B(t)$ и $y_{ex}(t)$ – периодические, с примитивным периодом $t_0 = 1$. Далее считается, что $B = \text{const}$ (это условие не принципиальное, но упрощает выкладки) [8].

Теперь пусть

$$y(t, x) = Y(t)\exp(-\alpha x), \quad Y(t) := y(0, t),$$

где $\alpha = \sqrt{\pi}(1+i)$ – собственное число предельной задачи.

Уравнение и предельная задача (14) равносильны задаче Коши для $Y(t)$ следующего вида:

$$\frac{dY}{dt} = \alpha B(y_{ex} - Y), \quad Y(-\infty) = 0. \quad (15)$$

Тогда решение задачи Коши (15) есть ($\gamma := \alpha B$):

$$Y(t) = \gamma \int_0^\infty y_{ex}(t-u) \exp(-\gamma u) du, \quad (16)$$

или

$$Y(t) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \gamma^{-k} \left(\frac{d}{dt} \right)^k y_{ex}(t) = \left(I + \gamma^{-1} \frac{d}{dt} \right)^{-1} y_{ex}(t), \quad (16a)$$

где оператор $\left(I + \gamma^{-1} \frac{d}{dt} \right)^{-1}$ ограничен в круге радиуса $\left\| \frac{d}{dt} \right\| < |\gamma|$.

В общем случае оператор d/dt не ограничен, и целесообразно рассматривать решение (16). Из решения первой предельной задачи (Дирихле) следует, что

$$\alpha = \sqrt{\pi}(1+i).$$

Тогда вещественная и мнимая части (16) принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} Y(t) &= B\sqrt{\pi}(1+i) \int_0^\infty y_{ex}(t-u) \exp(-B\sqrt{\pi}u) \times \\ &\times [\cos(B\sqrt{\pi}u) - i \sin(B\sqrt{\pi}u)] du = \\ &= B\sqrt{\pi} \int_0^\infty y_{ex}(t-u) \exp(-B\sqrt{\pi}u) \times \\ &\times [\cos(B\sqrt{\pi}u) + \sin(B\sqrt{\pi}u)] du + \\ &+ iB\sqrt{\pi} \int_0^\infty y_{ex}(t-u) \exp(-B\sqrt{\pi}u) \times \\ &\times [\cos(B\sqrt{\pi}u) - \sin(B\sqrt{\pi}u)] du, \end{aligned} \quad (16b)$$

т. е.

$$\begin{aligned} R(Y) &= B\sqrt{\pi} \int_0^\infty y_{ex}(t-u) \exp(-B\sqrt{\pi}u) \times \\ &\times [\cos(B\sqrt{\pi}u) + \sin(B\sqrt{\pi}u)] du; \\ I(Y) &= B\sqrt{\pi} \int_0^\infty y_{ex}(t-u) \exp(-B\sqrt{\pi}u) \times \\ &\times [\cos(B\sqrt{\pi}u) - \sin(B\sqrt{\pi}u)] du. \end{aligned}$$

Из (16a) получается решение так называемой «обратной задачи»: требуется найти температуру среды $y_{ex}(t)$, если известна температура поверхности $Y(t)$. В силу полученного решения задачи (16a) можно записать, что

$$y_{ex}(t) = \left(1 + \gamma^{-1} \frac{d}{dt} \right) Y(t) = Y(t) + \gamma^{-1} \frac{dY}{dt}. \quad (17)$$

Можно рассматривать выражение (17) как решение интегрального уравнения (16) или просто исключить $y_{ex}(t)$ из задачи Коши (15).

Наряду с задачей (15) рассмотрим кано-

ническую, аддитивно удвоенную систему:

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt} = \gamma(y_{ex} - Y - Z); \\ \frac{dZ}{dt} = \gamma Z, \end{cases} \quad (18)$$

которая связана с гамильтонианом

$$E(Y, Z) = \gamma(y_{ex} - Y)Z - \frac{\gamma Z^2}{2}, \quad E(Y, 0) = 0.$$

Тогда в действительном процессе пространства тепла, согласно системе (18), следует записать:

$$s(Y) = \int_0^\infty \left(\frac{dY}{dt} - \gamma(y_{ex} - Y) \right)^2 dt \rightarrow \inf \geq 0. \quad (19)$$

Пусть $Y(t)$ удовлетворяет задаче Коши (15). Тогда $s(Y) = 0$. Существуют решения, отличные от (16). Условие (19) совпадает с так называемым «принципом наименьшего принуждения» Гаусса (метод наименьших квадратов).

Заключение

Итак, в данной статье получены обоснования для следующих утверждений:

уравнения параболического типа, допускающие группу автомодельных преобразований, представляют собой необходимое условие минимума для положительных функционалов;

уравнение Крокко равносильно канонической системе, и для него соответствующий минимизируемый функционал выводится непосредственно;

в исходной форме предельная задача для уравнения параболического типа приводится к каноническому виду аддитивным удвоением переменных. В результате плотность распределения получается как двойственная функция для гамильтониана канонической системы;

переход от сильных решений исходных предельных задач к вариационным задачам позволяет расширить топологию решения от $C^{(2)}(E)$ до $W_2^{(1)}(E)$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Коул Дж. Методы возмущений в прикладной математике. М.: Мир, 1972. С. 83–87.
2. Ильин А.М. Разностная схема для дифференциальных уравнений с малым параметром при старшей производной // Математические заметки. 1969. Т. 6. № 2. С. 237–248.
3. Natividad M.C., Stones M. Richardson extrapolation for a diffusion-convection problem using a Shishkin mesh // Applied Numerical Mathematics. 2003. Vol. 45. No. 2, pp. 315–329.
4. Хан Н., Kellog R.B. Flow directed iterations for convection dominated flow // Proceeding of the 5 th Int. Conf. on Boundary and Interior layers. SF. 1988, pp. 5–17.
5. Тиховская С.В. Схема второго порядка точности для нелинейного сингулярно возмущенного уравнения второго порядка // Сборник статей секции «Физико-математические науки». Омск: Изд-во Омского гос. ун-та, 2012. С. 44–47.
6. Задорин А.И., Тиховская С.В. Решение нелинейного сингулярно возмущенного уравнения второго порядка // Сибирский журнал вычислительной математики. 2013. Т. 16. № 1. С. 11–25.
7. Переломов А.М. Интегрируемые системы классической механики и алгебры Ли. М.: Наука, 1990. 240 с.
8. Богословский В.Н. Теоретические основы вентиляции и строительная теплофизика. М.: МГСУ, 2004. 376 с.
9. Дикуссар В.В., Милютин А.А. Качественные и численные методы в принципе максимума. М.: Наука, 1989. 144 с.
10. Куколев М.И., Петриченко М.Р. Определение температурного поля стенки при периодическом тепловом воздействии // «Двигатель-2007». Труды международной конференции. М.: МГТУ, 2007. С. 115–119.
11. Айнола Л.Я. Вариационные принципы для нестационарных задач теплопроводности // Инженерно-физический журнал. 1967. Т. 12. № 4. С. 465 – 468.
12. Био М. Вариационные принципы в теории теплообмена. М.: Энергия, 1975. 209 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ПЕТРИЧЕНКО Михаил Романович – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой гидравлики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.

fonpetrich@mail.ru

Petrichenko M.R. EXTREME PROPERTIES OF SOLUTIONS OF A PARABOLIC EQUATION.

Rational procedures and properties of solutions of limiting problems have been considered for equations and limiting problems with partial derivatives of a parabolic type. It was proved that such limiting problems for parabolic equations admitting the group of self-transformations were necessary conditions for a minimum of positive functionals; furthermore, the Crocco equation was proved to be equivalent to a canonical system and its applicable functional was shown to be found at once. It was also demonstrated that someone was able to bring a parabolic equation in its original notation into a canonical form using additive doubling variables.

TRANSFORMATION GROUP, LAYER, EXTREME, PARABOLIC EQUATION, CROCCO EQUATION, ADDITIVE DOUBLING OF VARIABLES.

REFERENCES

1. Cole J.D. *Metody vozmushcheniy v prikladnoy matematike* [Perturbation methods in applied mathematics]. Moscow, Mir, 1972, pp. 83-87. (rus)
2. Il'in A.M. Raznostnaya skhema dlya differentsial'nykh uravneniy s malym parametrom pri starshykh proizvodnoy. *Matematicheskie zametki*, 1969, Vol. 6, No. 2, pp. 237-248. (rus)
3. Natividad M.C., Stones M. Richardson extrapolation for a diffusion-convection problem using a Shishkin mesh. *Applied Numerical Mathematics*, 2003, Vol. 45, No. 2, pp. 315-329.
4. Han H., Kellog R.B. Flow directed iterations for convection dominated flow. *Proceeding of the 5 th Int. Conf. on Boundary and Interior layers*. SF, 1988, pp. 5-17.
5. Tikhovskaya S.V. Skhema vtorogo poryadka tochnosti dlya nelineynogo singulyarno vozmushchennogo uravneniya vtorogo poryadka. *Sbornik statey seksii «Fiziko-matematicheskie nauki»*, Omsk, Omskiy gos. Universitet, 2012, pp. 44-47. (rus)
6. Zadorin A.I., Tikhovskaya S.V. Reshenie nelineynogo singulyarno vozmushchennogo uravneniya vtorogo poryadka. *Sibirskiy zhurnal vych. matematiki*, 2013, Vol. 16, No. 1, pp. 11-25. (rus)
7. Perelomov A.M. *Integriruyemye sistemy klassicheskoy mekhaniki i algebry Li*. Moscow, Nauka, 1990. 240 p. (rus)
8. Bogoslovskiy V.N. *Teoreticheskie osnovy ventilyatsii i stroitel'naya teplofizika*. Moscow, MGSU, 2004. 376 p. (rus)
9. Dikussar V.V., Milyutin A.A. *Kachestvennye i chislennye metody v printsipe maksimuma*. Moscow, Nauka, 1989. 144 p. (rus)
10. Kukolev M. I., Petrichenko M. R. *Opreделение temperaturnogo polya stenki pri periodicheskom teplovom vozdeystvii*. Dvigatel'-2007, Trudy Mezhdunarodnoy konferentsii. Moscow, MG TU, 2007, pp. 115-119. (rus)
11. Aynola L.Ya. Variatsionnye printsipy dlya nestatsionarnykh zadach teploprovodnosti. *Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal*, 1967, Vol. 12, No. 4, pp. 465-468. (rus)
12. Bio M. *Variatsionnye printsipy v teorii teploobmena*. Moscow, Energiya, 1975, 209 p. (rus)

THE AUTHOR

PETRITCHENKO Mikhail R.

St. Petersburg State Polytechnical University

29, Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

fonpetrich@mail.ru



УДК 517.928

В.И. Качалов

Национальный исследовательский университет «Московский энергетический институт»

ГОЛОМОРФНЫЕ ПО ПАРАМЕТРУ ИНТЕГРАЛЫ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННЫХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА И ПРЕДЕЛЬНЫЕ ТЕОРЕМЫ

На основе гомоморфизмов алгебр голоморфных функций от различного числа переменных строятся голоморфные по параметру интегралы сингулярно возмущенного уравнения второго порядка. Из построенных интегралов следует теорема о предельном переходе.

ГОМОМОРФИЗМ, ПРЕДЕЛЬНЫЙ ПЕРЕХОД, ПСЕВДОГОЛОМОРФНОЕ РЕШЕНИЕ, СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННОЕ УРАВНЕНИЕ, КОММУТАЦИОННОЕ СООТНОШЕНИЕ.

Введение

Основу качественной теории сингулярных возмущений составляют предельные теоремы. Каким бы методом ни решалась сингулярно возмущенная задача, вопрос о пределе решения при стремлении параметра к нулю остается одним из главных [1–3]. Фундаментальной в теории сингулярных возмущений является теорема А.Н. Тихонова о предельном переходе [1]. Понятие псевдоаналитического решения, введенное С.А. Ломовым в рамках метода регуляризации, автоматически обеспечивает данный предельный переход [4]. Однако не все сингулярно возмущенные задачи имеют такие решения. В настоящей статье на основе гомоморфизмов алгебр голоморфных функций от различного числа переменных [9] строятся голоморфные по параметру интегралы дифференциальных уравнений второго порядка. Из построенных интегралов следуют утверждения о предельном переходе, которые рассматривались ранее (например, с точки зрения метода верхних и нижних решений [7]).

Гомоморфизмы и голоморфные по параметру интегралы уравнения второго порядка

Рассмотрим уравнение

$$\varepsilon \frac{d^2 y}{dx^2} = h(x, y), \quad (1)$$

где $h(x, y)$ — вещественно-голоморфная в прямоугольнике

$$\Pi = \{(x, y) : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq a\}$$

функция.

Напомним, что функция $f(x, y)$ называется вещественно-голоморфной на компакте $G \subset R^2$, если существуют положительные константы M и C такие, что

$$|D^\alpha f| \leq MC^{|\alpha|} (|\alpha|!) \quad \forall (x, y) \in G, \\ |\alpha| = 0, 1, 2, \dots$$

Здесь

$$D^\alpha f = \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x^{\alpha_1} \partial y^{\alpha_2}}, \quad |\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2.$$

Далее, пусть функция $h(x, y)$ имеет единственный корень $y = \varphi(x)$, вещественно-голоморфный на отрезке $[0; 1]$, причем кривая $y = \varphi(x)$ принадлежит Π . Обозначим через Π_γ множество

$$\{(x, y) \in \Pi : |h(x, y)| \geq \gamma > 0\},$$

затем сведем уравнение (1) к системе

$$\begin{cases} y' = v, \\ \varepsilon v' = h(x, y) \end{cases} \quad (2)$$

и составим уравнение интегралов этой системы:

$$\varepsilon \left(\frac{\partial U}{\partial x} + v \frac{\partial U}{\partial y} \right) + h(x, y) \frac{\partial U}{\partial v} = 0. \quad (3)$$

Пусть

$$L = \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y}.$$

Тогда уравнение (3) примет следующий вид:

$$\varepsilon LU + h(x, y) \frac{\partial U}{\partial v} = 0.$$

Будем искать решение уравнения (3) в виде ряда по степеням ε :

$$U(x, y, v, \varepsilon) = U_0(x, y, v) + \varepsilon U_1(x, y, v) + \dots \quad (4)$$

В соответствии с методом неопределенных коэффициентов,

$$\begin{aligned} U_0(x, y) &= \psi(x, y); \\ h(x, y) \frac{\partial U_1}{\partial v} &= -LU_0; \\ h(x, y) \frac{\partial U_1}{\partial v} &= -LU_1; \\ &\dots\dots\dots; \\ h(x, y) \frac{\partial U_m}{\partial v} &= -LU_{m-1}; \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (5)$$

Фиксируем $\gamma > 0$. Тогда на множестве Π_γ имеем:

$$\begin{aligned} U(x, y, v, \varepsilon) &\equiv A_\varepsilon[\psi(x, y)] = \\ &= \psi(x, y) - \varepsilon \int_{v_0}^v \frac{L\psi}{h(x, y)} dv_1 + \\ &+ \varepsilon^2 \int_{v_0}^v \frac{dv_1}{h(x, y)} L \left(\int_{v_0}^{v_1} \frac{L\psi}{h(x, y)} dv_2 \right) - \\ &- \varepsilon^3 \int_{v_0}^v \frac{dv_1}{h(x, y)} L \left(\int_{v_0}^{v_1} \frac{dv_2}{h(x, y)} \times \right. \\ &\times \left. L \left(\int_{v_0}^{v_2} \frac{L\psi}{h(x, y)} dv_3 \right) \right) + \dots \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $\psi(x, y)$ – произвольная, голоморфная на прямоугольнике Π , функция; v_0 – произвольное число.

Докажем сходимость ряда (6) в некоторой окрестности точки $\varepsilon = 0$. Для этого нам понадобится элементарная лемма, которая доказывается методом математической индукции.

Лемма 1. Пусть функции $g_1(t), \dots, g_n(t)$ дифференцируемы n раз в некоторой окрестности точки t_0 . Тогда, если в выражении

$$(g_n(t)(g_{n-1}(t)\dots(g_1(t)))' \dots)'$$

раскрыть скобки по формуле производной произведения и заменить $g_r^{(s)}$, на $s!$ (где $1 \leq r \leq n, 0 \leq s \leq n$), то полученная сумма будет равна $(2n - 1)!!$.

Применим лемму 1 для оценки

$$\begin{aligned} U_m(x, y, v) &= \int_{v_0}^v \frac{dv_1}{h(x, y)} L \left(\int_{v_0}^{v_1} \frac{dv_2}{h(x, y)} \times \right. \\ &\times \left. L \left(\int_{v_0}^{v_2} \frac{dv_3}{h(x, y)} \dots L \left(\int_{v_0}^{v_{m-1}} \frac{L\psi}{h(x, y)} dv_m \right) \right) \dots \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Если раскрыть скобки в выражении

$$L \left(\frac{1}{h} L \left(\frac{1}{h} \dots L \left(\frac{1}{h} (L\psi) \right) \right) \dots \right)$$

и заменить производную порядка $|\alpha|$ от $1/h$ на $M_\gamma C^{|\alpha|} (|\alpha|!)$, а производную того же порядка от ψ на $N_\gamma C^{|\alpha|} (|\alpha|!)$, где M_γ, N_γ и C – некоторые положительные константы, то полученная сумма будет иметь вид

$$M_\gamma^{m-1} N_\gamma C^m [(2m - 1)!!] (v + 1)^m.$$

Действительно, оценка производной зависит только от ее порядка и не зависит от того, по какой переменной и сколько раз производилось дифференцирование (лишь бы $\alpha_1 + \alpha_2 = |\alpha|$). В этом смысле можно заменить x и y на одну переменную. Обозначим ее через t . Но тогда оператор L превратится в оператор $\tilde{L} = (v + 1)(\partial / \partial t)$, для которого уже верна лемма 1. В итоге имеем следующее соотношение:

$$\begin{aligned} |U_m(x, y, v)| &\leq M_\gamma^{m-1} N_\gamma C^m [(2m - 1)!!] \times \\ &\times \left| \int_{v_0}^v dv_1 \int_{v_0}^{v_1} dv_2 \dots \int_{v_0}^{v_{m-1}} (v + 1)^m dv_m \right| \leq \\ &\leq \frac{M_\gamma^{m-1} N_\gamma [(2m - 1)!!] |v - v_0|^m |v| + 1^m C^m}{m!}. \end{aligned} \quad (8)$$

Заметим, что $M_\gamma \rightarrow \infty$ при $\gamma \rightarrow 0$, поскольку неограниченно возрастает максимум модуля $1/h(x, y)$ на множестве Π_γ , когда $\Pi_\gamma \rightarrow \Pi$. Из оценки (8) следует равномерная сходимость ряда (4) на множестве

$$\tilde{\Pi}_{\gamma\delta} = \Pi_\gamma \times \{v : |v - v_0| \leq \delta\},$$

где δ – произвольное положительное число в некоторой окрестности точки $\varepsilon = 0$.

Итак, интеграл системы (2), определяемый формулой (6), представляет собой голоморфную функцию в точке $\varepsilon = 0$. С другой стороны, формула задает линейное (при каждом ε из некоторой окрестности точки $\varepsilon = 0$) отображение A_ε ал-

гебры $\mathcal{A}(\Pi)$ функций двух переменных (x, y) , голоморфных на прямоугольнике Π , в алгебру $\mathfrak{A}(\tilde{\Pi}_{\gamma\delta})$ функций трех переменных (x, y, v) , голоморфных на множестве $\tilde{\Pi}_{\gamma\delta}$. Обозначим через

$$U^{(1)}(x, y, v, \varepsilon) = A_\varepsilon[x]; \quad U^{(2)}(x, y, v, \varepsilon) = A_\varepsilon[y]$$

два независимых интеграла системы (2), являющихся образами соответственно элементов x и y алгебры $\mathcal{A}(\Pi)$ (независимость интегралов очевидна).

Пусть $\psi(x, y) \in \mathcal{A}(\Pi)$, тогда в соответствии с общей теорией систем дифференциальных уравнений, существует дифференцируемая функция Ψ двух переменных такая, что

$$A_\varepsilon[\psi(x, y)] = \Psi(A_\varepsilon[x], A_\varepsilon[y]). \quad (9)$$

Полагая в равенстве (9) $v = v_0$ (см. формулу (6)), будем иметь

$$\psi(x, y) = \Psi(x, y).$$

Следовательно, равенство (9) примет вид коммутационного соотношения (см. работу [5]):

$$A_\varepsilon[\psi(x, y)] = \psi(A_\varepsilon[x], A_\varepsilon[y]). \quad (10)$$

С помощью полученного соотношения (10) докажем следующее утверждение.

Утверждение. A_ε – семейство голоморфных в точке $\varepsilon = 0$ (равномерно на Π_γ) гомоморфизмов алгебры $\mathcal{A}(\Pi)$ в алгебру $\mathfrak{A}(\tilde{\Pi}_{\gamma\delta})$.

Действительно, пусть

$$\alpha(x, y), \beta(x, y) \in \mathcal{A}(\Pi).$$

Тогда

$$\begin{aligned} A_\varepsilon[\alpha(x, y)\beta(x, y)] &= A_\varepsilon[(\alpha\beta)(x, y)] = \\ &= (\alpha\beta)(A_\varepsilon[x], A_\varepsilon[y]) = \alpha(A_\varepsilon[x], A_\varepsilon[y]) \times \\ &\times \beta(A_\varepsilon[x], A_\varepsilon[y]) = A_\varepsilon[\alpha(x, y)]A_\varepsilon[\beta(x, y)]. \end{aligned}$$

Утверждение доказано.

О методе голоморфной регуляризации

Рассмотрим более общее уравнение

$$\varepsilon \frac{d^2 y}{dx^2} = h\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right), \varepsilon > 0 \quad (11)$$

с начальными условиями

$$y(0, \varepsilon) = y_0, \quad y'(0, \varepsilon) = v_0. \quad (12)$$

Пусть $\mathfrak{A}(\tilde{\Pi}_\delta)$ – алгебра функций трех

переменных (x, y, v) , голоморфных на множестве

$$\tilde{\Pi}_\delta = \Pi \times \{v : |v - v_0| \leq \delta\}.$$

Теорема 1. Если функция $h(x, y, v) \in \mathfrak{A}(\tilde{\Pi}_\delta)$ и не обращается на множестве $\tilde{\Pi}_\delta$ в нуль, то отображения

$$B_\varepsilon : \mathcal{A}(\Pi) \rightarrow \mathfrak{A}(\tilde{\Pi}_\delta),$$

заданные формулой

$$\begin{aligned} (B_\varepsilon \varphi)(x, y, v) &= \varphi(x, y) - \varepsilon \int_{v_0}^v \frac{L\varphi dv_1}{h(x, y, v_1)} + \\ &+ \varepsilon^2 \int_{v_0}^v \left(L \int_{v_0}^{v_1} \frac{L\varphi dv_2}{h(x, y, v_2)} \right) \frac{dv_1}{h(x, y, v_1)} - \\ &- \varepsilon^3 \int_{v_0}^v \left(L \int_{v_0}^{v_1} \left(L \int_{v_0}^{v_2} \frac{L\varphi dv_3}{h(x, y, v_3)} \right) \frac{dv_2}{h(x, y, v_2)} \right) \times \\ &\times \frac{dv_1}{h(x, y, v_1)} + \dots, \end{aligned} \quad (13)$$

образуют голоморфное в точке $\varepsilon = 0$ семейство гомоморфизмов алгебры $\mathcal{A}(\Pi)$ в алгебру $\mathfrak{A}(\tilde{\Pi}_\delta)$, удовлетворяющих коммутационному соотношению

$$\begin{aligned} (B_\varepsilon \varphi)(x, y, v) &= \varphi((B_\varepsilon x)(x, y, v), \\ (B_\varepsilon y)(x, y, v)), \quad \forall \varphi(x, y) &\in \mathcal{A}(\Pi). \end{aligned} \quad (14)$$

При этом $\text{Im} B_\varepsilon$ состоит из интегралов системы

$$\begin{cases} y' = v; \\ \varepsilon v' = h(x, y, v), \end{cases} \quad (15)$$

голоморфных в точке $\varepsilon = 0$ (равномерно на $\tilde{\Pi}_\delta$), а интегралы, участвующие в правой части коммутационного соотношения, являются независимыми.

Доказательство теоремы 1 проводится по схеме метода, изложенного в предыдущем разделе, с использованием леммы 1.

Замечание. Приведенная теорема 1 позволяет дополнить теорему Пуанкаре о разложении [8]. Действительно, если задана задача Коши

$$y'' = h(x, y, y', \varepsilon); \quad y(0, \varepsilon) = y_0, y'(0, \varepsilon) = v_0, \quad (16)$$

и функция $h(x, y, v, \varepsilon)$ голоморфна в точке

$(0, y_0, v_0, 0)$, то решение $y(x, \varepsilon)$ этой задачи голоморфно в точке $(0, 0)$ и наследует, таким образом, голоморфную зависимость от ε правой части уравнения (16). Требовать того же самого от решения сингулярно возмущенного уравнения (1), очевидно, нельзя. И тем не менее, в соответствии с теоремой 1, не сами решения, так интегралы системы (15) наследуют голоморфную зависимость коэффициентов уравнения от параметра ε , который входит и в уравнение, и в систему голоморфным (даже целым) образом.

Таким образом, впервые в теории асимптотического интегрирования доказано существование такой характеристики сингулярно возмущенной задачи, которая представляет собой сходящийся в обычном смысле ряд по степеням малого параметра ε .

Изложим схему метода голоморфной регуляризации. Вначале строятся независимые, голоморфные в точке $\varepsilon = 0$, интегралы

$$(B_\varepsilon \varphi)(x, y, v); (B_\varepsilon(y - y_0))(x, y, v),$$

причем

$$\varphi(0) = 0, \varphi'(x) < 0 \forall x \in [0, 1].$$

Ясно, что соответствующие им первые интегралы

$$\begin{cases} (B_\varepsilon \varphi)(x, y, v) = 0; \\ (B_\varepsilon(y - y_0))(x, y, v) = 0, \end{cases} \quad (17)$$

определяют решение $y(x, \varepsilon)$ задачи Коши (11), (12).

Далее, с помощью формулы (13) первое уравнение системы (17) можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\varphi(x)}{\varepsilon} &= \varphi'(x) \int_{v_0}^v \frac{dv_1}{h(x, y, v_1)} - \\ &- \varepsilon \int_{v_0}^v \left(L \int_{v_0}^{v_1} \frac{\varphi' dv_2}{h(x, y, v_2)} \right) \frac{dv_1}{h(x, y, v_1)} + \dots \end{aligned} \quad (18)$$

Нетрудно видеть, что если уравнение

$$\frac{\varphi(x)}{\varepsilon} = \varphi'(x) \int_{v_0}^v \frac{dv_1}{h(x, y, v_1)} \quad (19)$$

имеет решение

$$v = V_0 \left(x, \frac{\varphi(x)}{\varepsilon} \right),$$

равномерно ограниченное при $\varepsilon \rightarrow +0$ на отрезке $[0, 1]$ при каждом фиксированном y из некоторой окрестности точки y_0 , то для нахождения $y(x, \varepsilon)$ к уравнению (18) (вместе со вторым уравнением системы (17)) можно применить теорему о неявной функции. Именно так возникла концепция псевдоголоморфного решения [5, 10].

В качестве примера использования метода голоморфной регуляризации рассмотрим задачу Коши

$$\begin{aligned} \varepsilon y'' &= e^{-2xy} - (y')^2, \quad x \in [0, 1/2]; \\ y(0, \varepsilon) &= y_0, \quad y'(0, \varepsilon) = 0. \end{aligned}$$

Подставим последовательно в равенство (13) вместо $\varphi(x, y)$ сначала $-x$, а затем $y - \alpha(x)$, где $\alpha(x)$ — точное решение предельной начальной задачи:

$$\frac{d\bar{y}}{dx} = e^{-x\bar{y}}, \quad \bar{y}(0) = 0,$$

тогда получим систему, аналогичную системе (17), заменив во втором уравнении $(y - y_0)$ на $y - \alpha(x)$:

$$\begin{cases} -x + \varepsilon \int_0^v \frac{dv_1}{e^{-2xy} - v_1^2} + o(\varepsilon) = 0; \\ y - \alpha(x) + \varepsilon \int_0^v \frac{\alpha'(x) - v_1}{e^{-2xy} - v_1^2} dv_1 + o(\varepsilon) = 0. \end{cases}$$

Наконец, пользуясь теоремой о неявной функции, найдем решение поставленной задачи Коши:

$$y = \alpha(x) - \varepsilon \cdot \ln \left(1 + \text{th} \frac{x e^{-x\alpha(x)}}{\varepsilon} \right) + o(\varepsilon), \quad \varepsilon \rightarrow 0.$$

Решение $\alpha(x)$ предельной задачи можно построить в виде ряда по степеням x , равномерно сходящегося на отрезке $[0, 1/2]$. В частности,

$$\alpha(x) = x - \frac{x^3}{3} + o(x^4).$$

Заметим, что существование ограниченного при $\varepsilon \rightarrow +0$ решения уравнения (17), составленного для рассматриваемого примера, следует из свойства асимптотической устойчивости точки покоя $\tilde{v}_0 = e^{-xy}$ так на-

зываемого присоединенного уравнения:

$$\frac{d\tilde{v}}{ds} = e^{-2xy} - \tilde{v}^2,$$

равномерно по $x \in [0, 1/2]$ и $y \in [0, \delta]$ при любом $\delta > 0$, что находится в полном соответствии с теоремой Тихонова о предельном переходе [2].

В случае уравнения (1), когда

$$h(x, y, v) \equiv h(x, y),$$

всякая функция $V_0(x, \varphi(x) / \varepsilon)$, удовлетворяющая уравнению (19), очевидно, будет неограниченной при любом способе стремления ε к нулю, и в этих условиях можно говорить лишь о предельном переходе.

В следующем разделе статьи на примере уравнения химической кинетики будет показано, как из голоморфности интегралов следует предельный переход. Поведение решения этого уравнения при стремлении параметра к нулю подробно описано в книге [7]. Однако мы считаем, что указанный подход можно применять и в тех случаях, когда использование метода верхних и нижних решений затруднено.

Предельная теорема

Рассмотрим интеграл $U^1(x, y, v, \varepsilon)$. Ясно, что первый интеграл $U^1(x, y, v, \varepsilon) = \sigma$, или в развернутом виде

$$x - \sigma = \varepsilon \left(\frac{v - v_0}{h(x, y)} + \varepsilon \left(h'_x \frac{(v - v_0)^2}{2} + h'_y \frac{(v - v_0)^3}{3} \right) h^{-3}(x, y) + \dots \right) \quad (20)$$

при каждом фиксированном $\sigma \in [0, 1]$ определяет решения системы (2) такие, что $v(\sigma, \varepsilon) = v_0$.

Далее будем считать, что решение $y(x, \varepsilon)$ уравнения (1) принадлежит классу $V_h[0, 1]$, если оно существует на отрезке $[0, 1]$, и выполнены следующие два условия:

1. $\forall \sigma \in \left(0, \frac{1}{2}\right) \exists M_\sigma > 0 :$
 $\forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_0) \forall x \in [\sigma, 1 - \sigma] |y'(x, \varepsilon)| \leq M_\sigma;$
2. $\forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$ кривая
 $\Gamma_\varepsilon = \{(x, y(x, \varepsilon)); x \in [0, 1]\}$

принадлежит Π .

Если $y(x, \varepsilon) \in V_h[0, 1]$, то $v(x, \varepsilon) = y'(x, \varepsilon)$ ограничено на отрезке $[\sigma, 1 - \sigma]$. Поэтому правая часть интеграла (20), которую мы обозначим через $W^1(x, y, v, \varepsilon)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$ также будет стремиться к нулю равномерно на множестве $\tilde{\Pi}_{\gamma_0}$ при каждом фиксированном значении $\gamma > 0$ и $\delta > 0$, определяемых константой M_σ из условия 1.

Теорема 2 (о предельном переходе). *Если $y(x, \varepsilon) \in V_h[0, 1]$, то имеет место предельный переход*

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} y(x, \varepsilon) = \varphi(x) \forall x \in (0; 1). \quad (21)$$

Доказательство. Пусть $y(x, \varepsilon)$ — решение уравнения (1) из класса $V_h[0, 1]$. Предположим противное, т. е. что для некоторого $x \in (0, 1)$ предел (21) не имеет места, и выберем $\sigma \in (0, 1/2)$ так, чтобы $x \in (\sigma, 1 - \sigma)$. Это означает, что существует последовательность $\varepsilon_k \rightarrow 0$ и константа $\gamma_1 > 0$ такие, что $|y_k - \varphi(x)| > \gamma_1$, где $y_k = y(x, \varepsilon_k)$. Но тогда найдется положительная константа γ_2 , для которой будет выполнено неравенство $|h(x, y_k)| > \gamma_2$ при всех $k = 1, 2, \dots$, из которого следует, что $(x, y_k) \in \Pi_{\gamma_2}$. Согласно вышеизложенным рассуждениям, $W^1(x, y, v, \varepsilon_k) \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$ равномерно на множестве $\tilde{\Pi}_{\gamma_2 \delta}$.

С другой стороны,

$$W^1(x, y(x, \varepsilon_k), v(x, \varepsilon_k), \varepsilon_k) = x - \sigma,$$

поскольку $y(x, \varepsilon)$ есть решение уравнения (1). Отсюда следует, что $x = \sigma$, а это противоречит выбору σ .

Теорема доказана.

Пример краевой задачи

Рассмотрим краевую задачу

$$\varepsilon \frac{d^2 y}{dx^2} = (y - \varphi(x))^{2k+1}; \quad (22)$$

$$y(0, \varepsilon) = y(1, \varepsilon) = 0 \quad (k \in \mathbb{N}, \varepsilon > 0).$$

Разрешимость задачи (22) следует как из теоремы об обратной функции в банаховом пространстве, так и из принципа Шаудера [6]. Наложим на функцию $\varphi(x)$ следующие условия:

1. $\varphi(x)$ вещественно-голоморфна на отрезке $[0, 1]$;

$$2. \varphi''(x) < 0 \forall x \in [0, 1];$$

$$3. \varphi(0) \geq 0, \varphi(1) \geq 0.$$

Лемма 2. При выполнении условий 1–3 решение задачи (22) удовлетворяет неравенству

$$0 \leq y(x, \varepsilon) \leq \varphi(x) \forall x \in [0, 1] \forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_0).$$

При этом интегральная кривая $y = y(x, \varepsilon)$ является выпуклой на рассматриваемом отрезке.

Доказательство. Пусть это не так. Тогда существует дуга l_ε кривой $y = y(x, \varepsilon)$, лежащая выше кривой $y = \varphi(x)$ и пересекающая ее (в силу краевых условий и условия 3) в точках T_1 и T_2 с абсциссами x_1 и x_2 соответственно ($x_1 < x_2$). Как следует из уравнения (22), дуга l_ε является вогнутой на отрезке $[x_1, x_2]$, а значит лежит ниже хорды $T_1 T_2$. Но, в соответствии с условием 2, дуга кривой $y = \varphi(x)$ с концами в точках T_1 и T_2 является выпуклой и поэтому лежит выше хорды $T_1 T_2$, а это противоречит предположению, что l_ε находится выше кривой $y = \varphi(x)$. Выпуклость кривой $y = y(x, \varepsilon)$ на отрезке $[0, 1]$ (при каждом $\varepsilon > 0$) следует из уравнения (22).

Следующая лемма имеет тривиальный характер и доказывается с помощью простейших геометрических рассуждений.

Лемма 3. Если $\psi(x) \geq 0$ и

$\psi''(x) < 0 \forall x \in [0, 1]$, то для любого $\sigma \in (0, 1/2)$ на отрезке $[\sigma, 1 - \sigma]$ выполняется неравенство $|\psi'(x)| < R / \sigma$, где $R = \max_{x \in [0, 1]} \psi(x)$.

Доказательство. Вернемся к краевой задаче (22). Из леммы 2 следует, что кривая $y = y(x, \varepsilon)$ является выпуклой, а также находится ниже кривой $y = \varphi(x)$ и выше оси абсцисс при каждом $\varepsilon > 0$. Следовательно, $\max_{x \in [0, 1]} y(x, \varepsilon) \leq R_1$, где $R_1 = \max_{x \in [0, 1]} \varphi(x)$. Поэтому к $y(x, \varepsilon)$ можно применить лемму 2:

$$|y'(x, \varepsilon)| \leq R_1 / \sigma \quad \forall x \in [\sigma, 1 - \sigma],$$

т. е. $y(x, \varepsilon) \in V_h[0, 1]$.

Таким образом, в соответствии с предельной теоремой,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} y(x, \varepsilon) = \varphi(x) \quad \forall x \in (0; 1).$$

Лемма 3 доказана.

Замечание. Уравнение (22) встречается в химической кинетике, и условие принадлежности его решения классу $V_h[0, 1]$ является естественным.

Заключение

Предложенный в работе подход может быть использован в сильно нелинейных, сингулярно возмущенных системах дифференциальных уравнений при исследовании предельного перехода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ломов С.А. Введение в общую теорию сингулярных возмущений. М.: Наука, 1981. 400 с.
2. Васильева А.Б., Бутузов В.Ф. Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. М.: Наука, 1973. 272 с.
3. Бободжанов А.А., Сафонов В.Ф. Регуляризованные асимптотические решения интегродифференциальных уравнений типа Фредгольма с нестабильным спектральным значением ядра интегрального оператора // Вестник МЭИ. 2010. № 6. С. 23–33.
4. Ломов С.А., Качалов В.И. Псевдоаналитические решения сингулярно возмущенных задач // Доклады РАН. 1993. Т. 334. № 6. С. 694–695.
5. Качалов В.И. Голоморфная регуляриза-
- ция сингулярно возмущенных задач // Вестник МЭИ. 2010. № 6. С. 54–62.
6. Треногин В.А. Функциональный анализ. М.: Наука, 1980. 496 с.
7. Чанг К., Хауэс Ф. Нелинейные сингулярно возмущенные краевые задачи. М.: Мир, 1988. 247 с.
8. Бибииков Ю.Н. Общий курс обыкновенных дифференциальных уравнений. Л.: Изд-во ЛГУ, 1981. 232 с.
9. Качалов В.И. Гомоморфизмы в теории дифференциальных уравнений // Дифференциальные уравнения. 2011. Т. 47. № 11. С. 1660–1661.
10. Качалов В.И. Алгебраические основы теории сингулярно возмущенных уравнений // Доклады РАН. 2012. Т. 443. № 1. С. 7–8.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

КАЧАЛОВ Василий Иванович — кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой высшей математики Национального исследовательского университета «Московский энергетический институт».

111250, Россия, г. Москва, Красноказарменная ул., 14
 kachalovi@mpei.ru

Kachalov V.I. HOLOMORFIC IN THE PARAMETER INTEGRALS OF THE SECOND-ORDER EQUATIONS PERTURBED SINGULARLY AND LIMIT THEOREMS.

Holomorphic in the parameter integrals of the second-order equations perturbed singularly have been built up on the basis of homomorphisms of algebras of holomorphic functions of different numbers of variables. A limit transition theorem follows from those integrals.

HOMOMORPHISM, LIMIT TRANSITION, PSEUDOHOLOMORPHIC SOLUTION, EQUATION PERTURBED SINGULARLY, COMMUTATION RELATION.

REFERENCES

1. **Lomov S.A.** *Vvedenie v obshchuyu teoriyu singulyarnykh vozmushcheniy.* Moscow, Nauka, 1981, 400 p. (rus)
2. **Vasil'eva A.B., Butuzov V.F.** *Asimptoticheskie razlozheniya resheniy singulyarno vozmushchennykh uravneniy.* Moscow, Nauka, 1973, 272 p. (rus)
3. **Bobodzhanov A.A., Safonov V.F.** Regularizovannye asimptoticheskie resheniya integrodifferentsial'nykh uravneniy tipa Fredgol'ma s nestabil'nym spektral'nym znacheniem yadra integral'nogo operatora. *Vestnik MEI*, 2010, No. 6, pp. 23-33. (rus)
4. **Lomov S.A., Kachalov V.I.** Psevdoanaliticheskie resheniya singulyarno vozmushchennykh zadach. *Doklady RAN*, 1993, Vol. 334, No. 6, pp. 694-695. (rus)
5. **Kachalov V.I.** Golomorfnyaya regularizatsiya singulyarno vozmushchennykh zadach. *Vestnik MEI*, 2010, No. 6, pp. 54-62. (rus)
6. **Trenogin V.A.** *Funktional'nyy analiz.* Moscow, Nauka, 1980, 496 p. (rus)
7. **Chang K., Khaues F.** *Nelineynye singulyarno vozmushchennyye kraevyye zadachi.* Moscow, Mir, 1988, 247 p. (rus)
8. **Bibikov Yu.N.** *Obshchiy kurs obyknovennykh differentsial'nykh uravneniy.* Leningrad, Izd-vo LGU, 1981, 232 p. (rus)
9. **Kachalov V.I.** Gomomorfizmy v teorii differentsial'nykh uravneniy. *Differentsial'nye uravneniya*, 2011, Vol. 47, No. 11, pp. 1660-1661. (rus)
10. **Kachalov V.I.** Algebraicheskie osnovy teorii singulyarno vozmushchennykh uravneniy. *Doklady RAN*, 2012, Vol. 443, No. 1, pp. 7-8. (rus)

THE AUTHOR

KACHALOV Vasily I.

National Research University "Moscow Power Engineering Institute",
 14 Krasnokazarmenya St., Moscow, 111250, Russia
 kachalovi@mpei.ru

ТРЕЩИНА ПРОДОЛЬНОГО СДВИГА, УПИРАЮЩАЯСЯ В КЛИНОВИДНОЕ УПРУГОЕ ВКЛЮЧЕНИЕ

В статье рассматривается взаимодействие полубесконечной трещины моды III с клиновидным упругим включением. Изучена сингулярность напряжений в вершине трещины. Показано, что, в отличие от классического случая, при некоторых значениях параметров композита асимптотика напряжений может иметь два сингулярных члена. Исследовано отклонение трещины границей раздела материалов.

ТРЕЩИНА ПРОДОЛЬНОГО СДВИГА, УПРУГОЕ ВКЛЮЧЕНИЕ, СИНГУЛЯРНОСТЬ НАПРЯЖЕНИЙ, ОТКЛОНЕНИЕ ТРЕЩИНЫ.

Введение

Проблема взаимодействия трещин с границей раздела материалов уже давно вызывает большой интерес у механиков. Первой работой в этом направлении стала статья А.Р. Зака и М.Л. Вильямса [1], вышедшая в 1963 году. Далее изучение данной проблемы в рамках плоской и антиплоской задач проводилось как отечественными, так и зарубежными исследователями [2 – 8].

В отличие от классического случая, когда трещина распространяется в однородной среде и поле напряжений в ее вершине имеет корневую особенность, для трещины, которая упирается в границу раздела материалов, особенность также имеет степенной характер, однако показатель сингулярности γ отличен от 0,5. При этом данный показатель является корнем некоторого трансцендентного характеристического уравнения. В работе [2] показано на примере плоской задачи о трещине, перпендикулярной к интерфейсу, что $0 < \gamma < 0,5$, когда первая среда, в которой расположена трещина, является более жесткой по сравнению со второй, и $0,5 < \gamma < 1,0$ в противном случае. Дж. Чанг и Дж. Ху [3] установили, что для наклонной к интерфейсу трещины харак-

теристическое уравнение может иметь не только вещественные, но и комплексные корни.

Следует заметить, что задача о трещине конечной длины на ортогональной границе раздела рассмотрена в плоской постановке в работах А.А. Храпкива [4], а также Т.С. Кука и Ф. Эрдогана [5]. Однако, если в статье [4] проблема сведена к функциональному уравнению Винера – Хопфа и построено его точное решение, то авторы работы [5] получили сингулярное интегральное уравнение, решение которого осуществлено с помощью численной процедуры.

Взаимодействие антиплоской полубесконечной трещины, а также трещины конечной длины, направленной перпендикулярно к прямолинейному интерфейсу, исследовано Ф. Эрдоганом и Т.С. Куком с помощью интегрального преобразования Меллина и сведения задачи к решению сингулярного интегрального уравнения [6]. Изучение наклонной антиплоской трещины было также проведено Д.Н. Феннером [7]. В этих случаях установлено, что показатель сингулярности напряжений может быть только вещественным.



Еще одной характерной чертой задач рассматриваемого направления является возможность преломления трещины границей раздела материалов или расслоения этой границы. Отмеченные эффекты для трещины нормального отрыва, направленной ортогонально интерфейсу, рассмотрены в работах [9, 10]. Преломление полубесконечной трещины продольного сдвига исследовалось и в работах [11, 12], где задача сведена к решению уравнения Винера – Хопфа.

Важно отметить, что для трещины, упирающейся в границу раздела сред, основополагающие величины в механике разрушения, такие как коэффициент интенсивности напряжений и скорость высвобождения энергии в вершине трещины, стремятся либо к нулю, либо к бесконечности [10, 13]. По этой причине классические критерии разрушения Гриффитса – Ирвина в рассматриваемой ситуации становятся неприменимыми. В связи с этим в книге [8] для определения предельной нагрузки предложено использовать критерий разрушения Новожилова.

Анализ случаев, когда антиплоская трещина упирается в точку излома интерфей-

са, проводился в статьях [14, 15].

В настоящей работе исследуется взаимодействие прямолинейной трещины продольного сдвига с границей раздела материалов, имеющей угловую точку. При этом в отличие от случаев, рассмотренных в статьях [14, 15], изучается несимметричная задача, когда линия трещины-разреза не совпадает с осью симметрии бездефектного материала (включения). Детально проанализировано характеристическое уравнение задачи. Показано, что при определенных значениях параметров задачи асимптотика напряжений вблизи вершины трещины определяется двумя сингулярными слагаемыми. На основе критерия максимального сдвигающего напряжения проанализировано направление дальнейшего распространения трещины.

Постановка задачи

Рассмотрим полубесконечную трещину продольного сдвига, расположенную в матрице $\Omega_2 \cup \Omega_3$ и упирающуюся в вершину клиновидного включения Ω_1 (рис. 1). К берегам трещины приложены на расстоянии r_0 от вершины самоуравновешенные сосредоточенные силы величиной T_0 . Ма-

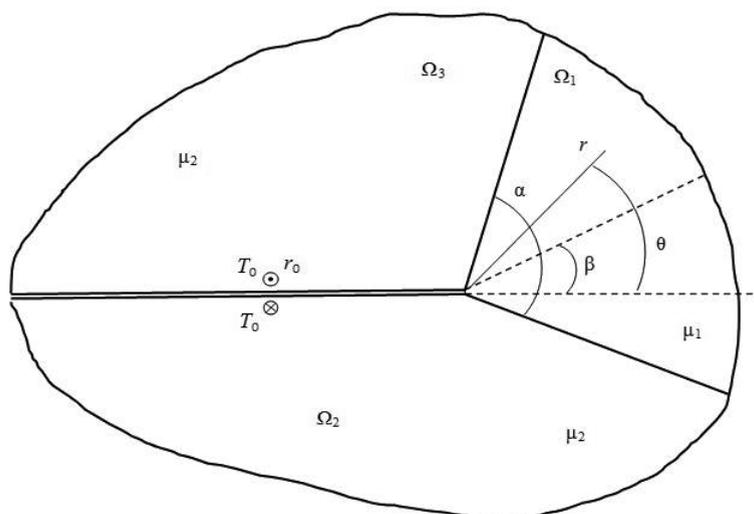


Рис. 1. Схема к постановке задачи: полубесконечная трещина, которая упирается в вершину клиновидного включения; μ_1, μ_2 – модули сдвига материалов включения и матрицы; Ω_1 – область включения; Ω_2, Ω_3 – области матрицы; r_0 – расстояние от вершины до точки приложения нагрузки T_0 ; α – угол раствора включения, β – угол подхода трещины к включению; r, θ – полярные координаты

териалы включения и матрицы считаются однородными и изотропными с модулями сдвига μ_1 и μ_2 , соответственно. Контакт на границах раздела материалов предполагается идеальным.

Геометрию рассматриваемой упругой композиции удобно определять двумя параметрами: углом раствора включения α ($0 < \alpha < 2\pi$) и углом подхода трещины к включению β , т. е. углом между направлением исходной трещины и осью симметрии включения. Очевидно, что $|\beta| \leq \pi - \alpha/2$. Изменение угла β при фиксированном значении α приводит к повороту включения вокруг вершины трещины. Таким образом, угол β характеризует взаимную ориентацию трещины и включения. Например, при $\beta = 0$ задача будет симметричной. Значениям $\beta = \pm(\pi - \alpha/2)$ соответствуют ситуации, когда межфазная трещина выходит в матрицу, а $\beta = \pm\alpha/2$ – ситуации, когда трещина подходит к включению вдоль границы раздела фаз.

С математической точки зрения задача сводится к решению уравнений равновесия в каждой из областей Ω_k :

$$\frac{\partial^2 w_k}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 w_k}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial w_k}{\partial r} = 0 \quad (1)$$

(где $k = 1, 2, 3$; r, θ – полярные координаты; w_k – перемещения вдоль оси z), при условиях идеального контакта фаз, т. е.

$$w_1 = w_2, \quad \tau_{\theta z1} = \tau_{\theta z2} \quad \text{при } \theta = \beta - \alpha/2; \quad (2)$$

$$w_1 = w_3, \quad \tau_{\theta z2} = \tau_{\theta z3} \quad \text{при } \theta = \beta + \alpha/2$$

($\tau_{\theta zk} = \mu_k r^{-1} \partial w_k / \partial \theta$ – касательные напряжения), и условиях на берегах трещины, выраженных как

$$\tau_{\theta z3} = T_0 \delta(r - r_0) \quad \text{при } \theta = \pi, \quad (3)$$

$$\tau_{\theta z2} = T_0 \delta(r - r_0) \quad \text{при } \theta = -\pi.$$

Здесь $\delta(r)$ – дельта-функция Дирака.

Подвергая уравнения (1) интегральному преобразованию Меллина, для трансформант перемещений

$$W_k(p, \theta) = \int_0^\infty w_k(r, \theta) r^{p-1} dr$$

получаем уравнения

$$\frac{d^2 W_k}{d\theta^2} + p^2 W_k = 0. \quad (4)$$

Общие решения уравнений (4) имеют вид

$$W_k(p, \theta) = A_k \sin p\theta + B_k \cos p\theta. \quad (5)$$

Подчиняя функции (5) преобразованным по Меллину граничным условиям (2) и (3), приходим к системе шести линейных алгебраических уравнений относительно величин A_k и B_k ($k = 1, 2, 3$). После осуществления обратного преобразования

$$w_k(r, \theta) = \frac{1}{2\pi i} \int_L W_k(p, \theta) r^{-p} dp,$$

где L – контур интегрирования, находим поля перемещений в каждой области среды.

Данная процедура приводит к следующим представлениям напряжений в областях Ω_k :

$$\tau_{\theta zk}(r, \theta) = \frac{T_0 \lambda_k}{\pi i r} \int_L \left(\frac{r_0}{r}\right)^p S_k(p, \theta) dp, \quad (6)$$

где

$$S_k(p, \theta) = [\varphi_{k1}(p, \alpha, \beta, m) \cos p\theta - \varphi_{k2}(p, \alpha, \beta, m) \sin p\theta] / \Delta(p, \alpha, \beta, m); \quad (7)$$

$$\varphi_{11}(p, \alpha, \beta, m) = \sin p\pi - m \sin[p(\pi - \alpha)] \cos 2p\beta; \quad (8)$$

$$\varphi_{12}(p, \alpha, \beta, m) = m \sin[p(\pi - \alpha)] \sin 2p\beta;$$

$$\varphi_{k1}(p, \alpha, \beta, m) = \sin p\pi + m \sin p\alpha \times \times \cos\{p[\pi - (-1)^k 2\beta]\} - m^2 \cos p\alpha \sin[p(\pi - \alpha)];$$

$$\varphi_{k2}(p, \alpha, \beta, m) = (-1)^k \sin p\alpha \{\sin\{p[\pi - (-1)^k 2\beta]\} - m \sin[p(\pi - \alpha)]\} (k = 2, 3);$$

$$\lambda_1 = 1 + m, \quad \lambda_2 = \lambda_3 = 1;$$

$$\Delta(p, \alpha, \beta, m) = \sin 2p\pi + \quad (9)$$

$$2m \sin p\alpha \cos 2p\beta - m^2 \sin[2p(\pi - \alpha)].$$

Упругие свойства композиции отражены в этих формулах через одну биупругую постоянную

$$m = (\mu_1 - \mu_2) / (\mu_1 + \mu_2).$$

При всех сочетаниях модулей сдвига материалов эта величина удовлетворяет

неравенству $|m| \leq 1$. Если материал включения является более жестким, по сравнению с материалом матрицы, то $0 < m < 1$; в противном случае (для мягкого включения) выполняются неравенства $-1 < m < 0$. Значение $m = 0$ отвечает однородной среде, а значения $m = \pm 1$ определяют абсолютно твердое включение и клиновидный вырез.

Вычисляя напряжения в композиционной среде при $r < r_0$, замкнем контур интегрирования L слева полуокружностью большого радиуса и воспользуемся теоремой Коши о вычетах в полюсах подынтегральной функции (7). Эти полюсы определяются корнями характеристического уравнения

$$\Delta(p, \alpha, \beta, m) = 0. \quad (10)$$

Следует заметить, что это уравнение может быть получено также из более общих соотношений работы [16].

Исследование характеристического уравнения

Функция (9) является целой нечетной функцией параметра интегрального преобразования p , не имеющей нулей на мнимой оси, кроме однократного нуля $p = 0$. Однако согласно формулам (8), эта точка является устранимой особой точкой. Поэтому контур интегрирования L в (6) может быть совмещен с мнимой осью. Можно показать, что комплексных нулей, лежащих в полосе $|\operatorname{Re} p| < 1$, функция (9) не имеет.

В силу нечетности функции (9) каждому корню уравнения (10) $p_- < 0$ соответствует корень $p_+ > 0$, причем $p_- = -p_+$. Поскольку для исследования сингулярности напряжений (6) в вершине трещины интерес представляют корни, по величине не превосходящие единицы, для удобства будем изучать вещественные корни характеристического уравнения, расположенные в интервале $(0, 1)$.

Заметим, что функция (9) является четной функцией угла β . Поэтому в дальнейшем будем рассматривать значения этого параметра, удовлетворяющие неравенству $0 \leq \beta \leq \pi - \alpha/2$.

Обратимся сначала к частным случаям. В симметричной задаче, когда $\beta = 0$, функ-

ция (9) представляется в виде

$$\Delta(p, \alpha, 0, m) = 2\varphi_{11}(p, \alpha, 0, m)\Delta_1(p, \alpha, m).$$

Следовательно, в этом случае, согласно формулам (7) и (8), полюсы подынтегральной функции определяются корнями уравнения

$$\Delta_1(p, \alpha, m) = \cos p\pi + m \cos[p(\pi - \alpha)] = 0. \quad (11)$$

Поскольку

$$\Delta_1(0, \alpha, m) = 1 + m > 0,$$

$$\Delta_1(0, 5, \alpha, m) = m \sin \alpha/2,$$

$$\Delta_1(1, \alpha, m) = -1 + m \cos(\pi - \alpha) < 0,$$

уравнение (11) имеет один вещественный корень в интервале $(0, 1)$, причем $p_{1+} > 0,5$ для жесткого включения и $p_{1+} < 0,5$ для мягкого. В случае, когда $\alpha = \pi$, уравнение (11) приобретает особенно простой вид и согласуется с уравнением, полученным в работе [6].

При $\alpha = \pi$ ($0 < \beta < \pi/2$) включение представляет собой полуплоскость, а характеристическое уравнение (10) записывается следующим образом:

$$\Delta(p, \pi, \beta, m) = 2\Delta_2(p, \beta, m) \sin p\pi = 0;$$

$$\Delta_2(p, \beta, m) = \cos p\pi + m \cos 2p\beta.$$

Уравнение такого вида использовалось в работе [7], а первые его корни обладают такими же свойствами, что и в рассмотренном выше частном случае.

Переходя к общей ситуации, заметим, что вблизи точки $p = 0$ функция (9) допускает представление

$$\Delta(p, \alpha, \beta, m) = 2p(1 + m) \times \\ \times [\pi(1 - m) + m\alpha] + O(p^3).$$

Отсюда вытекает, что при малых p для всех комбинаций материалов и геометрических параметров сама функция и ее производная по аргументу p принимают положительные значения.

В двух других характерных точках $p = 0,5$ и $p = 1,0$ функция (9) имеет вид

$$\Delta(0, 5, \alpha, \beta, m) = 2mf_1(\alpha, \beta, m) \sin \alpha/2, \quad (12)$$

$$\Delta(1, \alpha, \beta, m) = 2mf_2(\alpha, \beta, m) \sin \alpha, \quad (13)$$

где

$$f_1(\alpha, \beta, m) = \cos \beta - m \cos \alpha / 2; \quad (14)$$

$$f_2(\alpha, \beta, m) = \cos 2\beta + m \cos \alpha. \quad (15)$$

Отметим, что уравнение (10) будет иметь корень $p = 0,5$ и, следовательно, поле напряжений будет иметь классическую особенность, если параметры системы удовлетворяют уравнению

$$f_1(\alpha, \beta, m) = 0. \quad (16)$$

При таких параметрах функция (15) представляется в виде

$$f_2(\alpha, \beta, m) = (1 + m)(-1 + m + m \cos \alpha).$$

Отсюда можно утверждать, что в случае жестких включений с углом раствора $0 < \alpha < \pi/2$ при $m \leq 0,5$ ($\mu_1/\mu_2 \leq 3$) и угле β , определяемом равенством (16), характеристическое уравнение задачи будет

иметь в интервале $(0, 1)$ единственный корень $p_{1+} = 0,5$, а при $m > 0,5$ — два корня: $p_{1+} = 0,5$ и $0,5 < p_{2+} < 1,0$. Для углов раствора включения $\pi/2 \leq \alpha \leq \pi$ и любом $0 < m < 1$ существует только один корень $p_{1+} = 0,5$. Если же $\pi \leq \alpha \leq 2\pi$, то классической особенности поле напряжений не имеет.

Пусть параметры системы таковы, что условие (16) не выполняется. Тогда, как показывает рассмотрение представлений (12) — (15), возможны различные случаи расположения вещественных корней уравнения (10) в интервале $(0, 1)$.

Треугольная область изменения геометрических параметров

$$D = \{(\alpha, \beta) : 0 < \alpha < 2\pi, 0 \leq \beta \leq \pi - \alpha/2\}$$

линиями нулевого уровня функций (14) и

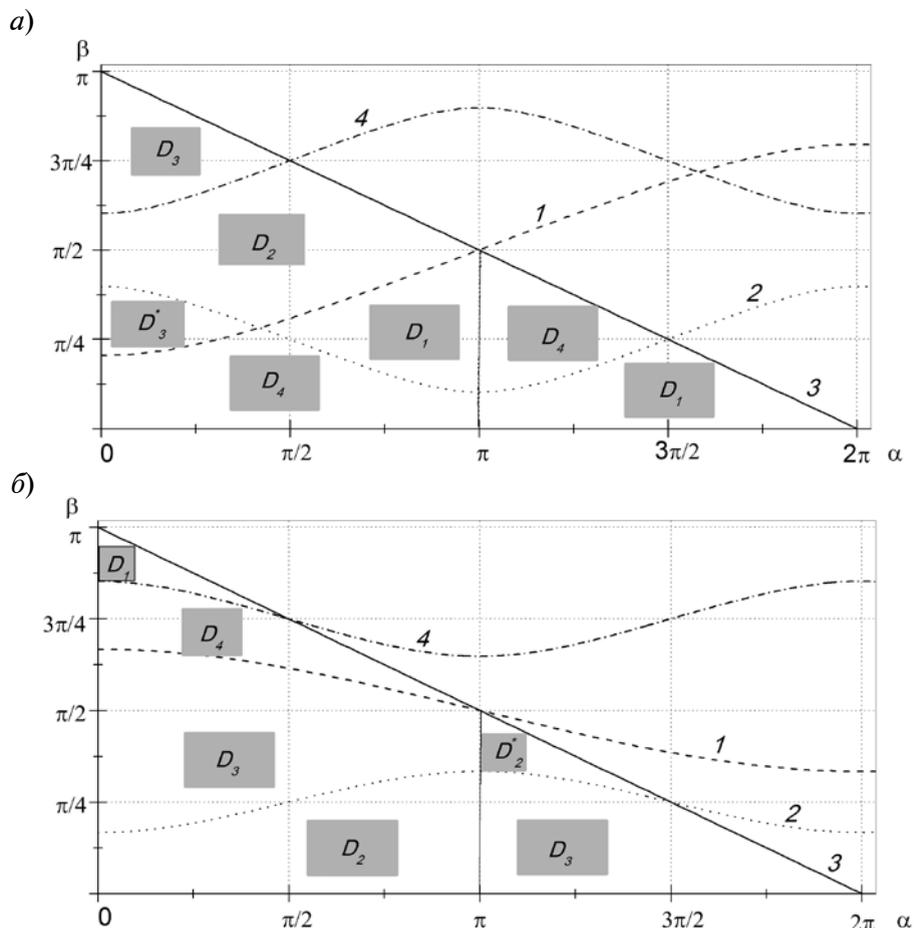


Рис. 2. Расположение областей D_k изменения углов α и β для жесткого (а) и мягкого (б) включений, когда $m > 0,5$ (а); $-1 < m < 0$ (б); представлены следующие функции $\beta(\alpha, m)$: $\arccos[m \cos(0,5\alpha)]$ (1); $0,5 \arccos(-m \cos \alpha)$ (2); $\pi - 0,5\alpha$ (3); $\pi - 0,5 \arccos(-m \cos \alpha)$ (4)

(15) делится на ряд областей D_j ($j = 1, 2, 3, 4$). На рис. 2 указаны области D_j для жесткого и мягкого включений, соответственно. В каждой такой области величины (12) и (13) имеют определенные знаки. Анализ показывает, что

- $\Delta(0,5) > 0$, а $\Delta(1,0) < 0$, если $(\alpha, \beta) \in D_1$;
- $\Delta(0,5) < 0$, и $\Delta(1,0) < 0$, если $(\alpha, \beta) \in D_2$;
- $\Delta(0,5) < 0$, а $\Delta(1,0) > 0$, если $(\alpha, \beta) \in D_3$;
- $\Delta(0,5) > 0$, а $\Delta(1,0) > 0$, если $(\alpha, \beta) \in D_4$.

Отсюда вытекает, что для значений угловых параметров в областях D_1 и D_2 характеристическое уравнение (10) в интервале (0, 1) имеет один корень, причем области D_1 отвечает корень $p_{1+} > 0,5$, а области D_2 – корень $p_{1+} < 0,5$. Если же точка $(\alpha, \beta) \in D_j$

($j = 3, 4$) то уравнение (10) будет иметь уже два корня в рассматриваемом интервале. При этом для углов, принадлежащих области D_3 , эти корни удовлетворяют неравенствам

$$0 < p_{1+} < 0,5 < p_{2+} < 1,0,$$

а для углов из области D_4 – неравенствам

$$0,5 < p_{1+} < p_{2+} < 1,0.$$

Следует заметить, что в случае жестких включений область D_3^* (см. рис. 2, а) существует только при $m > 0,5$. Для мягких включений области D_1 , D_4 и D_2^* (см. рис. 2, б) при $m \rightarrow -1$ вырождаются в отрезки прямых.

Зависимость первых корней уравнения (10) от жесткости включения приведена на рис. 3, а при фиксированном угле раствора клина α и варьировании угла подхода

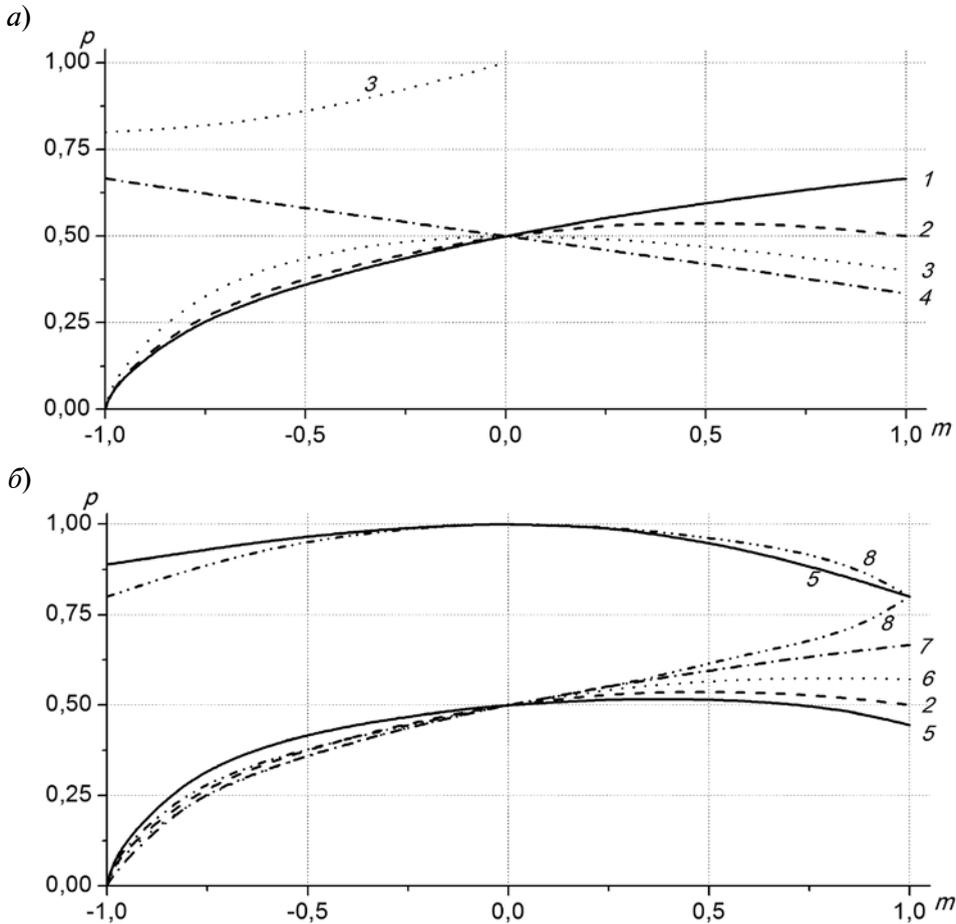


Рис. 3. Зависимости корней p уравнения (10) от параметра m при фиксированных значениях углов $\alpha = \pi/2$ (а) и $\beta = \pi/4$ (б); а – значения угла β : 0 (1), $\pi/4$ (2), $\pi/2$ (3), $3\pi/4$ (4); б – значения угла α : $\pi/4$ (5), $\pi/2$ (2), π (6) $3\pi/4$ (7); $5\pi/4$ (8)

трещины к включению β . Рис. 3, б иллюстрирует зависимость корней от параметра m при постоянном угле β и изменении угла раствора α .

В предельном случае абсолютно твердого включения ($m = 1$) характеристическое уравнение приобретает вид

$$\Delta(p, \alpha, \beta, 1) = 4 \sin p\alpha \cos[p(\pi + \beta - \alpha/2)] \times \cos[p(\pi - \beta - \alpha/2)] = 0.$$

Отсюда вытекает, что при $m = 1$ рассматриваемое уравнение в точках отрезка прямой $\beta = \alpha - \pi$ для углов раствора включения, удовлетворяющих неравенству $\pi < \alpha < 4\pi/3$, будет иметь двукратные корни. Такая ситуация показана на рис. 3, б для $\alpha = 5\pi/4$. При $m \rightarrow -1$ кратных нулей функция (9) не имеет.

Направление распространения трещины

В общем случае, когда уравнение (10) имеет два корня в интервале (0, 1), из формул (6) – (9) получаем асимптотику напряжений вблизи вершины трещины в виде

$$\tau_{\theta zk}(r, \theta) = \frac{2T_0 \lambda_k}{r_0} \left[H_k^{(1)}(\theta) \left(\frac{r}{r_0} \right)^{-1+p_1} + H_k^{(2)}(\theta) \left(\frac{r}{r_0} \right)^{-1+p_2} \right], \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} H_k^{(n)}(\theta) &= h_{k1}^{(n)}(\alpha, \beta, m) \cos p_n \theta + h_{k2}^{(n)}(\alpha, \beta, m) \sin p_n \theta; \\ h_{kj}^{(n)}(\alpha, \beta, m) &= (-1)^j \varphi_{kj}(p_n, \alpha, \beta, m) / \Delta'(p_n, \alpha, \beta, m) \\ &(k = 1, 2, 3; j, n = 1, 2). \end{aligned} \quad (18)$$

Штрих означает производную по переменной p .

Если же уравнение (10) имеет один корень в указанном интервале, то асимптотика при $r \rightarrow 0$ определяется только одним сингулярным слагаемым (первым членом в выражении (17)). Заметим, что показатели сингулярности напряжений $-1 + p_1$ и $-1 + p_2$ будут достаточно близки друг к другу (как это отмечалось ранее) только для очень жестких включений.

Согласно критерию, предложенному в работе [17], трещина продольного сдвига будет распространяться в направлении $\theta = \theta^*$, где напряжения $\tau_{\theta z}$ имеют максимальную величину. Тогда, предполагая, что вязкость разрушения межфазных границ превосходит вязкость разрушения материалов матрицы и включения, а асимптотика (17) имеет одночленный вид, из формул (18) находим значения углов θ_k^* в каждой упругой области:

$$\theta_k^* = -p_1^{-1} \arctg[\varphi_{k2}/\varphi_{k1}]. \quad (19)$$

В частности, для области включения имеем выражение

$$\theta_1^* = -p_1^{-1} \arctg \{ \{ m \sin[p_1(\pi - \alpha)] \sin 2p_1 \beta \} \times \{ \sin p_1 \pi - m \sin[p_1(\pi - \alpha)] \cos 2p_1 \beta \}^{-1} \}.$$

Отсюда видно, что $\theta_1^* = 0$ при $m = 0$ и $\beta = 0$, т. е. в однородном и симметричном случаях. Кроме того, если включение имеет вид полуплоскости ($\alpha = \pi$), то трещина также будет распространяться прямолинейно при любых значениях параметров β и m , что было отмечено в работе [7].

На лучах $\theta = \theta_k^*$ безразмерные касательные напряжения имеют вид

$$t_k(\theta_k^*) = \frac{\tau_{\theta zk}(r, \theta_k^*) r_0 \Delta'}{2T_0 (r/r_0)^{-1+p_1}} = \lambda_k \sqrt{\varphi_{k1}^2 + \varphi_{k2}^2}.$$

Если величина угла θ_k^* , вычисляемая по формуле (19), выходит за пределы области Ω_k , то максимальные напряжения в данной области имеют место на ее границе. Расположение наибольшего из трех максимумов безразмерных касательных напряжений определяет угол отклонения трещины от ее первоначального направления.

Зависимость угла отклонения трещины θ^* от угла подхода трещины к включению β для жесткого и мягкого включений при $\alpha = 2\pi/3$ показаны на рис. 4. Приведенные данные позволяют заключить, что в случае жесткого включения при небольших углах асимметрии разрушение будет происходить во включении. По мере увеличения угла β трещина отклоняется в сторону ближайшей к ней границе раздела фаз, а затем, начиная с некоторого значения этого угла, ее распространение происходит в области Ω_2

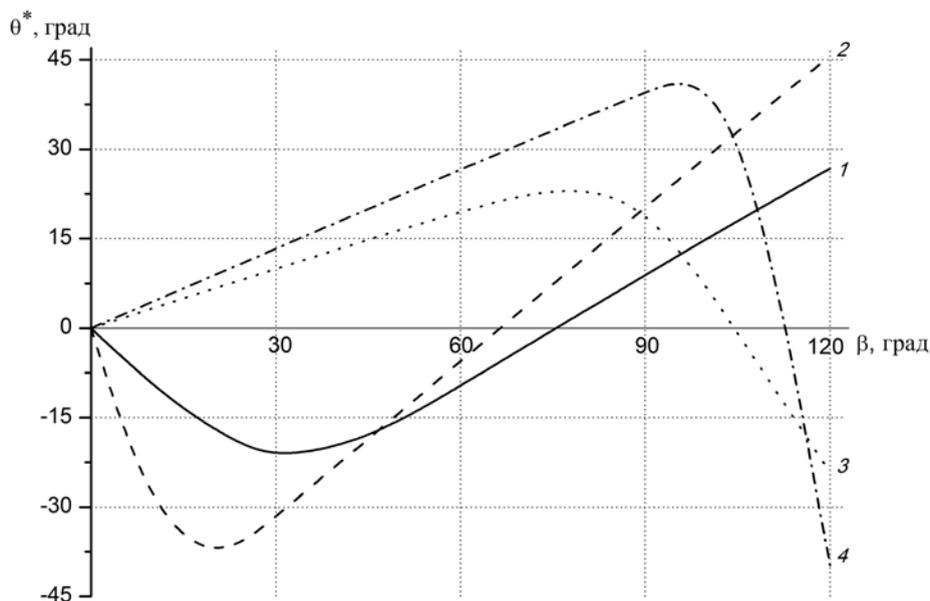


Рис. 4. Зависимости угла отклонения трещины θ^* от угла β при значении $\alpha = 2\pi/3$ для жестких (1, 2) и мягких (3, 4) включений; значения m : 0,5 (1), 0,8 (2), -0,5 (3), -0,8 (4)

матрицы. С возрастанием жесткости включения растрескивание матрицы начинается при меньших значениях углов β . Для $\beta > \alpha/2$ направление распространения трещины отклоняется от луча $\theta = 0$ в сторону включения.

Если $m < 0$, то трещина будет подрастать во включении вплоть до углов β , близких к $\pi - \alpha/2$. С увеличением параметра β угол отклонения трещины от ее первоначального направления возрастает почти линейно, а отклонение происходит в сторону оси симметрии включения.

Заключение

Таким образом, результаты данной работы показывают, что для двухфазного композита с границей раздела фаз, имеющей угловую точку, асимптотика напряжений в вершине трещины продольного сдвига может содержать, в отличие от случая гладкой границы, два сингулярных члена. В зависимости от параметров композиции дальнейшее распространение трещины может происходить как в материале включения, так и в материале матрицы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zak A.R., Williams M.L. Crack point singularities at a bimaterial interface // Trans. ASME. Ser. E. J. Appl. Mech. 1963. Vol. 30. No. 1, pp. 142-144.
2. Swenson D.O., Raw C.A. The stress distribution around a crack tip perpendicular to an interface between materials // Int. J. Fract. Mech. 1970. Vol. 6. No. 4, pp. 357-365.
3. Chang J., Xu J.Q. The singular stress field and stress intensity factors of a crack terminating at a bimaterial interface // Int. J. Mech. Sci. 2007. Vol. 49. No. 7, pp. 888-897.
4. Храпков А.А. Первая основная задача для кусочно-однородной плоскости с разрезом, перпендикулярным прямой раздела // ПММ. 1968. Т. 32. Вып. 4. С. 647 - 659.
5. Cook T.S., Erdogan F. Stresses in bonded materials with a crack perpendicular to the interface // Int. J. Eng. Sci. 1972. Vol. 10. No. 8, pp. 677-696.
6. Erdogan F., Cook T.S. Antiplane shear crack terminating at and going through a bimaterial interface // Int. J. Fracture. 1974. Vol. 10. No. 2, pp. 227-240.
7. Fenner D.N. Stress singularities in composite materials with an arbitrary oriented crack meeting interface // Int. J. Fracture. 1976. Vol. 12. No. 5, pp. 705-721.
8. Морозов Н.Ф. Математические вопросы теории трещин М.: Наука, 1984. 256 с.
9. Кулиев В.Д., Работнов Ю.Н., Черепанов Г.П. О торможении трещины на границе раздела различных упругих тел // Изв. АН СССР. МТТ. 1978. № 4. С. 120 - 128.

10. He M.Y., Hutchinson J.W. Crack deflection at an interface between dissimilar elastic materials // *Int. J. Solids Structures*. 1989. Vol. 25. No. 9, pp. 1053-1067.

11. Кулиев В.Д. Преломление трещины продольного сдвига // *ДАН СССР*. 1979. Т. 249. № 2. С. 315 – 318.

12. Choi S.R., Lee K.S., Earmme Y.Y. Analysis of kinked interfacial crack under out-of-plane shear // *Trans. ASME. Ser. E. J. Appl. Mech.* 1994. Vol. 61. No. 1, pp. 38-44.

13. Romeo A., Ballarini R. A cohesive zone model for cracks terminating at a biomaterial interface // *Int. J. Solids Structures*. 1997. Vol. 34. No. 11, pp. 1307-1326.

14. Schovanec L. A mode III crack problem in a bonded composite material // *Eng. Fract. Mech.* 1988. Vol. 31. No. 3, pp. 437-449.

15. Misuris G., Kuhn G. Comparative study of an interface crack for different wedge-interface models // *Archive Appl. Mech.* 2001. Vol. 71. No. 11, pp. 764-780.

16. Тихомиров В.В. Трещина продольного сдвига в трехкомпонентной среде // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2010. № 4 (109). С. 72 – 75.

17. Баренблатт Г.И., Черепанов Г.П. О хрупких трещинах продольного сдвига // *ПММ*. 1961. Т. 25. Вып 6. С. 1110 – 1119.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ТИХОМИРОВ Виктор Васильевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической механики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
victikh@mail.ru

Tikhomirov V.V. LONGITUDINAL SHEAR CRACK TERMINATING AT A WEDGE-SHAPED ELASTIC INCLUSION.

The interaction between a semi-infinite crack of mode III and a wedge-shaped elastic inclusion has been considered. The stress singularity at the crack tip was investigated. It was shown that the stress asymptotics was able, unlike the classical case, to have two singular terms at some parameter values for composite material. A crack deflection by the interface was analyzed.

LONGITUDINAL SHEAR CRACK, ELASTIC INCLUSION, STRESS SINGULARITY, CRACK DEFLECTION.

REFERENCES

1. Zak A.R., Williams M.L. Crack point singularities at a bimaterial interface. *Trans. ASME. Ser. E. J. Appl. Mech.* 1963, Vol. 30, No. 1, pp. 142-144.

2. Swenson D.O., Raw C.A. The stress distribution around a crack tip perpendicular to an interface between materials. *Int. J. Fract. Mech.* 1970, Vol. 6, No. 4, pp. 357-365.

3. Chang J., Xu J.Q. The singular stress field and stress intensity factors of a crack terminating at a bimaterial interface. *Int. J. Mech. Sci.*, 2007, Vol. 49, No. 7, pp. 888-897.

4. Khrapkov A.A. Pervaya osnovnaya zadacha dlya kusochno-odnorodnoy ploskosti s razrezom, perpendikulyarnym pryamoy razdela. *PMM*, 1968, Vol. 32, Iss. 4, pp. 647-659. (rus)

5. Cook T.S., Erdogan F. Stresses in bonded materials with a crack perpendicular to the interface. *Int. J. Eng. Sci.*, 1972, Vol. 10, No. 8, pp. 677-696.

6. Erdogan F., Cook T.S. Antiplane shear crack terminating at and going through a bimaterial interface. *Int. J. Fracture*, 1974, Vol. 10, No. 2, pp. 227-240.

7. Fenner D.N. Stress singularities in composite materials with an arbitrary oriented crack meeting interface. *Int. J. Fracture*, 1976, Vol. 12. No. 5, pp. 705-721.

8. Morozov N.F. *Matematicheskie voprosy teorii treshchin*. Moscow, Nauka, 1984, 256 p. (rus)

9. Kuliev V.D., Rabotnov Yu.N., Cherepanov G.P. O tormozhenii treshchiny na granitse razdela razlichnykh uprugikh tel. *Izv. AN SSSR MTT*, 1978, No. 4, pp. 120-128. (rus)

10. He M.Y., Hutchinson J.W. Crack deflection at an interface between dissimilar elastic materials. *Int. J. Solids Structures*, 1989, Vol. 25. No. 9, pp. 1053-1067.

11. Kuliev V.D. Prelomlenie treshchiny prodol'nogo sdviga. *DAN SSSR*, 1979, Vol. 249, No. 2, pp. 315-318. (rus)

12. Choi S.R., Lee K.S., Earmme Y.Y. Analysis of kinked interfacial crack under out-of-plane shear. *Trans. ASME. Ser. E. J. Appl. Mech.*, 1994, Vol. 61, No. 1, pp. 38-44.

13. Romeo A., Ballarini R. A cohesive zone model for cracks terminating at a biomaterial



interface. *Int. J. Solids Structures*, 1997, Vol. 34. No. 11, pp. 1307-1326.

14. **Schovanec L.** A mode III crack problem in a bonded composite material. *Eng. Fract. Mech.*, 1988, Vol. 31, No. 3, pp. 437-449.

15. **Misuris G., Kuhn G.** Comparative study of an interface crack for different wedge-interface models. *Archive Appl. Mech.*, 2001, Vol. 71, No. 11,

pp. 764-780.

16. **Tikhomirov V.V.** Treshchina prodol'nogo sdviga v trekhkomponentnoy srede. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2010, No. 4(109), pp. 72-75. (rus)

17. **Barenblatt G.I., Cherepanov G.P.** O khrupkikh treshchinakh prodol'nogo sdviga. *PMM*, 1961, Vol. 25, Iss. 6, pp. 1110-1119. (rus)

THE AUTHOR

TIKHOMIROV Victor V.

St. Petersburg State Polytechnical University

29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

victikh@mail.ru

УДК 524.354.4

А.И. Цыган, Д.А. Шалыбков, Д.П. Барсуков, О.А. Гогличидзе

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

АНАЛИЗ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ВРАЩЕНИЯ ПОЛЯРНЫХ ШАПОК НЕЙТРОННЫХ ЗВЕЗД ДЛЯ СЛУЧАЯ АНИЗОТРОПНОЙ ПРОВОДИМОСТИ ВЕЩЕСТВА ШАПОК

В статье рассматривается дифференциальное вращение жидких полярных шапок, вызванное магнитосферными токами, замыкающимися под поверхностью нейтронной звезды. При этом учтена анизотропия проводимости и вязкости вещества полярной шапки, связанная с сильным магнитным полем. Показано, что скорость этого вращения очень мала и почти весь электрический ток замыкается глубже — в твердой коре.

РАДИОПУЛЬСАР, НЕЙТРОННАЯ ЗВЕЗДА, МАГНИТНАЯ ГИДРОДИНАМИКА, ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ ВРАЩЕНИЕ, АНИЗОТРОПНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ.

Введение

Согласно современным представлениям, токовый механизм — это одна из основных причин торможения радиопульсаров (см., например, работы [1–5]). Рассматривается, как правило, область открытых силовых линий [6] (пульсарная трубка), по которой протекает электрический ток \mathbf{j} [5]. Для того чтобы нейтронная звезда не заряжалась по границе открытых и замкнутых силовых линий, в противоположном направлении течет возвратный ток [2, 7, 8]. В результате суммарный ток по пульсарной трубке оказывается равным нулю [5, 9]. Возвратный ток (весь или частично) может течь и внутри пульсарной трубки — вдоль силовых линий магнитного поля, на которых расположены внешние зазоры [9]. Эти токи замыкаются под поверхностью нейтронной звезды; при этом направление части электрического тока оказывается перпендикулярным вектору индукции магнитного поля \mathbf{B} , что приводит к появлению силы Лоренца $(1/c) [\mathbf{j} \times \mathbf{B}]$, действующей на вещество нейтронной звезды и тормозящей ее вращение [2]. При поверхностной температуре $T_{surf} > 10^5$ К поверхностные

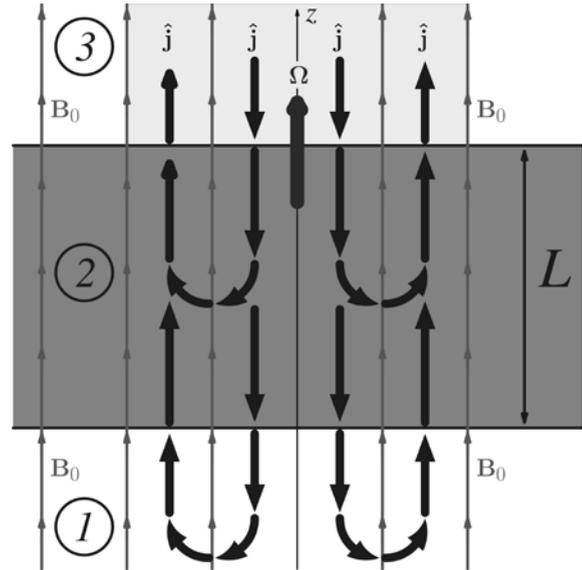


Рис. 1. Схема к постановке задачи: на поверхности твердой коры (1) $z = -L$ нейтронной звезды лежит слой жидкости (2) толщиной L (область выделена серым тоном), а над ним расположена область магнитосферы (3) ($z > 0$). Тонкие стрелки — силовые линии магнитного поля с индукцией \mathbf{B}_0 ; жирные черные стрелки — электрические токи \mathbf{j} , поступающие из магнитосферы и протекающие в нейтронной звезде; Ω — вектор угловой скорости вращения твердой коры вокруг оси z (направлена против силы тяжести)

слои нейтронной звезды представляют собой океан глубиной L , равной примерно 10 – 100 м, ниже которого расположена твердая кора [10]. Электрический ток может замыкаться как в глубине твердой коры, так и в океане (рис. 1). При этом сила Лоренца, приложенная к жидкости, приводит к появлению дифференциального вращения.

В данной статье мы будем рассматривать только случай нерелятивистского стационарного осесимметричного течения несжимаемой жидкости, пренебрегая всеми эффектами общей теории относительности, а также поправками порядка $1/c^2$ [2, 11]. При этом мы будем учитывать анизотропию проводимости и вязкости вещества жидкого слоя полярных шапок, связанную с магнитным полем.

Уравнения магнитной гидродинамики несжимаемой жидкости

Рассмотрим тонкий слой жидкости, лежащий на поверхности нейтронной звезды. Толщину слоя L будем считать малой по сравнению с радиусом нейтронной звезды $R_{ns} \approx 10^6$ см, т. е. $L \ll R_{ns}$ [10]. Пренебрегая в связи с этим кривизной поверхности нейтронной звезды, будем считать слой жидкости плоским и бесконечным. Введем цилиндрическую систему координат (r, ϕ, z) с осью, направленной вверх (против силы тяжести). Жидкий слой занимает область $-L < z < 0$; при $z < -L$ расположена твердая кора, которая вращается твердотельно, с угловой скоростью $\Omega = \Omega e_z$, а при $z > 0$ располагается пульсарная магнитосфера, заполненная крайне разреженной плазмой. Со стороны магнитосферы по магнитным силовым линиям пульсарной трубки подводится электрический ток \mathbf{j} , который может замыкаться как в области жидкого слоя, так и в области твердой коры (см. рис. 1). Наличие этого тока приводит к возникновению в слое дифференциального вращения жидкости. Будем считать жидкость в слое вязкой и хорошо проводящей. И чтобы найти течение жидкости, воспользуемся уравнениями магнитной гидродинамики несжимаемой жидкости [12]:

$$\partial \mathbf{B} / \partial t = -c \text{rot} \mathbf{E}; \quad (1)$$

$$\text{div} \mathbf{B} = 0; \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \rho (\partial \mathbf{v} / \partial t + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}) = \\ = -\nabla P + \frac{1}{4\pi} [\text{rot} \mathbf{B} \times \mathbf{B}] + \mathbf{F}_{vis} + \rho \mathbf{g}; \end{aligned} \quad (3)$$

$$\text{div} \mathbf{v} = 0; \quad \rho = \text{const}, \quad (4)$$

где \mathbf{E} – вектор напряженности электрического поля; \mathbf{B} – вектор индукции магнитного поля; \mathbf{v} – скорость течения жидкости; ρ , P – плотность и давление жидкости; $F_{vis}^\alpha = \sigma_{vis}^{\alpha\beta}$ ($\sigma_{vis}^{\alpha\beta}$ – тензор вязких напряжений); \mathbf{g} – ускорение свободного падения ($\mathbf{g} = g e_z$, $g < 0$).

В силу тонкости слоя будем считать, что $g \approx \text{const}$. В данной работе рассматриваются только установившиеся течения, поэтому ограничимся нахождением только стационарных решений, когда все величины не зависят от времени t . Кроме того, чтобы упростить задачу, ограничимся соосным случаем и будем рассматривать только осесимметричные течения, когда все величины не зависят от азимутального угла ϕ . Чтобы исключить из уравнения (1) электрическое поле \mathbf{E} , воспользуемся законом Ома, который запишем в следующем виде [13 – 15]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] = \\ = R_\perp [\mathbf{e}_B \times [\mathbf{j} \times \mathbf{e}_B]] + R_\parallel \mathbf{e}_B (\mathbf{e}_B \cdot \mathbf{j}) - R_H [\mathbf{e}_B \times \mathbf{j}], \end{aligned} \quad (5)$$

где $\mathbf{e}_B = \mathbf{B} / B$; $(R_\perp, R_\parallel, R_H)$ – компоненты тензора сопротивления [13].

Согласно работе [13], при $B_0 \approx 10^{12}$ Гс для вещества на поверхности нейтронной звезды можно грубо оценить отношение сопротивлений как

$$\chi_H = \frac{R_H}{R_\perp} \sim \frac{1}{\omega_B \tau_{scat}} \sim 10^{-2} \ll 1;$$

$$\chi_\parallel = \frac{R_\parallel}{R_\perp} \sim \frac{1}{\omega_B^2 \tau_{scat}^2} \sim 10^{-4} \ll \chi_H,$$

где ω_B – циклотронная частота ионов, τ_{scat} – характерное время столкновений.

Тогда уравнение (1) примет вид

$$\begin{aligned} \text{rot}[\mathbf{v} \times \mathbf{B}] = \frac{c^2}{4\pi} \text{rot}(R_\perp [\mathbf{e}_B \times [\text{rot} \mathbf{B} \times \mathbf{e}_B]] + \\ + R_\parallel \mathbf{e}_B (\mathbf{e}_B \cdot \text{rot} \mathbf{B}) - R_H [\mathbf{e}_B \times \text{rot} \mathbf{B}]), \end{aligned} \quad (6)$$

где было учтено, что

$$\operatorname{rot}\mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}. \quad (7)$$

Рассмотрим сначала невозмущенное течение, когда к слою не подводится никакого электрического тока. Будем считать, что в этом случае жидкость вращается твердо-тельно, с той же угловой скоростью Ω , что и кора, и запишем течение в виде

$$\mathbf{v} = \Omega r \mathbf{e}_\phi; \quad \mathbf{B}_0 = B_0 \mathbf{e}_z, \quad (8)$$

где $\Omega = \text{const}$, $\mathbf{B}_0 = \text{const}$;

$$\mathbf{j} = 0; \quad \sigma_{vis}^{\alpha\beta} = 0; \quad (9)$$

$$P = P_0(r, z) = \rho(-gz + \Omega^2 z^2 / 2). \quad (10)$$

Пусть теперь к слою подводится электрический ток $\hat{\mathbf{j}} = \hat{j}_z(r) \mathbf{e}_z$.

Создаваемое этим током течение будем искать в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \Omega r \mathbf{e}_\phi + \delta \mathbf{u}; \\ \mathbf{B} &= B_0 \mathbf{e}_z + \delta \mathbf{B}; \end{aligned} \quad (11)$$

$$P = P_0(r, z) + \delta P.$$

Величину тока \mathbf{j} будем считать малой и в дальнейшем будем учитывать только поправки, линейные по величинам $\delta \mathbf{u}$, $\delta \mathbf{B}$ и δP . Рассмотрим величину \mathbf{F}_{vis} . Согласно равенствам (9)), тензор натяжений $\sigma_{vis}^{\alpha\beta}$ является величиной 1-го порядка малости. Поэтому при его вычислении можно положить $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_z$. Будем считать, что тензор вязких натяжений $\sigma_{vis}^{\alpha\beta}$ задается выражением (4.41) из работы [15] (см. также [16]). Тогда с учетом (4) тензор $\sigma_{vis}^{\alpha\beta}$ принимает вид [15, 16]:

$$\begin{aligned} \sigma_{vis}^{rr} / \rho &= -\frac{v_0 - \zeta_1}{2} W_{zz} + \\ &+ \frac{v_1}{2} (W_{rr} - W_{\phi\phi}) + v_3 W_{r\phi}; \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{vis}^{\phi\phi} / \rho &= -\frac{v_0 - \zeta_1}{2} W_{zz} - \\ &- \frac{v_1}{2} (W_{rr} - W_{\phi\phi}) - v_3 W_{r\phi}; \end{aligned} \quad (13)$$

$$\sigma_{vis}^{r\phi} / \rho = v_1 W_{r\phi} - \frac{v_3}{2} (W_{rr} - W_{\phi\phi}) + v_3 W_{r\phi}; \quad (14)$$

$$\sigma_{vis}^{zz} / \rho = \left(v_0 + \frac{\zeta_1}{2} \right) W_{zz}; \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{vis}^{rz} / \rho &= v_2 W_{rz} + v_4 W_{\phi z}; \\ \sigma_{vis}^{\phi z} / \rho &= v_2 W_{\phi z} - v_4 W_{rz}, \end{aligned} \quad (15)$$

где v_A — коэффициенты кинематической сдвиговой вязкости ($A = 1-4$); ζ_1 — коэффициент второй кинематической объемной вязкости (коэффициент первой объемной вязкости не вошел в эти формулы ввиду условия (4)); $W_{\alpha\beta}$ — тензор «деформаций», который с учетом уравнения (4) и азимутальной симметрии течения принимает следующий вид:

$$W_{rr} = 2 \frac{\partial \delta u_r}{\partial r}; \quad W_{r\phi} = \frac{\partial \delta u_\phi}{\partial r} - \frac{\delta u_\phi}{r}; \quad (16)$$

$$W_{\phi\phi} = \frac{2}{r} \delta u_r;$$

$$W_{rz} = \frac{\partial \delta u_r}{\partial z} + \frac{\partial \delta u_z}{\partial r}; \quad W_{\phi z} = \frac{\partial \delta u_\phi}{\partial z}; \quad (17)$$

$$W_{zz} = 2 \frac{\partial \delta u_z}{\partial z}.$$

Будем для простоты предполагать, что в рассматриваемом приближении коэффициенты сдвиговой вязкости v_A ($A = 1-4$), а также коэффициент второй объемной вязкости ζ_1 можно считать постоянными, т. е. не зависящими от координат. При этом, согласно работе [15], при $B_0 \approx 10^{12}$ Гс отношения вязкостей $\xi_A = v_A / v_0$ ($A = 1-4$) могут быть оценены как

$$\xi_1 \sim \frac{1}{\omega_B^2 \tau_{scat}} \sim 10^{-4}; \quad \xi_2 \sim \frac{1}{\omega_B \tau_{scat}} \sim 10^{-2};$$

$$\xi_2 \approx 4\xi_1; \quad \xi_4 \approx 2\xi_3.$$

Заметим также, что согласно равенствам (9), величина \mathbf{j} тоже является величиной 1-го порядка малости и, соответственно, в правой части уравнений (5) и (6) можно положить $\mathbf{e}_B = \mathbf{e}_z$, $\operatorname{rot}\mathbf{B} = \operatorname{rot}(\delta \mathbf{B})$, а коэффициенты R_\perp , R_\parallel , R_H вычислять в нулевом приближении. Для того чтобы упростить задачу, предположим, что в нулевом приближении величины R_\perp , R_\parallel , R_H не зависят от координат.

Запишем все уравнения в безразмерном виде. Пусть l — характерный пространственный масштаб. Удобно в качестве l взять величину, сравнимую с размером полярной шапки R_{pc} ; и стоит отметить, что в этом

случае можно ожидать, что $L \approx (10^{-2} - 10)l$. Далее вместо r, z, L будем использовать безразмерные величины, сохранив для них те же самые обозначения, т. е.

$$r \rightarrow lr, \quad z \rightarrow lz, \quad L \rightarrow lL. \quad (18)$$

Положим

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{u} &= \frac{\eta_{\perp}}{l} \mathbf{u}, \quad \delta \mathbf{B} = B_0 \mathbf{b}, \\ \delta P &= \frac{\rho v_0 \eta_{\perp}}{l^2} p, \quad \mathbf{j} = \frac{c}{4\pi} \frac{B_0}{l} \mathbf{J} \end{aligned} \quad (19)$$

и введем обозначения

$$\eta_{\perp} = \frac{c^2}{4\pi} R_{\perp}; \quad \text{Re} = \frac{\Omega l^2}{v_0}; \quad \text{Ha} = \sqrt{\frac{B_0^2}{4\pi\rho} \cdot \frac{l^2}{v_0 \eta_{\perp}}},$$

где η_{\perp} — перпендикулярная компонента тензора магнитной диффузии, Re — число Рейнольдса, Ha — число Гартмана.

Для радиопулсара со значениями $B_0 = 10^{12}$ Гс, $P = 1$ с, полагая $\rho \sim 10^4$ г/см³ [10], $v_0 \sim 10^{-2}$ см²/с [17], $\sigma_{\parallel} \sim 10^{18}$ ед. СГС [18], а также $\chi_{\parallel} \sim 10^{-4}$, мы можем грубо оценить значения чисел Рейнольдса и Гартмана как $\text{Re} \approx 10^{11}$ и $\text{Ha} \sim 10^{12}$.

С учетом всего вышеизложенного уравнения (6), (2) — (4) могут быть записаны как

$$-\frac{\partial u_r}{\partial z} = \frac{\partial^2 b_r}{\partial z^2} + L(b_r) + \chi_H \frac{\partial^2 b_{\phi}}{\partial z^2}; \quad (20)$$

$$-\frac{\partial u_{\phi}}{\partial z} = \frac{\partial^2 b_{\phi}}{\partial z^2} - \chi_H \left(\frac{\partial^2 b_r}{\partial z^2} + L(b_r) \right) + \chi_{\parallel} L(b_{\phi}); \quad (21)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\partial u_z}{\partial z} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial b_z}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 b_z}{\partial z^2} - \\ &- \chi_H \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial b_{\phi}}{\partial z} \right); \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} -2\text{Re} u_{\phi} &= -\frac{\partial p_1}{\partial r} + \text{Ha}^2 \left(\frac{\partial b_r}{\partial z} - \frac{\partial b_z}{\partial r} \right) + \\ &+ (1 + \xi_1) L(u_r) + \xi_2 \left(\frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} - L(u_r) \right) + \\ &+ \xi_3 L(u_{\phi}) + \xi_4 \frac{\partial^2 u_{\phi}}{\partial z^2}; \end{aligned} \quad (23)$$

$$2\text{Re} u_r = \text{Ha}^2 \frac{\partial b_{\phi}}{\partial z} + \xi_1 L(u_{\phi}) + \xi_2 \frac{\partial^2 u_{\phi}}{\partial z^2} - \quad (24)$$

$$-\xi_3 L(u_r) - \xi_4 \left(\frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} - L(u_r) \right); \quad (24)$$

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\partial p_1}{\partial z} + 2 \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} - \xi_2 \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} - L(u_z) \right) + \\ &+ \xi_4 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_{\phi}}{\partial z} \right); \end{aligned} \quad (25)$$

$$0 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) + \frac{\partial u_z}{\partial z}; \quad (26)$$

$$0 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r b_r) + \frac{\partial b_z}{\partial z}, \quad (27)$$

где были введены обозначения

$$p_1 = \left(p - \frac{\zeta_1}{v_0} \frac{\partial u_z}{\partial z} \right); \quad L(f) = \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{f}{r^2}.$$

При написании уравнения (22) было учтено условие несжимаемости жидкости (26). Согласно равенству (27), можно положить

$$b_r = -\frac{\partial a_{\phi}}{\partial z}, \quad b_z = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r a_{\phi}), \quad (28)$$

и соответственно уравнения (20) и (22) могут быть записаны в виде

$$\frac{\partial^2 a_{\phi}}{\partial z^2} + L(a_{\phi}) = u_r + \chi_H \frac{\partial b_{\phi}}{\partial z}. \quad (29)$$

Подставляя полученное выражение в уравнение (21), получаем равенство

$$(1 + \chi_H^2) \frac{\partial^2 b_{\phi}}{\partial z^2} + \chi_{\parallel} L(b_{\phi}) = -\frac{\partial}{\partial z} (u_{\phi} + \chi_H u_r). \quad (30)$$

Учтем, что в рассматриваемом случае $E_{\phi} = 0$ и поэтому ϕ -ю компоненту уравнения (5) в линейном приближении можно записать в виде

$$\frac{\partial b_r}{\partial z} - \frac{\partial b_z}{\partial r} = -\left(\chi_H \frac{\partial b_{\phi}}{\partial z} + u_r \right). \quad (31)$$

Подставим это выражение в равенство (23) и, соответственно, получим:

$$\begin{aligned} -2\text{Re} u_{\phi} &= -\frac{\partial p_1}{\partial r} + \text{Ha}^2 \left(\chi_H \frac{\partial b_{\phi}}{\partial z} + u_r \right) + \\ &+ (1 + \xi_1) L(u_r) + \xi_2 \left(\frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} - L(u_r) \right) + \\ &+ \xi_3 L(u_{\phi}) + \xi_4 \frac{\partial^2 u_{\phi}}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (32)$$

Отметим также, что в рассматриваемом приближении компоненты электрического поля выражаются как

$$\frac{cE_r}{B_0} = -\Omega l r \left(1 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r a_\phi) \right) - \frac{\eta_\perp}{l} (u_\phi + \chi_H u_r) - \frac{\eta_\perp}{l} (1 + \chi_H^2) \frac{\partial b_\phi}{\partial z}; \quad (33)$$

$$\frac{cE_z}{B_0} = -\Omega l r \frac{\partial a_\phi}{\partial z} + \frac{\eta_\perp}{l} \chi_{||} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r b_\phi); \quad (34)$$

$$E_\phi = 0, \quad (35)$$

а компоненты электрического тока \mathbf{J} можно записать в виде

$$J_r = -\frac{\partial b_\phi}{\partial z}; \quad J_z = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r b_\phi); \quad (36)$$

$$J_\phi = -\left(\frac{\partial^2 a_\phi}{\partial z^2} + L(a_\phi) \right).$$

Будем считать, что величины \mathbf{u} , \mathbf{b}_ϕ , \mathbf{a}_ϕ , p_1 убывают с ростом r достаточно быстро для того, чтобы к ним можно было применять разложение в интеграл Ганкеля [19]. Тогда величины u_r , u_ϕ , b_ϕ , a_ϕ представим в виде

$$f(r, z) = \int_0^{+\infty} k \tilde{f}(k, z) J_1(kr) dk; \quad (37)$$

$$\tilde{f}(k, z) = \int_0^{+\infty} r f(r, z) J_1(kr) dk,$$

и их образы будем обозначать знаком верхней тильды: соответственно \tilde{u}_r , \tilde{u}_ϕ , \tilde{b}_ϕ , \tilde{a}_ϕ .

Величины u_z и p_1 запишем в виде

$$f(r, z) = \int_0^{+\infty} k \tilde{f}(k, z) J_0(kr) dk; \quad (38)$$

$$\tilde{f}(k, z) = \int_0^{+\infty} r f(r, z) J_0(kr) dk,$$

а их образы будем обозначать соответственно как \tilde{u}_z и \tilde{p}_1 .

Подставляя данные разложения в уравнения (24) – (26), (29), (30) и (32), видим, что в полученных уравнениях переменные разделяются и их можно записать в виде

$$-2\text{Re } \tilde{u}_\phi = k \tilde{p}_1 - \text{Ha}^2 \left(\tilde{u}_r + \chi_H \frac{\partial \tilde{b}_\phi}{\partial z} \right) - (1 + \xi_1) k^2 \tilde{u}_r + \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}_r}{\partial z^2} + k^2 \tilde{u}_r \right) -$$

$$-\xi_3 k^2 \tilde{u}_\phi + \xi_4 \frac{\partial^2 \tilde{u}_\phi}{\partial z^2}; \quad (39)$$

$$2\text{Re } \tilde{u}_r = \text{Ha}^2 \frac{\partial \tilde{b}_\phi}{\partial z} - \xi_1 k^2 \tilde{u}_\phi + \xi_2 \frac{\partial^2 \tilde{u}_\phi}{\partial z^2} + \xi_3 k^2 \tilde{u}_r - \xi_4 \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}_r}{\partial z^2} + k^2 \tilde{u}_r \right); \quad (40)$$

$$\frac{\partial \tilde{p}_1}{\partial z} = 2 \frac{\partial^2 \tilde{u}_z}{\partial z^2} - \xi_2 \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}_z}{\partial z^2} + k^2 \tilde{u}_z \right) + \xi_4 k \frac{\partial \tilde{u}_\phi}{\partial z}; \quad (41)$$

$$k \tilde{u}_r + \frac{\partial \tilde{u}_z}{\partial z} = 0; \quad (42)$$

$$(1 + \chi_H^2) \frac{\partial^2 \tilde{b}_\phi}{\partial z^2} - \chi_{||} k^2 \tilde{b}_\phi = -\frac{\partial}{\partial z} (\tilde{u}_\phi + \chi_H \tilde{u}_r); \quad (43)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{a}_\phi}{\partial z^2} - k^2 \tilde{a}_\phi = \tilde{u}_r + \chi_H \frac{\partial \tilde{b}_\phi}{\partial z}. \quad (44)$$

Граничные условия

Рассмотрим сначала область $z < -L$ и граничные условия при $z = -L$. Обозначим все величины, относящиеся к области $z < -L$, знаком $\bar{}$. Согласно условиям задачи, данная область заполнена твердым телом, вращающимся с угловой скоростью $\Omega = \Omega e_z$, и соответственно $\delta \mathbf{u} = 0$ при $z < -L$. Требуя, чтобы при $z = -L$ скорость $\delta \mathbf{u}$ была непрерывна, получаем:

$$\tilde{u}_r|_{z=-L} = 0, \quad \tilde{u}_\phi|_{z=-L} = 0, \quad \tilde{u}_z|_{z=-L} = 0. \quad (45)$$

Предположим теперь, что при $z < -L$ выполняется закон Ома (5) с коэффициентами сопротивления \bar{R}_\perp , \bar{R}_\parallel , \bar{R}_H . Введем обозначения

$$\bar{\eta}_\perp = (c^2 / (4\pi)) \bar{R}_\perp, \quad \bar{\chi}_\parallel = \bar{R}_\parallel / \bar{R}_\perp, \quad \bar{\chi}_H = \bar{R}_H / \bar{R}_\perp.$$

В дальнейшем для простоты будем считать, что $\bar{\eta}_\perp$, $\bar{\chi}_\parallel$, $\bar{\chi}_H$ не зависят от координат. Тогда для нахождения магнитного поля в области $z < -L$ можно использовать уравнения (43) и (44), которые в рассматриваемом случае принимают вид

$$(1 + \bar{\chi}_H^2) \frac{\partial^2 \tilde{b}_\phi}{\partial z^2} - \bar{\chi}_\parallel k^2 \tilde{b}_\phi = 0; \quad (46)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{a}_\phi}{\partial z^2} - k^2 \tilde{a}_\phi = \bar{\chi}_H \frac{\partial \tilde{b}_\phi}{\partial z}.$$

Их решение можно записать как

$$\tilde{b}_\phi(k, z) = \overline{B}_\phi^+(k) e^{\bar{\alpha}z} + \overline{B}_\phi^-(k) e^{-\bar{\alpha}z}; \quad (47)$$

$$\begin{aligned} \tilde{a}_\phi(k, z) = & \overline{A}_\phi^+(k) e^{kz} + \overline{A}_\phi^-(k) e^{-kz} + \\ & + \frac{\overline{\chi}_H \bar{\alpha}}{\bar{\alpha}^2 - k^2} (\overline{B}_\phi^+(k) e^{\bar{\alpha}z} - \overline{B}_\phi^-(k) e^{-\bar{\alpha}z}), \end{aligned} \quad (48)$$

где введено обозначение

$$\bar{\alpha} = k \sqrt{\overline{\chi}_\parallel} / (1 + \overline{\chi}_H^2).$$

Наложим условие $\tilde{b}_\phi \rightarrow 0$ и $\tilde{a}_\phi \rightarrow 0$ при $z \rightarrow 0$, тогда $\overline{B}_\phi^-(k) = 0$ и $\overline{A}_\phi^-(k) = 0$. Потребуем, чтобы при $z = -L$ были непрерывны величины \mathbf{B} и E_r (в силу (35) непрерывность $E_\phi = 0$ выполняется автоматически).

Принимая во внимание, что $\tilde{\mathbf{u}}|_{z=-L+0} = 0$ и учитывая соотношения (28) и (33), эти условия можно переписать в следующем виде:

$$\tilde{a}_\phi|_{z=-L+0} = \tilde{a}_\phi|_{z=-L-0}, \quad \left. \frac{\partial \tilde{a}_\phi}{\partial z} \right|_{z=-L+0} = \left. \frac{\partial \tilde{a}_\phi}{\partial z} \right|_{z=-L-0}; \quad (49)$$

$$\tilde{b}_\phi|_{z=-L+0} = \tilde{b}_\phi|_{z=-L-0}, \quad (50)$$

$$\eta_\perp (1 + \overline{\chi}_H^2) \left. \frac{\partial \tilde{b}_\phi}{\partial z} \right|_{z=-L+0} = \bar{\eta}_\perp (1 + \overline{\chi}_H^2) \left. \frac{\partial \tilde{b}_\phi}{\partial z} \right|_{z=-L-0}.$$

Подставляя сюда решение (47), (48), получаем равенства

$$\left(\frac{\partial \tilde{b}_\phi}{\partial z} - k \overline{D} \tilde{b}_\phi \right) \Big|_{z=-L+0} = 0; \quad (51)$$

$$\left(\frac{\partial \tilde{a}_\phi}{\partial z} - k \tilde{a}_\phi \right) \Big|_{z=-L+0} = \overline{Q}' \tilde{b}_\phi \Big|_{z=-L+0}, \quad (52)$$

где введены обозначения

$$\overline{D} = \frac{\bar{\eta}_\perp \sqrt{\overline{\chi}_\parallel (1 + \overline{\chi}_H^2)}}{\eta_\perp (1 + \overline{\chi}_H^2)}; \quad (53)$$

$$\overline{Q} = \frac{\overline{\chi}_H \sqrt{\overline{\chi}_\parallel}}{\sqrt{\overline{\chi}_\parallel} + \sqrt{1 + \overline{\chi}_H^2}}. \quad (54)$$

К приведенным здесь выражениям коэффициентов \overline{D} и \overline{Q} надо относиться осторожно. Дело в том, что при их выводе предполагалось, что на масштабах $\sim 1/\bar{\alpha}$ проводимость постоянна и можно не учитывать сферичности звезды. Однако масштаб $1/\bar{\alpha}$ вполне сравним с 10^2 радиу-

сов полярной шапки $1/k$, т. е. с радиусом нейтронной звезды R_{ns} [2]. Поэтому для реальных нейтронных звезд коэффициент \overline{D} должен весьма заметно отличаться от выражения (53). Важно отметить, что, скорее всего, он будет зависеть от k (переходя при $k \rightarrow +\infty$ в выражение (53)).

Чтобы проиллюстрировать данное утверждение, рассмотрим ситуацию, когда проводимость в области $-L - \Delta < z < -L$ постоянна и описывается с помощью закона Ома (5) с независимыми от координат коэффициентами \overline{R}_\perp , \overline{R}_\parallel , \overline{R}_H , а при $z < -L - \Delta$ проводимость тоже постоянна, но коэффициенты равны уже \overline{R}'_\perp , \overline{R}'_\parallel , \overline{R}'_H . Введем обозначения $\bar{\eta}_\perp = (c^2 / (4\pi)) \overline{R}'_\perp$, $\overline{\chi}'_\parallel = \overline{R}'_\parallel / \overline{R}'_\perp$, $\overline{\chi}'_H = \overline{R}'_H / \overline{R}'_\perp$ и будем считать, что $\tilde{b}_\phi \rightarrow 0$ и $\tilde{a}_\phi \rightarrow 0$ при $z \rightarrow -\infty$. Тогда

$$\overline{D} = \overline{D}'_\infty \frac{\bar{\alpha} \operatorname{sh}(\bar{\alpha} \Delta) + \overline{D}'_\infty k \operatorname{ch}(\bar{\alpha} \Delta)}{\bar{\alpha} \operatorname{ch}(\bar{\alpha} \Delta) + \overline{D}'_\infty k \operatorname{sh}(\bar{\alpha} \Delta)}; \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \overline{Q} = & \frac{\overline{\chi}_H \bar{\alpha}}{\bar{\alpha}^2 - k^2} \left(\bar{\alpha} - k \frac{\overline{D}}{\overline{D}'_\infty} \right) + \\ & + \frac{\bar{\alpha} e^{-k\Delta}}{\bar{\alpha} \operatorname{ch}(\bar{\alpha} \Delta) + \overline{D}'_\infty k \operatorname{sh}(\bar{\alpha} \Delta)} \times \\ & \times \left(\overline{Q}'_\infty - \overline{\chi}_H \frac{\bar{\alpha}^2 - \overline{D}'_\infty k^2}{\bar{\alpha}^2 - k^2} \right), \end{aligned} \quad (56)$$

где введены обозначения

$$\overline{D}'_\infty = \frac{\bar{\alpha} \bar{\eta}_\perp (1 + \overline{\chi}_H^2)}{k \eta_\perp (1 + \overline{\chi}_H^2)}, \quad \overline{D}'_\infty = \frac{\bar{\alpha}' \bar{\eta}'_\perp (1 + \overline{\chi}'_H^2)}{k \bar{\eta}'_\perp (1 + \overline{\chi}'_H^2)}; \quad (57)$$

$$\overline{Q}'_\infty = \frac{\overline{\chi}'_H \bar{\alpha}'}{\bar{\alpha}' + k}, \quad \bar{\alpha}' = k \sqrt{\frac{\overline{\chi}'_\parallel}{1 + \overline{\chi}'_H^2}}.$$

Отсюда сразу видно, что в общем случае коэффициенты \overline{D} и \overline{Q} зависят от k . При этом легко заметить, что величины \overline{D}'_∞ и \overline{D}'_∞ совпадают с выражением (53) для проводимостей \overline{R}_A и \overline{R}'_A соответственно; аналогично \overline{Q}'_∞ совпадает с выражением (54) для проводимости \overline{R}'_A . В случае если $k \sim 1$ и $\bar{\alpha} \Delta \ll 1$, получаем $\overline{D} \approx \overline{D}'_\infty$. Поэтому при рассмотрении плавной части решения разумно положить \overline{D} равным \overline{D}'_∞ . Напротив, при рассмотрении резко меняющихся профилей тока \tilde{J}_z основной вклад в максимальное значение скорости u_ϕ дают области $k \gg 1$. При этом вполне допустима

ситуация, когда $\bar{\alpha}\Delta \gg 1$ и $\bar{D} \approx \bar{D}_\infty$. Поэтому при нахождении максимальных значений скорости u_ϕ разумно использовать выражение (53). Однако следует иметь в виду, что в обоих случаях $\bar{D} \lesssim 10^{-2} \ll 1$.

Рассмотрим теперь область $z > 0$ и граничные условия при $z = 0$. Обозначим все величины, относящиеся к области $z > 0$, знаком $\hat{}$. Будем считать, что эта область заполнена веществом с очень низкой проводимостью поперек магнитного поля и с очень высокой проводимостью вдоль него [2]. В связи с этим будем считать, что

$$\hat{R}_\perp \rightarrow +\infty \text{ и } \hat{R}_\parallel \rightarrow 0 \quad (58)$$

(а также $\hat{\chi}_H \rightarrow 0$).

Тогда из уравнения (5) получаем $\hat{\mathbf{J}} = \hat{J}_\phi \mathbf{e}_\phi$, и соответственно в линейном приближении уравнение (7) можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial \hat{b}_\phi}{\partial z} = 0, \quad \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \hat{b}_\phi) = \hat{J}_z, \quad \frac{\partial^2 \hat{a}_\phi}{\partial z^2} + L(\hat{a}_\phi) = 0. \quad (59)$$

Из первого равенства (59) следует, что в области $z > 0$ величина \hat{b}_ϕ зависит только от r . Второе равенство связывает данную величину с плотностью электрического тока $\hat{J}_z = \text{const}(z)$. Третье равенство дает формулу

$$\hat{a}_\phi(k, z) = \hat{A}_\phi^+(k) \exp(kz) + \hat{A}_\phi^-(k) \exp(-kz).$$

Если потребовать, чтобы $\hat{a}_\phi \rightarrow 0$ при $z \rightarrow +\infty$, то получим, что $\hat{A}_\phi^+(k) = 0$ и, соответственно,

$$\frac{\partial \hat{a}_\phi}{\partial z} + k \hat{a}_\phi = 0.$$

Если поставить условие непрерывности магнитной индукции \mathbf{B} при $z = 0$, то с учетом вышеизложенного граничные условия при $z = 0$ можно переписать в виде

$$\left(\frac{\partial \hat{a}_\phi}{\partial z} + k \hat{a}_\phi \right) \Big|_{z=0-0} = 0; \quad (60)$$

$$\hat{b}_\phi(k) \Big|_{z=0-0} = \tilde{b}_\phi(k), \quad (61)$$

где функция $\hat{b}_\phi(r)$ считается заданной и ее образ обозначен как $\tilde{b}_\phi(k)$.

Касаясь условия непрерывности компонент E_r и E_ϕ , следует отметить, что в силу равенства (35) непрерывность E_ϕ вы-

полняется автоматически. Условие же непрерывности компоненты E_r совместно с уравнением (33) фактически служат для определения скорости \hat{u}_ϕ .

Будем считать, что среда, заполняющая область $z > 0$, очень разрежена, т. е. $\hat{\rho} \rightarrow 0$. В связи с этим потребуем, чтобы поток вещества внутрь области $z > 0$ отсутствовал:

$$\hat{u}_z \Big|_{z=0-0} = 0. \quad (62)$$

Налагаем также условия непрерывности потоков r - и ϕ -компонент импульса на границе $z = 0$. Эти условия можно записать иначе, если дополнительно учесть, что компоненты вектора \mathbf{B} на данной границе непрерывны, а также положить $\hat{\rho} \approx 0$. Они примут следующий вид:

$$\sigma_{vis}^{rz} \Big|_{z=0-0} = 0; \quad \sigma_{vis}^{\phi z} \Big|_{z=0-0} = 0. \quad (63)$$

Используя выражения (15), (17), а также условие (62), получаем, что при $v_2 \neq 0$ и $v_4 \neq 0$ условия (63) можно записать как

$$\frac{\partial \hat{u}_r}{\partial z} \Big|_{z=0-0} = 0; \quad \frac{\partial \hat{u}_\phi}{\partial z} \Big|_{z=0-0} = 0. \quad (64)$$

Здесь необходимо отметить, что условие непрерывности z -компоненты импульса было проигнорировано. Дело в том, что в это условие входит отклонение уровня жидкости $h(r)$ от поверхности $z = 0$ (здесь $z = h(r)$ — это высота, на которой в точке r заканчивается область жидкости и начинается область разреженной плазмы). С точностью до членов 1-го порядка данное условие имеет следующий вид:

$$P_0(r, z = h(r)) + (\delta P + \sigma_{vis}^{zz}) \Big|_{z=0-0} = 0. \quad (65)$$

Это равенство показывает, что фактически данное условие не налагает ограничений на течение, но может служить для определения функции $h(r)$.

Следует отметить, что из-за большой силы тяжести, а именно $g \sim 10^{14} - 10^{15}$ см/с² [10], на поверхности нейтронной звезды, даже в нулевом приближении, величина $h(r) \lesssim 10^{-2}$ см, т. е. $h(r) \ll l$. Это позволяет при вычислениях в первом порядке не учитывать условия (65) и считать, что всюду $h(r) \approx 0$.

Подведем итоги данного раздела. На нижней границе $z = -L$ мы будем требо-

вать выполнения условий (45), (51) и (52), причем для простоты будем далее считать, что коэффициенты \bar{D} и \bar{Q} не зависят от k и задаются выражениями (53), (54). На верхней границе $z = 0$ будем требовать выполнения условий (60) – (62) и (64). При этом входящая в условие (61) функция $\hat{b}_\phi(r)$ считается известной (ее образ обозначается как $\hat{b}_\phi(k)$), а величина электрического тока, падающего из магнитосферы на слой, следует выражению

$$\hat{J}_z \Big|_{z=0} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} (r \hat{b}_\phi).$$

Решение уравнений

Рассмотрим течение в области $-L < z < 0$. Поскольку для радиопульсаров можно ожидать, что $\text{Ha} \sim 10^{12} \gg 1$, то будем вычислять все величины только в первом неисчезающем порядке, пренебрегая всеми поправками порядка $\sim 1/\text{Ha}$. При этом будем полагать, что либо значение числа Рейнольдса $\text{Re} \lesssim 1$ (невращающаяся нейтронная звезда), либо $\text{Re} \sim \text{Ha}$ (нормальный радиопульсар). Для того чтобы упростить вычисления и избежать проблемы пересечения мод, будем также считать, что все величины ξ_A различны (хотя бы с точностью примерно 10 %) и ни одна из них не обращается в нуль.

Итак, будем искать решение уравнений (39) – (44) в виде

$$\tilde{f}(z) = \tilde{f} \cdot \exp(\alpha z).$$

Тогда получаем:

$$S\tilde{u}_r = \text{Ha}^2 \alpha \tilde{b}_\phi + (\xi_2 \alpha^2 - \xi_1 k^2) \tilde{u}_\phi; \quad (66)$$

$$-S\tilde{u}_\phi = k\tilde{p}_1 - \xi_4 k^2 \tilde{u}_\phi - \text{Ha}^2 \chi_H \alpha \tilde{b}_\phi + (\xi_2(\alpha^2 + k^2) - (1 + \xi_1)k^2 - \text{Ha}^2) \tilde{u}_r; \quad (67)$$

$$\alpha \tilde{p}_1 = \xi_4 \alpha k \tilde{u}_\phi + (2\alpha^2 - \xi_2(\alpha^2 + k^2)) \tilde{u}_z; \quad (68)$$

$$0 = k\tilde{u}_r + \alpha \tilde{u}_z; \quad (69)$$

$$M\tilde{b}_\phi = -\alpha(\tilde{u}_\phi + \chi_H \tilde{u}_r); \quad (70)$$

$$(\alpha^2 - k^2) \tilde{a}_\phi = \tilde{u}_r + \alpha \chi_H \tilde{b}_\phi, \quad (71)$$

где введены обозначения

$$S = 2\text{Re} + \xi_4(\alpha^2 + k^2) - \xi_3 k^2,$$

$$M = (1 + \chi_H^2) \alpha^2 - k^2 \chi_H.$$

Соответственно при $\alpha \neq 0$ и $M(\alpha) \neq 0$ имеем соотношения

$$(S \cdot M + \text{Ha}^2 \chi_H^2 \alpha^2) \tilde{u}_r = ((\xi_2 \alpha^2 - \xi_1 k^2) \cdot M - \text{Ha}^2 \alpha^2) \tilde{u}_\phi; \quad (72)$$

$$-\alpha^2 (S \cdot M + \text{Ha}^2 \chi_H^2 \alpha^2) \tilde{u}_\phi = (M \cdot F + \text{Ha}^2 \chi_H^2 \alpha^4) \tilde{u}_r; \quad (73)$$

$$\tilde{u}_z = -\frac{k}{\alpha} \tilde{u}_r; \quad (74)$$

$$\tilde{p}_1 = \xi_4 k \tilde{u}_\phi + \left(\xi_2 \frac{(\alpha^2 + k^2)}{\alpha^2} - 2 \right) k \tilde{u}_r; \quad (75)$$

$$\tilde{b}_\phi = -\frac{\alpha}{M} (\tilde{u}_\phi + \chi_H \tilde{u}_r); \quad (76)$$

$$\tilde{a}_\phi = \frac{1}{(\alpha^2 - k^2)} \cdot \frac{1}{M} \times ((\alpha^2 - k^2 \chi_H) \tilde{u}_r - \alpha^2 \chi_H \tilde{u}_\phi), \quad (77)$$

где введено обозначение

$$F = \xi_2(\alpha^2 + k^2)^2 - (3 + \xi_1)k^2 \alpha^2 - \text{Ha}^2 \alpha^2.$$

Отсюда сразу видно, что при $\alpha^2 = k^2$ мы получаем ненулевое решение: $\tilde{a}_\phi \neq 0$, а остальные величины равны нулю.

Это решение описывает потенциальное магнитное поле, очевидно, удовлетворяющее граничным условиям (45), (51), (52), (60) – (62), (64). Поскольку данная мода влияет только на полоидальное магнитное поле, то при нахождении остальных мод (они определяют скорость течения жидкости $\tilde{\mathbf{u}}$) наличие данной моды необходимо учитывать только для того, чтобы удовлетворить граничным условиям (52) и (60). Соответственно, пока нас не интересует полоидальное магнитное поле, мы можем спокойно игнорировать как моды $\alpha^2 = k^2$, так и граничные условия (52), (60). Следовательно, полагая $\alpha^2 \neq k^2$, получаем, что уравнение относительно величины α имеет вид

$$\alpha^2 S (S \cdot M + 2\text{Ha}^2 \chi_H \alpha^2) + (\xi_2 \alpha^2 - \xi_1 k^2) \times (M \cdot F + \text{Ha}^2 \chi_H^2 \alpha^4) - \text{Ha}^2 \alpha^2 F = 0. \quad (78)$$

Это уравнение является полиномом 4-й степени относительно величины α^2 и соот-

ветственно имеет четыре корня.

Рассмотрим сначала случай $\alpha^2 = \text{Ha}^2 x$, где $x \sim 1$, $\alpha^2 \gg k^2$.

Тогда с точностью до поправок порядка $1/\text{Ha}$ уравнение (78) принимает вид

$$(\xi_2^2 + \xi_4^2)(1 + \chi_H^2)x^2 + 2(\xi_4\chi_H - \xi_2)x + 1 = 0. \quad (79)$$

Его решение имеет вид

$$x_{1,2} = \frac{1}{\xi_2 - is\xi_4} \cdot \frac{1}{1 - is\chi_H}, \quad (80)$$

где $s = \pm 1$ задает выбор корня уравнения: x_1 и x_2 соответствуют $s = +1$ и $s = -1$ соответственно. При этом для данной моды $\tilde{u}_r \approx is\tilde{u}_\phi$.

Введем также обозначения

$$\alpha_1^2 = \text{Ha}^2 x_1, \quad \text{Re}(\alpha_1) > 0; \\ \alpha_2^2 = \text{Ha}^2 x_2, \quad \text{Re}(\alpha_2) > 0.$$

Рассмотрим теперь случай $\alpha^2 = \frac{k^4}{\text{Ha}^2} x$, где $x \sim 1$, $\alpha^2 \ll k^2$. Тогда с точностью до поправок $\sim 1/\text{Ha}$ уравнение (78) принимает вид

$$x^2 - \left(\xi_2 + \xi_1\chi_{\parallel} + \frac{k^2}{\text{Ha}^2} S_1^2 \chi_{\parallel} \right) + \xi_2 \xi_1 \chi_{\parallel} = 0, \quad (81)$$

где введено обозначение

$$S_1 = 2 \frac{\text{Re}}{k^2} + \xi_4 - \xi_2.$$

Тогда, соответственно, получаем, что

$$x_{3,4} = \frac{1}{2} \left(\xi_2 + \xi_1\chi_{\parallel} + \frac{k^2}{\text{Ha}^2} S_1^2 \chi_{\parallel} \right) + \\ + s \sqrt{\frac{1}{4} \left(\xi_2 + \xi_1\chi_{\parallel} + \frac{k^2}{\text{Ha}^2} S_1^2 \chi_{\parallel} \right)^2 - \xi_2 \xi_1 \chi_{\parallel}}, \quad (82)$$

где $s = \pm 1$ опять задает выбор корня уравнения: x_3 и x_4 соответствуют $s = +1$ и $s = -1$ соответственно.

В случае $\text{Re} \lesssim 1$ получаем $x_3 \approx \xi_2$ и $x_4 \approx \xi_1\chi_{\parallel}$. При этом для данных мод

$$\tilde{u}_r \approx P\tilde{u}_\phi,$$

где $P_{3,4} = (x_{3,4} - \xi_1\chi_{\parallel}) / (S_1\chi_{\parallel} - \chi_H x_{3,4})$.

В случае $\text{Re} \lesssim 1$ имеем

$$P_3 \approx \frac{\xi_2 - \xi_1\chi_{\parallel}}{S_1\chi_{\parallel} - \chi_H \xi_2}; \quad P_4 \approx -\frac{k^2}{\text{Ha}^2} \xi_1\chi_{\parallel} \frac{S_1 - \chi_H \xi_1}{\xi_2 - \xi_1\chi_{\parallel}},$$

а при $\text{Re} \sim \text{Ha}$ получим

$$P_{3,4} \approx (x_{3,4} - \xi_1\chi_{\parallel}) / (S_1\chi_{\parallel}) = O(1/\text{Ha}).$$

Введем также обозначения

$$\alpha_3 = (k^2/\text{Ha})\sqrt{x_3} > 0; \\ \alpha_4 = (k^2/\text{Ha})\sqrt{x_4} > 0.$$

Пусть вклад в величину $f(z)$ моды A равен $\tilde{f}_A^+ C_A^+$ при $\alpha = \alpha_A$ и $\tilde{f}_A^- C_A^-$ при $\alpha = -\alpha_A$, где C_A^+ , C_A^- — амплитуды соответствующих мод, $A = 1 - 4$.

Тогда, пренебрегая модами $\alpha^2 = k^2$, которые, как уже отмечалось, влияют только на потенциал \tilde{a}_ϕ , запишем полное решение в области $-L < z < 0$ в следующем виде:

$$\tilde{f}(z) = \sum_{A=1}^4 (\tilde{f}_A^+ C_A^+ e^{\alpha_A z} + \tilde{f}_A^- C_A^- e^{-\alpha_A z}). \quad (83)$$

Слагаемые $\tilde{f}_{1,2}^+$ будем учитывать только вблизи границы $z = 0$, а слагаемые $\tilde{f}_{1,2}^-$ — только вблизи границы $z = -L$. Подставим решение (83) в граничные условия (45), (51), (61), (62), (64).

В результате получаем, что при $-L < z < 0$, с точностью до поправок $\sim 1/\text{Ha}$,

$$\tilde{u}_r = -\frac{i}{2} k^2 \tilde{b}_\phi \chi_{\parallel} \left(\frac{e^{\alpha_1 z}}{\alpha_1} - \frac{e^{\alpha_2 z}}{\alpha_2} \right) + \\ + \frac{i}{2} k \tilde{b}_\phi \bar{D} (1 + \chi_H^2) \left(\frac{1}{L} \left(\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_2} \right) \mathcal{N}(z) - \right. \\ \left. - (e^{-\alpha_1(z+L)} - e^{-\alpha_2(z+L)}) \right) + 2 \frac{\text{Re}}{\text{Ha}^2} k^2 \tilde{b}_\phi \chi_{\parallel} \times \\ \times \left(z + L - \frac{1}{2} \left(\frac{e^{\alpha_1 z}}{\alpha_1} - \frac{e^{\alpha_2 z}}{\alpha_2} \right) - \frac{L}{2} \mathcal{N}(z) \right); \quad (84)$$

$$\tilde{u}_\phi = \tilde{b}_\phi \left(k \bar{D} (1 + \chi_H^2) + k^2 \chi_{\parallel} \times \right. \\ \left. \times \left(z + L - \frac{1}{2} \left(\frac{e^{\alpha_1 z}}{\alpha_1} + \frac{e^{\alpha_2 z}}{\alpha_2} \right) \right) \right); \quad (85)$$

$$\tilde{u}_z = -\frac{\text{Re}}{\text{Ha}^2} k^2 \tilde{b}_\phi \chi_{\parallel} z(z+L) - \\ - \frac{i}{2} k^2 \tilde{b}_\phi \bar{D} (1 + \chi_H^2) \times \\ \times \left(\frac{1}{\alpha_1} \left(e^{-\alpha_1(z+L)} + \frac{z}{L} \right) - \frac{1}{\alpha_2} \left(e^{-\alpha_2(z+L)} + \frac{z}{L} \right) \right); \quad (86)$$

$$\tilde{b}_\phi = \tilde{b}_\phi \left(1 - \frac{k\bar{D}}{2} \left(\frac{1 + i\chi_H}{\alpha_1} e^{-\alpha_1(z+L)} + \frac{1 - i\chi_H}{\alpha_2} e^{-\alpha_2(z+L)} \right) \right), \quad (87)$$

где введено обозначение

$$\mathcal{N}(z) = 1 - \frac{1}{2} (\exp(-\alpha_1(z+L)) + \exp(-\alpha_2(z+L))).$$

Давление \tilde{p}_1 с точностью до поправок $\sim 1/\text{Ha}$ не зависит от z и выражается как

$$\tilde{p}_1 = \text{Ha}^2 \tilde{b}_\phi \bar{D} (1 + \chi_H^2) \frac{i}{2L} \left(\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_2} \right) - 2\tilde{b}_\phi \text{Re} \left(\bar{D} (1 + \chi_H^2) + \frac{kL}{2} \chi_{\parallel} \right). \quad (88)$$

Что касается полоидального магнитного поля, то с учетом вклада потенциальной моды и граничных условий (52), (60), с точностью до поправок $\sim 1/\text{Ha}$, его можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \tilde{a}_\phi = & C_p^+ e^{kz} + C_p^- e^{-k(z+L)} - \frac{\text{Re}}{\text{Ha}^2} \tilde{b}_\phi \chi_{\parallel} (2z+L) - \\ & - \tilde{b}_\phi \frac{i\bar{D}}{2kL} \left(\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_2} \right) (1 + \chi_H^2) + \\ & + \tilde{b}_\phi \frac{k\bar{D}}{2} \left(\frac{\chi_H - i}{\alpha_1^2} e^{-\alpha_1(z+L)} + \frac{\chi_H + i}{\alpha_2^2} e^{-\alpha_2(z+L)} \right), \end{aligned} \quad (89)$$

где амплитуды потенциальной моды C_p^+ и C_p^- следуют выражениям

$$C_p^+ = \tilde{b}_\phi \frac{i\bar{D}}{4kL} \left(\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_2} \right) (1 + \chi_H^2) + \frac{\tilde{b}_\phi}{k} \frac{\text{Re}}{\text{Ha}^2} \chi_{\parallel} \left(1 + \frac{kL}{2} \right); \quad (90)$$

$$\begin{aligned} C_p^- = & -\frac{\bar{Q}}{2k} \tilde{b}_\phi - \frac{\tilde{b}_\phi}{k} \frac{\text{Re}}{\text{Ha}^2} \chi_{\parallel} \left(1 + \frac{kL}{2} \right) + \\ & + \tilde{b}_\phi \frac{i\bar{D}}{4kL} \left(\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_2} \right) (1 + \chi_H^2) - \\ & - \tilde{b}_\phi \frac{\bar{D}}{4} \left(\frac{\chi_H - i}{\alpha_1} + \frac{\chi_H + i}{\alpha_2} \right), \end{aligned} \quad (91)$$

и соответственно при $\bar{Q} \neq 0$ можно написать, что

$$\tilde{a}_\phi \approx -\tilde{b}_\phi \frac{\bar{Q}}{2k} e^{-k(z+L)}.$$

Предположим теперь, что при $z=0$ электрический ток \widehat{J}_z можно записать как

$$\widehat{J}_z = \widehat{\mathcal{J}}_{surf} G_1(r),$$

где введены обозначения

$$G_n(r) = \int_0^{+\infty} k^n \tilde{F}(k) J_0(kr) k dk; \quad (94)$$

$$F_1(r) = \int_0^{+\infty} k^n \tilde{F}(k) J_1(kr) k dk.$$

При этом очевидно, что

$$\delta \widehat{B}_\phi \Big|_{z=0} = B_0 \widehat{\mathcal{J}}_{surf} F_0(r), \quad \tilde{b}_\phi = \widehat{\mathcal{J}}_{surf} \tilde{F}(k);$$

$$G_1 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rF_0), \quad G_2 = -L(G_0);$$

$$F_2 = -\frac{\partial G_1}{\partial r} = -L(F_0).$$

Тогда учитывая, что в рассматриваемом приближении величины α_1 , α_2 и \bar{D} не зависят от k , получаем, что при $-L < z < 0$, с точностью до поправок $\sim 1/\text{Ha}$,

$$\begin{aligned} \frac{u_r}{\widehat{\mathcal{J}}_{surf}} = & -\frac{i}{2} \chi_{\parallel} \left(\frac{e^{\alpha_1 z}}{\alpha_1} - \frac{e^{\alpha_2 z}}{\alpha_2} \right) F_2(r) + \\ & + \frac{i}{2} \bar{D} (1 + \chi_H^2) \times \left(\frac{1}{L} \left(\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_2} \right) \mathcal{N}(z) - \right. \\ & \left. - (e^{-\alpha_1(z+L)} - e^{-\alpha_2(z+L)}) \right) F_1(r) + 2 \frac{\text{Re}}{\text{Ha}^2} \chi_{\parallel} \times \\ & \times \left(z + L - \frac{1}{2} \left(\frac{e^{\alpha_1 z}}{\alpha_1} - \frac{e^{\alpha_2 z}}{\alpha_2} \right) - \frac{L}{2} \mathcal{N}(z) \right) F_2(r); \end{aligned} \quad (95)$$

$$\begin{aligned} \frac{u_\phi}{\widehat{\mathcal{J}}_{surf}} = & \bar{D} (1 + \chi_H^2) \mathcal{N}(z) F_1(r) + \\ & + \chi_{\parallel} \left(z + L - \frac{1}{2} \left(\frac{e^{\alpha_1 z}}{\alpha_1} + \frac{e^{\alpha_2 z}}{\alpha_2} \right) \right) F_2(r); \end{aligned} \quad (96)$$

$$\begin{aligned} \frac{u_z}{\widehat{\mathcal{J}}_{surf}} = & -\frac{\text{Re}}{\text{Ha}^2} \chi_{\parallel} \cdot z(z+L) G_3(r) - \\ & - \frac{i}{2} \bar{D} (1 + \chi_H^2) \left(\frac{1}{\alpha_1} \left(e^{-\alpha_1(z+L)} + \frac{z}{L} \right) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{\alpha_2} \left(e^{-\alpha_2(z+L)} + \frac{z}{L} \right) \right) G_2(r); \end{aligned} \quad (97)$$

$$\frac{b_\phi}{\widehat{\mathcal{J}}_{surf}} = F_0(r) - \frac{\bar{D}}{2} \left(\frac{1 + i\chi_H}{\alpha_1} e^{-\alpha_1(z+L)} + \frac{1 - i\chi_H}{\alpha_2} e^{-\alpha_2(z+L)} \right) F_1(r); \quad (98)$$

$$\delta p = \frac{B_0^2}{4\pi} \cdot \widehat{\mathcal{J}}_{surf} \cdot \bar{D} (1 + \chi_H^2) \times \left(\frac{i}{2L} \left(\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_2} \right) - 2 \frac{\text{Re}}{\text{Ha}^2} \right) G_0(r) - \frac{B_0^2}{4\pi} \cdot \widehat{\mathcal{J}}_{surf} \cdot \frac{\text{Re}}{\text{Ha}^2} \chi_{\parallel} L G_1(r). \quad (99)$$

Подставляя выражение (98) в формулы (36), получаем, что в области $-L < z < 0$ величина J_z практически не зависит от z :

$$\frac{J_z}{\widehat{\mathcal{J}}_{surf}} = G_1(r) - \frac{\bar{D}}{2} \left(\frac{1 + i\chi_H}{\alpha_1} e^{-\alpha_1(z+L)} + \frac{1 - i\chi_H}{\alpha_2} e^{-\alpha_2(z+L)} \right) G_2(r) \approx G_1(r). \quad (100)$$

Частный случай решения. Рассмотрим частный случай, когда функция $\tilde{F}(k)$ имеет вид

$$\tilde{F}(k) = \frac{a^2 b^2}{b^2 - a^2} \cdot \frac{1}{k^2} \left(\frac{1}{b} J_1(kb) - \frac{1}{a} J_1(ka) \right) \times e^{-\beta k^2} \cdot \theta(k_{\max} - k) \cdot \theta(k - k_{\min}), \quad (101)$$

где $\theta(x)$ – функция Хевисайда ($\theta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ при $x < 0$).

В пределе, когда $\beta \rightarrow 0$, $k_{\min} \rightarrow 0$, $k_{\max} \rightarrow +\infty$, получаем выражение

$$G_1(r) = \frac{a^2 b^2}{b^2 - a^2} \cdot \left(\frac{\theta(b-r)}{b^2} - \frac{\theta(a-r)}{a^2} \right).$$

Соответственно, в области $0 < r < a$ имеем $G_1(r) = -1$ и $\widehat{J}_z = -\widehat{\mathcal{J}}_{surf}$, что согласу-

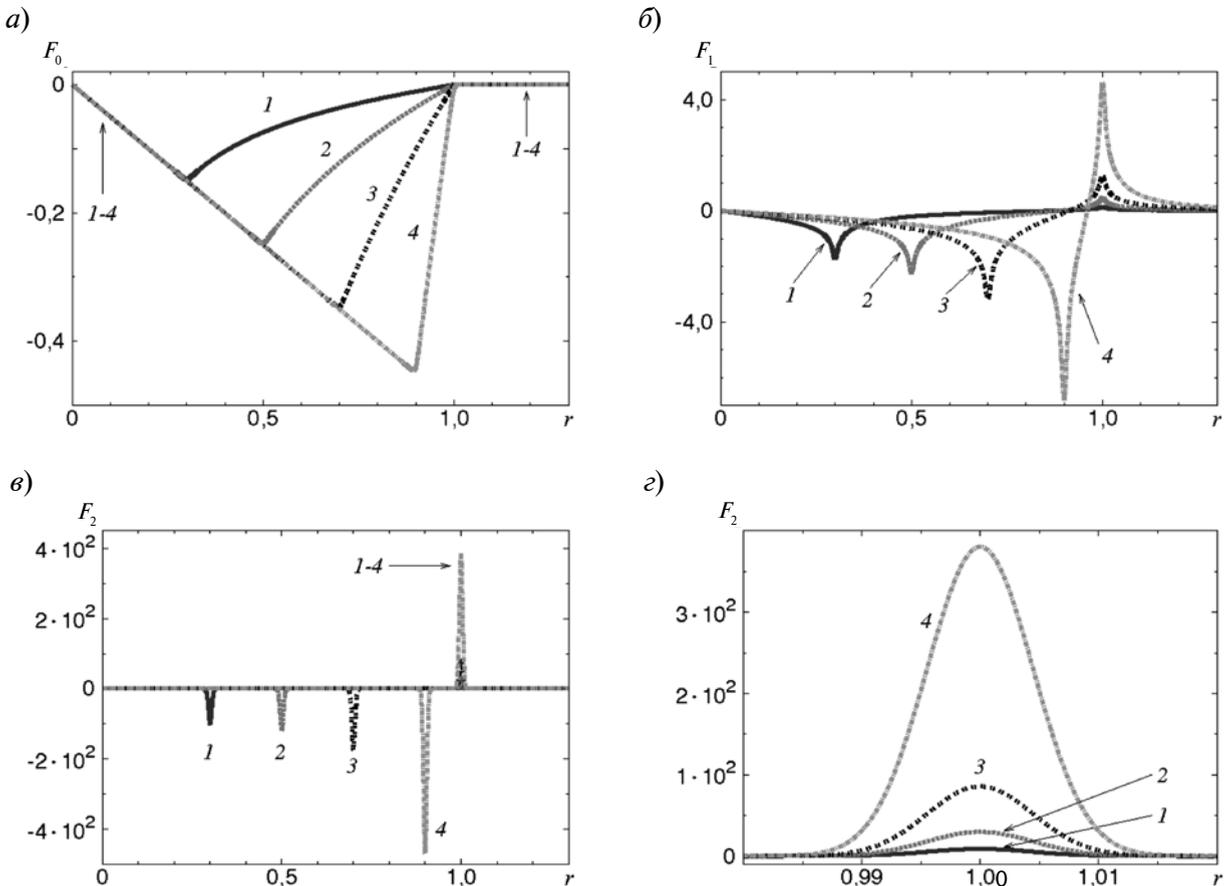


Рис. 2. Графики функций $F_n(r)$, рассчитанные по формуле (8б) для различных значений n ($a - \varepsilon$) и размера области a (1 – 4). Значения n : 0 (а), 1 (б), 2 (в, г); ε – увеличенный фрагмент рис. 2, в. Значения a : 0,3 (1); 0,5 (2); 0,7 (3); 0,9 (4). Принято, что $b = 1$, $\beta = 10^{-5}$, $k_{\min} = 10^{-2}$, $k_{\max} = 10^3$

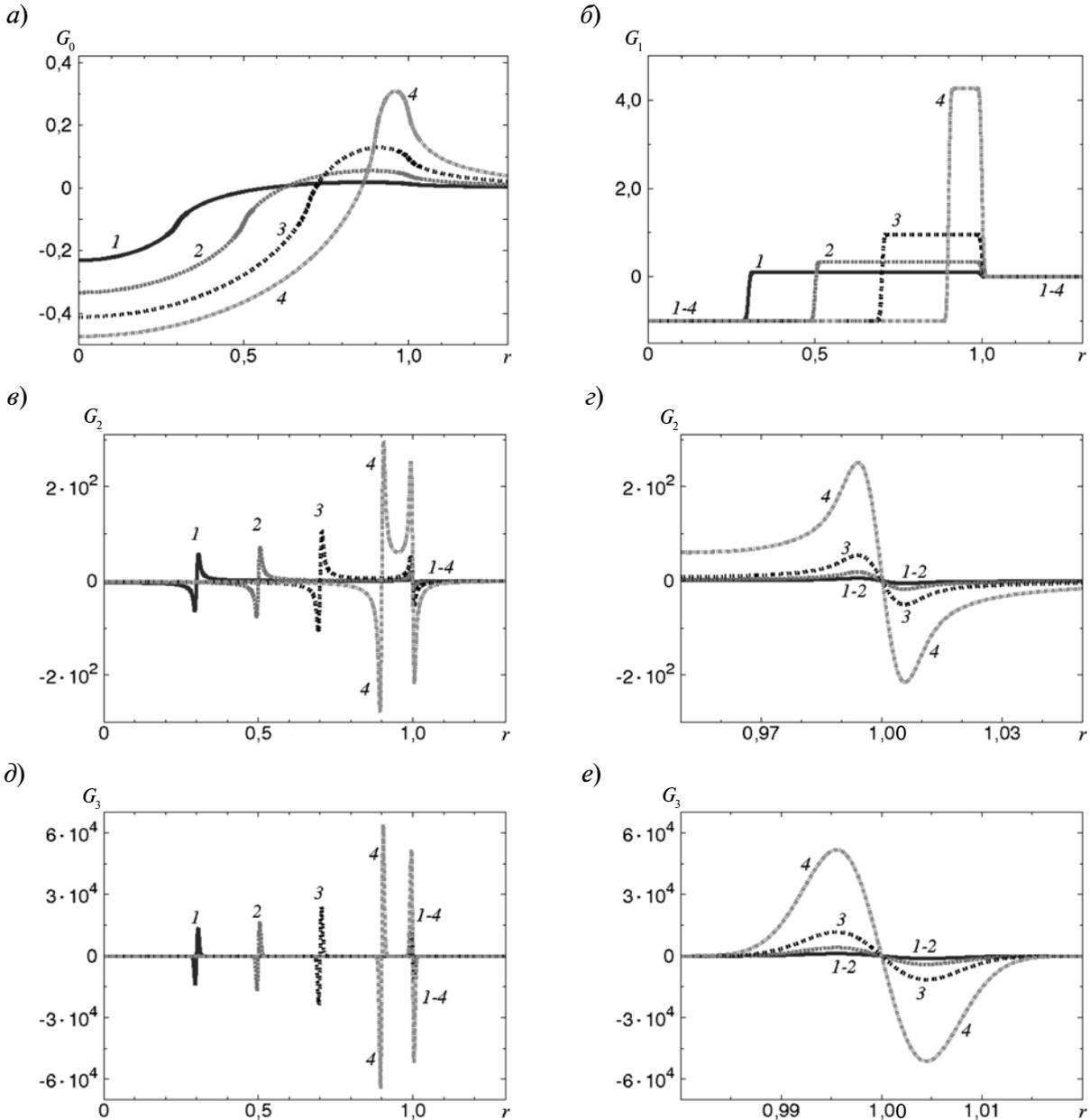


Рис. 3. Графики функций $G_n(r)$, рассчитанные по формуле (86) для различных значений n (а – е) и размера области a (1 – 4). Значения n : 0 (а), 1 (б), 2 (в, г); 3 (д, е); г, е – увеличенные фрагменты рис. 3, в, д. Значения a и остальных параметров – те же, что на рис. 2

ется с профилем тока, текущего через внутренний зазор в режиме свободного истечения [20]. Величина этого тока практически не зависит ни от радиуса r , ни от размера a области, занимаемой внутренним зазором (см., например, работы [21–23]). В области $a < r < b$ ток меняет знак, что соответствует либо току, текущему через внешний зазор [9], либо (при $(b - a) \ll a$) току, который

возвращается по границе пульсарная трубка – замкнутые силовые линии [2, 3, 5]. Структура магнитосферы с подобным профилем тока при условии $(b - a) \ll a$ была рассмотрена, в частности, в работе [24]. Выражение (101) подбиралось так, чтобы в пределе, когда $\beta \rightarrow 0$, полный электрический ток, текущий через пульсарную трубку, был равен нулю [5, 9].

Аналогичный профиль плотности тока рассматривался для случая кольцевого зазора [25 – 27]. В частности, авторами работы [25] показано, что для случая соосного пульсара, когда $\mathbf{\Omega} \parallel \mathbf{B}_0$, весьма разумным выбором является $a/b \approx 0,74$. Однако надо иметь в виду, что расположение внутреннего, внешнего (и кольцевого) зазоров, а также доли сечения пульсарной трубки, занимаемые каждым из них, очень сильно зависят от общей структуры токов, текущих в магнитосфере пульсара [9, 28, 29].

При использовании выражения (101) следует иметь в виду, что в рассматриваемом пределе при $\beta \rightarrow 0$ интегралы сходятся плохо из-за очень резких скачков плотности электрического тока \hat{J}_z в точках $r = a$, $r = b$ и, более того, в данных точках функции $F_2(r)$ и $G_2(r)$ обращаются в бесконечность. Множитель $\exp(-\beta k^2)$ был добавлен для улучшения сходимости интегралов и устранения бесконечностей. Величина $1/\sqrt{\beta}$ примерно соответствует толщине слоя, в котором происходит изменение электрического тока при $r = a$ и $r = b$. Получившиеся при этом виды функций $F_n(r)$ и $G_n(r)$ для $\beta = 10^{-5}$, $k_{\max} = 10^3$, $k_{\min} = 10^{-2}$ и $b = 1$ показаны на рис. 2 и 3.

Обсуждение полученных результатов

В данной работе было рассмотрено течение жидкости, возникающее на поверхности полярной шапки радиопулсара ввиду необходимости замкнуть электрический ток, текущий по пульсарной трубке [2, 5]. При этом учитывалась анизотропия проводимости и вязкости жидкости, связанная с наличием магнитного поля.

В частности, в размерных величинах азимутальная скорость течения жидкости δu_ϕ имеет вид

$$\delta u_\phi \approx \frac{c}{P} \frac{\hat{J}_{surf}}{j_{GJ}} \left(\frac{1}{\sigma_\parallel} \left(\frac{z+L}{l} - \frac{1}{2l} \times \left(\frac{e^{\alpha_1 z/l}}{\alpha_1} + \frac{e^{\alpha_2 z/l}}{\alpha_2} \right) \right) F_2\left(\frac{r}{l}\right) + \frac{\bar{D}}{\sigma_\perp} \mathcal{N}\left(\frac{z}{l}\right) F_1\left(\frac{z}{l}\right) \right), \quad (102)$$

где \hat{J}_{surf} – плотность электрического тока при $z = 0$ и $r < a$, $j_{GJ} = (\Omega B_0) / (2\pi)$, $P = 2\pi / \Omega$ – период вращения звезды, $\sigma_\parallel = 1 / R_\parallel$, $\sigma_\perp = R_\perp / (R_\perp^2 + R_H^2)$ – проводимости вещества параллельно и перпендикулярно направлению магнитного поля.

Стоит отметить, что в рассматриваемом пределе, когда $Na \gg 1$, выражение (102) почти совпадает с изотропным случаем. И в частности, как и в изотропном случае, не зависит от значения вязкости (за исключением области гартмановских слоев). Основное отличие от указанного случая заключается в том, что в первом слагаемом выражения (102) вместо коэффициента $1/\sigma$, где σ – изотропная проводимость, стоит $1/\sigma_\parallel$, а во втором вместо \bar{D}/σ формула содержит \bar{D}/σ_\perp . При этом необходимо отметить, что, несмотря на справедливость соотношения [13]

$$\sigma_\perp / \sigma_\parallel \sim 1 / (\omega_B^2 \tau_{scat}^2) \sim 10^{-4} \ll 1,$$

для приведенного на рис. 3 профиля электрического тока \hat{J}_z вклады обоих слагаемых в максимальное значение скорости δu_ϕ вполне сравнимы. Это связано с тем, что максимальные значения функции F_2 , как и в изотропном случае, в $1/\sqrt{\beta} \sim 10^2$ раз больше максимальных значений функции F_1 . Кроме того, анизотропия проводимости приводит значительному уменьшению коэффициента $\bar{D} \sim \sqrt{\chi_\parallel} \sim 10^{-2}$, в отличие от изотропного случая, где разумно считать (особенно при $k \gg 1$) $\bar{D} \approx 1$. Дополнительно следует учесть, что при анизотропной проводимости коэффициент \bar{D} оказывается гораздо чувствительнее к росту проводимости в глубине коры, а это приводит к его дополнительному уменьшению.

Таким образом, скорость течения δu_ϕ можно грубо оценить как

$$\delta u_\phi \sim \frac{c}{P} \frac{1}{\sigma_\parallel} \frac{b^2}{(b-a)\sqrt{\beta}} \sim 3 \cdot 10^{-8} \frac{b^2}{(b-a)\sqrt{\beta}} \text{ см/с.}$$

Точно так же, как и в изотропном случае, столь малая величина скорости вращения жидкости связана с тем обстоятельством, что возникшее дифференциальное вращение жидкости почти полностью предотвращает замыкание электрического тока в жидком слое. Это следует и из анализа

выражения (100), согласно которому величина j_z остается практически неизменной во всем жидком слое (сколько-нибудь заметное уменьшение электрического тока j_z происходит лишь в нижнем гартмановском слое).

Итак, проведенный анализ позволяет заключить, что электрический ток проходит сквозь возможную значительную толщину жидкого слоя, почти не изменяясь, и замыкается лишь в твердой коре. Такое же заключение сделано для изотропного случая, и это несмотря на тот факт, что указанная толщина может быть сравнима с размером полярной шапки $L \sim l$.

Что же касается полоидального течения, то оно все еще остается пренебрежимо малым, хотя теперь главные слагаемые в выражениях для δu_r и δu_z имеют скорее порядок \bar{D} / Na , в отличие от изотропного случая, когда имеется порядок Re / Na^2 . Другими словами, теперь полоидальное течение генерируется главным образом в тонких гартмановских слоях, а не вызывается силой Кориолиса в основном объеме жидкости.

Поправка к полоидальному магнитному полю δa_ϕ значительно стала превосходить таковую для изотропного случая и теперь имеет порядок $\sim Q$, а не $\sim 1 / Na$, как это было в изотропном случае. Иными словами, это поле определяется, в основном, холловскими токами, протекающими внутри твердой коры (и нижнем гартмановском слое). Однако величина поля δa_ϕ все равно оказывается сравнимой с поправками порядка $\sim (\Omega / c)^2 B_0$, связанными с вращением заряженной жидкости [2] (в данной работе мы ими пренебрегаем).

Важно также отметить, что при выводе граничного условия (60) мы считали, что вся область $z > 0$ заполнена очень разреженной плазмой, экранирующей продольное электрическое поле, т. е. мы пренебрегали наличием внутреннего зазора на поверхности нейтронной звезды.

И, более того, мы считали, что электрический ток течет строго вдоль магнитного поля $\mathbf{j} = j_e \mathbf{e}_B$. Это означает, в частности, что мы пренебрегаем влиянием $(E \times B)$ -дрейфа на движение частиц в магнитосфере и не учитываем возможность существования

в магнитосфере холловского тока (мы положили $\hat{\chi}_H = 0$).

Однако если бы мы учли эти факторы, то это в самом крайнем случае привело бы к появлению членов порядка $\Omega l / c$ в коэффициенте C_p^+ и тогда вклад граничного условия (60) в δa_ϕ стал бы всего лишь сравним с вкладом нижнего граничного условия (52).

Также стоит отметить, что рассматриваемые граничные условия (60) – (62), (64) формально приводят к скачку тангенциальной составляющей скорости вращения

$$\mathbf{u}_\tau = u_r \mathbf{e}_r + u_\phi \mathbf{e}_\phi$$

на границе $z = 0$.

Необходимо дополнительно отметить, что, согласно работе [14],

$$\chi_{||} - 1 \sim 1 / (\omega_B^2 \tau_{scat}^2); \quad \chi_H \sim \omega_B \tau_{scat},$$

т. е. $\chi_{||} \approx 1$ и $\chi_H \sim 10^2 \gg 1$.

Однако данный результат относится только к плазме, состоящей из ионов, имеющих одинаковое отношение заряда к массе. Нам же представляется, что более корректно считать, что жидкость на поверхности нейтронной звезды состоит из различных элементов, а значит, ионы будут иметь разное отношение заряда к массе. Поэтому в данной работе при проведении численных оценок величин полагалось, что [13]

$$\chi_H \sim 1 / (\omega_B \tau_{scat}) \sim 10^{-2} \ll 1;$$

$$\chi_{||} \sim 1 / (\omega_B^2 \tau_{scat}^2) \sim 10^{-4} \ll \chi_H.$$

Также стоит отметить, что при температуре поверхности нейтронной звезды $T_{surf} < 3 \cdot 10^6$ К поверхность океана может затвердеть [30]. При этом из-за быстрого роста температуры в глубь звезды сам океан останется жидким [10, 30]. Это явление может привести к изменению граничных условий (60) – (62), (64), а также к замыканию части электрического тока j_z через слой «льда», покрывающего океан.

Заключение

Итак, в результате проведенного исследования дифференциального вращения жидких полярных шапок, вызванного магнитосферными токами, показано, что скорость этого вращения очень мала и почти весь ток замыкается в глубокой коре.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований

(код проекта 13-02-00112) и гранта Президента РФ по поддержке ВНШР (НШ 294.2014.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Jones P.B.** Pulsar magnetic alignment – The critical period and integrated pulse width // *Astrophysical Journal*. 1976. Vol. 209. Pt. 1, pp. 602–605.
2. **Бескин В.С.** Осесимметричные стационарные течения в астрофизике. М.: Физматлит, 2005. 381 с.
3. **Beskin V.S., Gurevich A.V., Istomin Ya.N.** Physics of the pulsar magnetosphere. Cambridge: Cambridge University Press, 2006. 408 p.
4. **Бескин В.С.** Радиопульсары // *Успехи физических наук*. 1999. Т. 169. № 11. С. 1169–1198.
5. **Бескин В.С., Истомин Я.Н., Филиппов А.А.** Радиопульсары – поиски истины // *Успехи физических наук*. 2013. Т. 183. № 2. С. 179–194.
6. **Goldreich P., Julian W.H.** Pulsar electrodynamics // *Astrophysical Journal*. 1969. Vol. 157, pp. 869–880.
7. **Timokhin A.N.** On the force-free magnetosphere of an aligned rotator // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2006. Vol. 368, Iss. 3, pp. 1055–1072.
8. **Philippov A., Spitkovsky A.** Ab initio pulsar magnetosphere: three-dimensional particle-in-cell simulations of axisymmetric pulsars. URL: arXiv:astro-ph/1312.4970.
9. **Shibata S.** Magnetosphere of the rotation-powered pulsar – A DC circuit model // *Astrophysical Journal*. 1991. Pt. 1, Vol. 378, pp. 239–254.
10. **Haensel P., Potekhin A.Y., Yakovlev D.G.** Neutron stars 1. Equation of state and structure. Springer, 2007.
11. **Бескин В.С., Желтоухов А.А., Обухова А.К., Стройнов Е.Е.** К природе аномального момента сил, действующего на вращающийся намагниченный шар в вакууме // *Журнал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН «Краткие сообщения по физике»*. 2013. № 9. С. 33–37.
12. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Теоретическая физика в 10 тт. Т. 8. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 620 с.
13. **Yakovlev D.G., Shalybkov D.A.** Electrical conductivity of neutron star cores in the presence of a magnetic field. Pt. 2. A free-particle model of npe-matter // *Astrophysics and Space Science*. 1991. Vol. 176. Iss. 2, pp. 191–215.
14. **Geppert U., Rheinhardt M.** Non-linear magnetic field decay in neutron stars. Theory and observations // *Astronomy and Astrophysics*. 2002. Vol. 392, pp. 1015–1024.
15. **Брагинский С.И.** Явления переноса в плазме // *Вопросы теории плазмы*; под ред. М.А. Леонтовича. 1963. Вып. 1. С. 183–271.
16. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Теоретическая физика в 10 тт. Т. 10. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. С. 65.
17. **Чугунов А.И., Яковлев Д.Г.** Сдвиговая вязкость и осцилляции коры нейтронных звезд // *Астрономический журнал*. 2005. Т. 82. № 9. С. 814–829.
18. **Potekhin A.Y.** Electron conduction in magnetized neutron star envelopes // *Astronomy and Astrophysics*. 1999. Vol. 351, pp. 787–797.
19. **Бейтмен Г., Эрдейи А.** Высшие трансцендентные функции. Т. 2 Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены. М.: Наука, 1966. С. 85.
20. **Scharlemann E.T., Arons J., Fawley W.M.** Potential drops above pulsar polar caps – Ultra-relativistic particle acceleration along the curved magnetic field // *Astrophysical Journal*. 1978. Pt. 1. Vol. 222, pp. 297–316.
21. **Бескин В.С.** Влияние общерелятивистских эффектов на электродинамику пульсаров // *Письма в Астрономический журнал*. 1990. Т. 16. № 7. С. 665–672.
22. **Muslimov A.G., Tsygan A.I.** General relativistic electric potential drops above pulsar polar caps // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 1992. Vol. 255, pp. 61–70.
23. **Harding A.K., Muslimov A.G.** Pulsar polar cap heating and surface thermal X-ray emission. I. Curvature radiation pair fronts // *The Astrophysical Journal*. 2001. Vol. 556. Iss. 2, pp. 987–1001.
24. **Timokhin A.N.** Force-free magnetosphere of an aligned rotator with differential rotation of open magnetic field lines // *Astrophysics and Space Science*. 2007. Vol. 308. Iss. 1–4, pp. 575–579.
25. **Qiao G.J., Lee K.J., Wang H.G., Xu R.X., Han J.L.** The inner annular gap for pulsar radiation: γ -ray and radio emission // *The Astrophysical Journal*. 2004. Vol. 606. Iss. 1, pp. L49–L52.
26. **Xu R.X., Cui X.H., Qiao G.J.** Current flows in pulsar magnetospheres // *Chinese Journal of Astronomy and Astrophysics*. 2006. Vol. 6. Iss. 2, pp. 217–226.
27. **Lee K.J., Qiao G.J., Wang H.G., Xu R.X.** On the electrodynamics of counter stream in pulsar’s inner annular cap region // *Advances in Space Research*. 2008. Vol. 41. Iss. 1, pp. 180–182.
28. **Shibata S.** Pulsar electrodynamics // “Pulsar Astronomy-2000 and Beyond” ASP Conference Series. Vol. 202. Proceedings of the 177th Colloquium of the IAU, Bonn, Germany. August, 30 – September, 3, 1999. M. Kramer, N. Wex, and N. Wielebinski (eds.). 2000. Vol. 202, pp. 411–416.
29. **Yuki S., Shibata S.** A particle simulation for the pulsar magnetosphere: Relationship of polar cap, slot gap, and outer gap // *Publications of the Astronomical*



Society of Japan. 2012. Vol. 64. No.3, pp. 9-19.
30. Potekhin A.Y., Chabrier G. Equation of state

for magnetized Coulomb plasmas // *Astronomy & Astrophysics*. 2013. Vol. 550, id. A43, 16 p.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЦЫГАН Анатолий Иванович – доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
tsygan.astro@mail.ioffe.ru

ШАЛЫБКОВ Дмитрий Александрович – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
dasha@astro.ioffe.ru

БАРСУКОВ Дмитрий Петрович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
bars.astro@mail.ioffe.ru

ГОГЛИЧИДЗЕ Олег Анзорович – старший лаборант Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
goglichidze@gmail.com

Tsygan A.I., Shalybkov D.A., Barsukov D.P., Goglichidze O.A. AN ANALYSIS OF DIFFERENTIAL ROTATION OF NEUTRON STAR POLAR CAPS FOR THE CASE OF THE ANISOTROPIC CONDUCTIVITY OF THE CAP SUBSTANCE.

The differential rotation of liquid polar caps caused by magnetospheric currents closing up under neutron star surface has been considered. The anisotropy of cap electric conductivity and viscosity due to magnetic field was taken into account. The rotation velocity was shown to be very slow and almost all electric current was brought out to close up deeper, inside the rigid crust.

RADIOPULSAR, NEUTRON STAR, MAGNETIC HYDRODYNAMICS, POLAR CAP, DIFFERENTIAL ROTATION, ANISOTROPIC CONDUCTIVITY.

REFERENCES

1. Jones P.B. Pulsar magnetic alignment – The critical period and integrated pulse width. *Astrophysical Journal*, 1976, Vol. 209, Pt. 1, pp. 602-605.
2. Beskin V.S. *Ossesimmetrichnye stacionarnye techeniya v astrofizike*. Moscow, Fizmatlit, 2005, 381 p. (rus)
3. Beskin V.S., Gurevich A.V., Istomin Ya.N. *Physics of the pulsar magnetosphere*. Cambridge University Press, 2006, 408 p.
4. Beskin V.S. Radio pulsars. *Physics Uspekhi*, 1999, Vol. 42, Iss. 11, pp. 1071-1098.
5. Beskin V.S., Istomin, Y.N., Philippov A.A. Radio pulsars: the search for truth. *Physics Uspekhi*, 2013. Vol. 56, Iss. 2, pp. 164-179.
6. Goldreich P., Julian W.H. Pulsar electrodynamic. *Astrophysical Journal*, 1969, Vol. 157, pp. 869-880.
7. Timokhin A.N. On the force-free magnetosphere of an aligned rotator. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2006, Vol. 368, Issue 3, pp. 1055-1072.
8. Philippov A., Spitkovsky A. Ab-initio pulsar magnetosphere: three-dimensional particle-in-cell simulations of axisymmetric pulsars. Available at: arXiv: astro-ph/1312.4970.
9. Shibata S. Magnetosphere of the rotation-powered pulsar – A DC circuit model. *Astrophysical Journal*, 1991, Part 1, Vol. 378, pp. 239-254.
10. Haensel P., Potekhin A.Y., Yakovlev D.G. *Neutron Stars 1. Equation of State and Structure*. Springer, 2007.
11. Beskin V.S., Zheltoukhov A.A., Obukhova A.K., Stroinov E.E. To the origin of anomalous torque acting on a rotating magnetized ball in vacuum. *Bulletin of the Lebedev Physics Institute*, 2013. Vol. 40, Iss. 9, pp. 265-267.
12. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoreticheskaya fizika v 10 tt., Vol. 8. Elektrodinamika sploshnykh sred*. Moscow, Nauka, 1982, 620 p. (rus)
13. Yakovlev D.G., Shalybkov D.A. Electrical conductivity of neutron star cores in the presence of a magnetic field. Part Two. A free-particle model

of npe- matter. *Astrophysics and Space Science*, 1991, Vol. 176, Iss. 2, pp. 191-215.

14. **Geppert U., Rheinhardt M.** Non-linear magnetic field decay in neutron stars. Theory and observations. *Astronomy and Astrophysics*, 2002, Vol. 392, pp. 1015-1024.

15. **Braginskiy S.I.** *Yavleniya perenosa v plazme. "Voprosy teorii plazmy"*. Pod red. M.A. Leontovicha, 1963, Iss. 1, pp. 183-271. (rus)

16. **Landau L.D., Lifshits E.M.** *Teoreticheskaya fizika v 10 tt., Vol. 10. Fizicheskaya kinetika*. Moscow, Nauka, 1979, P. 65. (rus)

17. **Chugunov A.I., Yakovlev D.G.** Shear Viscosity and Oscillations of Neutron Star Crust. *Astronomy Reports*, 2005, Vol. 49, Iss. 9, pp. 724-738.

18. **Potekhin A.Y.** Electron conduction in magnetized neutron star envelopes. *Astronomy and Astrophysics*, 1999, Vol. 351, pp. 787-797.

19. **Beytmen G., Erdeyi A.** *Vysshie transtsendentnye funktsii: T.2 Funktsii Besselya, funktsii parabolicheskogo tsilindra, ortogonal'nye mnogochleny*. Moscow, Nauka, 1966, P. 85. (rus)

20. **Scharlemann E.T., Arons J., Fawley W.M.** Potential drops above pulsar polar caps – Ultrarelativistic particle acceleration along the curved magnetic field. *Astrophysical Journal*, 1978, Part 1, Vol. 222, pp. 297-316.

21. **Beskin V.S.** General relativity effects on electrodynamic processes in radio pulsars. *Soviet Astronomy Letters*, 1990, Vol. 16, No. 4/Jul. pp. 286-289.

22. **Muslimov A.G., Tsygan A.I.** General relativistic electric potential drops above pulsar polar caps. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*,

1992, Vol. 255, pp. 61-70.

23. **Harding A.K., Muslimov A.G.** Pulsar polar cap heating and surface thermal X-ray emission. I. Curvature radiation pair fronts. *The Astrophysical Journal*, 2001, Vol. 556, Iss. 2, pp. 987-1001.

24. **Timokhin A.N.** Force-free magnetosphere of an aligned rotator with differential rotation of open magnetic field lines. *Astrophysics and Space Science*, 2007, Vol. 308, Iss. 1 – 4, pp. 575-579.

25. **Qiao G.J., Lee K.J., Wang H.G., Xu R.X., Han J.L.** The inner annular gap for pulsar radiation: γ -ray and radio emission. *The Astrophysical Journal*, 2004, Vol. 606, Iss. 1, pp. L49-L52.

26. **Xu R.X., Cui X.H., Qiao G.J.** Current flows in pulsar magnetospheres. *Chinese Journal of Astronomy and Astrophysics*, 2006, Vol. 6, Issue 2, pp. 217-226.

27. **Lee K.J., Qiao G.J., Wang H.G., Xu R.X.** On the electrodynamic of counter stream in pulsar's inner annular cap region. *Advances in Space Research*, 2008, Vol. 41, Iss. 1, pp. 180-182.

28. **Shibata S.** Pulsar electrodynamic. "Pulsar Astronomy-2000 and Beyond" *ASP Conference Series*. Vol. 202. Proceedings of the 177th Colloquium of the IAU, Bonn, Germany, 30 August – 3 September 1999. Eds. by M. Kramer, N. Wex, and N. Wielebinski. 2000. Vol. 202, pp. 411-416.

29. **Yuki S., Shibata S.** A particle simulation for the pulsar magnetosphere: relationship of polar cap, slot gap, and outer gap. *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 2012, Vol. 64, No. 3, Article No. 43, pp. 9-19.

30. **Potekhin A.Y., Chabrier G.** Equation of state for magnetized Coulomb plasmas. *Astronomy & Astrophysics*, 2013, Vol. 550, id. A43, 16 p.

THE AUTHORS

TSYGAN Anatoly I.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences.
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia.
tsygan.astro@mail.ioffe.ru

SHALYBKOV Dmitry A.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences.
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia.
dasha@astro.ioffe.ru

BARSUKOV Dmitry P.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences.
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia.
bars.astro@mail.ioffe.ru

GOGLECHIDZE Oleg A.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences.
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia.
goglechidze@gmail.com

ФИЛЬТРАЦИЯ СИГНАЛОВ СО СКАЧКАМИ, ВОЗНИКАЮЩИМИ В ДИСКРЕТНОМ ВРЕМЕНИ И С КОНЕЧНЫМ ГОРИЗОНТОМ

Рассматривается задача фильтрации сигналов со скачками, происходящими в случайные моменты времени на фоне белого шума, в дискретном времени и с конечным горизонтом. Используются две модели сигнала — дискретные аналоги процесса диффузии со скачками.

ФИЛЬТРАЦИЯ СИГНАЛА, ДИФФУЗИЯ СО СКАЧКАМИ, МАРКОВСКАЯ ЦЕПЬ, УРАВНЕНИЯ БЕЛЛМАНА. ДИСКРЕТНОЕ ВРЕМЯ, КОНЕЧНЫЙ ГОРИЗОНТ.

Введение

Фильтрации сигналов посвящено множество публикаций, поскольку она имеет широкие технические приложения. Под сигналом обычно подразумевается случайный процесс X_t . При этом в большинстве работ указанный процесс задается уравнением диффузии:

$$dX_t = \alpha_t dt + \beta_t dW_t, \quad t \in [0, T], \quad X_0 = 0,$$

где W_t — стандартное броуновское движение; α_t, β_t — случайные коэффициенты (предсказуемые либо детерминированные), которые удовлетворяют условию Липшица по временной переменной t почти всюду.

Траектории данного процесса при этом будут непрерывными. Классические фильтры Винера и Калмана также описываются этим уравнением, если предположить, что его коэффициенты в первом случае — константы, а во втором — что они детерминированы [1]. В связи с диффузионными процессами фильтр Калмана распространен на самый общий случай [2].

В современных исследованиях значительное внимание уделяется процессам со скачками (процессы Леви, аддитивные и другие), и для ознакомления с состоянием вопроса следует обратить внимание на монографии [3, 4].

Для описания процесса со скачками целесообразно рассмотреть уравнение вида

$$dX_t = \alpha_t dt + \beta_t dW_t + \gamma_t dCP_t,$$

в котором CP_t — составной процесс Пуассона, не зависящий от W_t (т. е. от стандартного броуновского движения). При этом на любом конечном интервале $[0, T]$ число скачков данного процесса конечно. Скачки происходят в случайные моменты времени $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k$; приращения $\Delta\tau_i$ — это независимые и одинаково распределенные показательные случайные величины с интенсивностью λ , поэтому дифференциал составного процесса Пуассона выражается как

$$dCP_t = \begin{cases} 0, & t \neq \tau_i; \\ \xi_i, & t = \tau_i, \end{cases}$$

где ξ_i — независимые, одинаково распределенные случайные величины.

Фильтрация процессов со скачками упоминается также в монографии [5]. По аналогии с этим упоминанием рассмотрим дискретный аналог диффузии со скачками для равномерного разбиения интервала с шагом h :

$$\Delta X_j = \alpha_{j-1} h + \beta_{j-1} \Delta W_j + \gamma_{j-1} \sum_{l=1}^{P_{jh}^{(j)}} \xi_l^{(j)}, \quad (1)$$

где $P_{\lambda h}^{(j)}$ — последовательность независимых пуассоновских случайных величин с общей интенсивностью λh ; $\xi_i^{(j)}$ — последовательность всех прочих независимых случайных величин с общим законом распределения; приращение ΔW_j распределено по нормальному закону $N(0, h)$.

Для $\xi_i^{(j)} \in N(0, 1)$ уравнение (1) приобретает более простой вид:

$$\Delta X_j = \alpha_{j-1} h + (\beta_{j-1} \sqrt{h} + \gamma_{j-1} \sqrt{P_{\lambda h}^{(j)}}) M_j, \quad (2)$$

где M_j — независимые стандартные нормальные случайные величины.

Уравнение (2) является базовым для описания процессов, рассмотренных далее.

Под сигналом мы будем далее понимать случайный вектор $X = (X_i)_1^n$, и модели поведения сигнала будем описывать в конечномерном линейном пространстве R^n . С сигналом будем связывать естественный стохастический базис

$$(\Omega, (F_i)_0^T, F_n),$$

где $F_0 = \sigma\{\emptyset, \Omega\}$, $F_j = B\{R^j\}$.

При рассмотрении задачи фильтрации предполагается существование пары случайных векторов (Y, X) , стохастически связанных между собой; при этом Y — наблюдаемый вектор, а X — вектор, подлежащий вычислению.

Возможны две постановки задачи: априорная и апостериорная. В первом случае рассматривается семейство конечномерных условных законов распределения $\text{Law}(X^j / Y^j)$ и последовательность оценок \hat{X}^j вектора X^j по наблюдаемым векторам Y^j (верхний индекс обозначает проекцию соответствующего вектора на подпространство R^j). В качестве наилучшей считается, как правило, оценка, доставляющая минимум среднеквадратического отклонения $E(X^j - \hat{X}^j)^2$, при условии, что оценка $\hat{X}^j \in \sigma(Y^j)$. Известно, что наилучшая в среднеквадратическом смысле оценка — это условное математическое ожидание:

$$\hat{X}^j = E(X^j / Y^j). \quad (3)$$

При существовании условной плотности $f(x / Y^j)$, кроме условного математического ожидания, используется также

оценка максимального правдоподобия.

Далее под фильтрацией сигнала будем иметь в виду вычисление условного математического ожидания (3) либо максимальной правдоподобной оценки.

При апостериорной постановке задачи вектор Y доступен полностью и вычисляется одна апостериорная оценка сигнала, например

$$\hat{X} = E(X / Y).$$

Общая модель описания зашумленных процессов

Предположим, что в уравнении (2) коэффициенты являются константами и, не нарушая общности, будем считать, что $\alpha_j = 0$. Кроме того, будем считать, что интенсивность скачков или шаг разбиения настолько малы, что вероятностью $P(P_{\lambda h}^{(j)} \geq 2)$ можно пренебречь. Благодаря этим предположениям, уравнение (2) приобретает более компактный вид:

$$\Delta X_j = (\beta \sqrt{h} + \gamma \delta_j) M_j,$$

где $\delta_j \in \{0, 1\}$.

Со стороны вычислительной практики существенно различаются модели, где число скачков на интервале ограничено небольшим значением K и где число скачков произвольно. В связи с этим рассматриваются две модификации общей модели с локальными параметрами (σ_1, σ_2, D) , где σ_i — положительные константы, D — случайная диагональная матрица с положительными элементами, причем

$$d_i \in \{\sigma_2, \sigma_2 + d\} \quad (d > 0).$$

Если $d_i = \sigma_2$, то в i -й момент времени скачка нет; если же $d_i = \sigma_2 + d$, то в i -й момент времени скачок есть. В результате модель задается системой стохастических разностных уравнений:

$$Y = X + \sigma_1 N, \quad AX = DM; \quad (4)$$

при этом векторы N, M независимы и распределены по нормальному закону с нулевым математическим ожиданием и единичной ковариационной матрицей; A — матрица дискретного оператора дифференцирования.

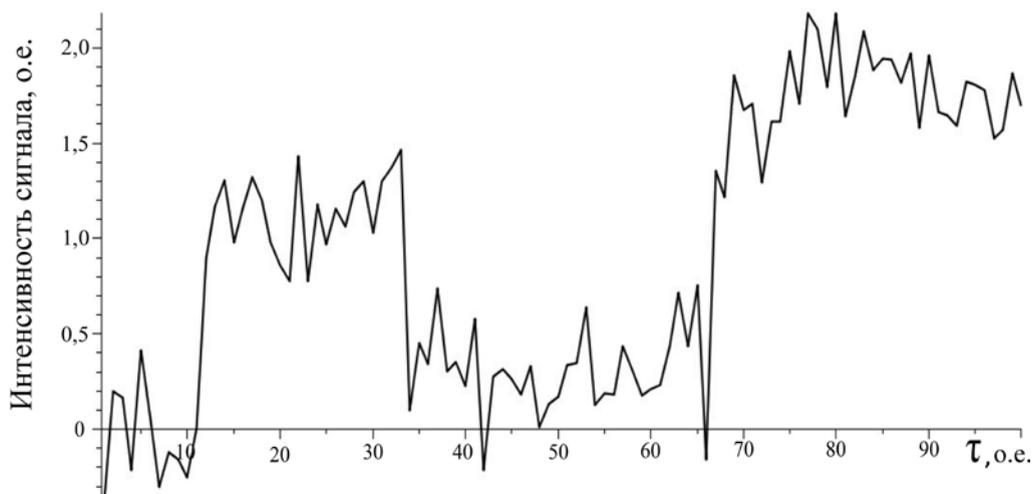


Рис. 1. Траектория сигнала со скачками в моменты времени $\tau_1 = 12$ о.е., $\tau_2 = 34$ о.е., $\tau_3 = 67$ о.е.; значения параметров: $\sigma_1 = 0,2$, $\sigma_2 = 0,1$, $d = 1,0$

На рис. 1 представлена траектория сигнала с тремя скачками в определенные моменты времени и соответствующие значения параметров σ и d .

Модель 1

В данной модели предполагается, что число скачков ограничено небольшим значением K . Вид случайной матрицы D полностью определяется поведением K -мерной случайной величины $l = (l_1, l_2, \dots, l_K)$, для которой $l_i \in \{0, 1, \dots, n\}$. Если $l_i = 0$, то $l_{i+1} = l_{i+2} = \dots = 0$; если $l_i \neq 0$, то $l_{i+1} = 0$ или $l_i < l_{i+1}$. Вычисление оценки связано с решением системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), имеющей матрицу, которая отличается от матрицы с известным сингулярным разложением на матрицу ранга K . Поскольку значение K не оказывает существенного влияния на приведенные далее вычислительные процедуры, мы остановимся на случае $K = 1$ (чтобы не загромождать статью выкладками).

Рассмотрим случайную величину $l \in \{0, 1, \dots, n\}$ с законом распределения $P(l = i) = p_i$. Равенство $l = 0$ означает, что все $d_i = \sigma_2$; $l = j \neq 0$ означает, что

$$d_i = \begin{cases} \sigma_2, & i \neq j; \\ \sigma_2 + d, & i = j. \end{cases}$$

Для модели 1 фильтрация рассматривается при двух априорных предположениях.

Предположение первое. Закон распределения случайной величины l известен. В этом случае формула (3) приобретает вид

$$\hat{X} = \sum_{l=0}^n E(X / Y, l) p_l. \quad (5)$$

Условный закон распределения $Law(X/Y, l)$ является нормальным, с математическим ожиданием

$$\hat{X}^l = \frac{1}{\sigma_1^2} \left(\frac{1}{\sigma_1^2} I + A^T D_l^{-2} A \right)^{-1} Y. \quad (6)$$

В результате оценка вектора X имеет вид

$$\hat{X} = \sum_{l=1}^n \hat{X}^l p_l. \quad (7)$$

Оценка (7) является линейной оценкой и вместе с удалением шума из сигнала сглаживает его резкие изменения, что не всегда оправдано, например, при выделении границ (edge detection). В отличие от (7), оценка

$$\hat{X} = \hat{X}^j, \quad (8)$$

где

$$j = \arg \min_l \left[\frac{(Y - \hat{X}^l)^2}{2\sigma_1^2} - \ln p_l \right]$$

относится к нелинейным оценкам.

Кроме того, оценка (8) позволяет получить ориентировочное значение момента разрядки случайного процесса, если под

разладкой понимать разрыв траектории.

Введем обозначения

$$H_l = \frac{1}{\sigma_1^2} I + A^T D_l^{-2} A.$$

Нетрудно установить связь между матрицами $H_l (l \neq 0)$ и матрицей H_0 ; эта связь выражается следующим образом:

$$H_l = H_0 + a_l a_l^T, \quad (9)$$

где a_l – вектор,

$$a_l = \frac{\sqrt{\sigma_2^2 + (\sigma_2 + d)^2}}{\sigma_2 d} A e_l$$

(e_l – l -й орт);

матрица $H_0 = \frac{1}{\sigma_1^2} I + \frac{1}{\sigma_2^2} A^T A.$

Равенство (8) позволяет выразить оценки \hat{X}_l через оценку \hat{X}_0 :

$$\hat{X}_l = \hat{X}_0 - \frac{(a_l, \hat{X}_0)}{1 + (H_0^{-1} a_l, a_l)} H_0^{-1} a_l. \quad (10)$$

Основная вычислительная трудность связана с обращением матрицы H_0 . В работе [6] представлено спектральное разложение матрицы

$$H_0 = F \Lambda F^T,$$

где

$$f_{i,j} = \sin\left(\frac{ij\pi}{n+1}\right) / \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\sin\left(\frac{ij\pi}{n+1}\right)\right)^2},$$

$$\lambda_j = \frac{1}{\sigma_1^2} + \frac{2}{\sigma_2^2} \left[1 - \cos\frac{j\pi}{n+1}\right].$$

Это разложение затем использовалось в работе [7]. Тогда обратная матрица имеет вид $H_0^{-1} = F \Lambda^{-1} F^T.$

Предположение второе. Данное априорное предположение заключается в том, что закон распределения случайной величины l неизвестен и подлежит оцениванию (так называемый эмпирический байесовский подход). Заметим, что указанный подход в связи с фильтрацией сигналов применялся также в работе [8]. Если для оценки использовать метод максимального правдоподобия, то она определяется в результате решения задачи минимизации:

$$\min_{Z \in L} \|Z\|, \quad (11)$$

где L – выпуклая оболочка, натянутая на векторы: $Y - \hat{X}_l.$

Оценка сигнала имеет вид

$$\hat{X} = Y - Z^*, \quad (12)$$

где Z^* – решение задачи (11).

Одновременно с этим находится априорное распределение случайной величины $l,$

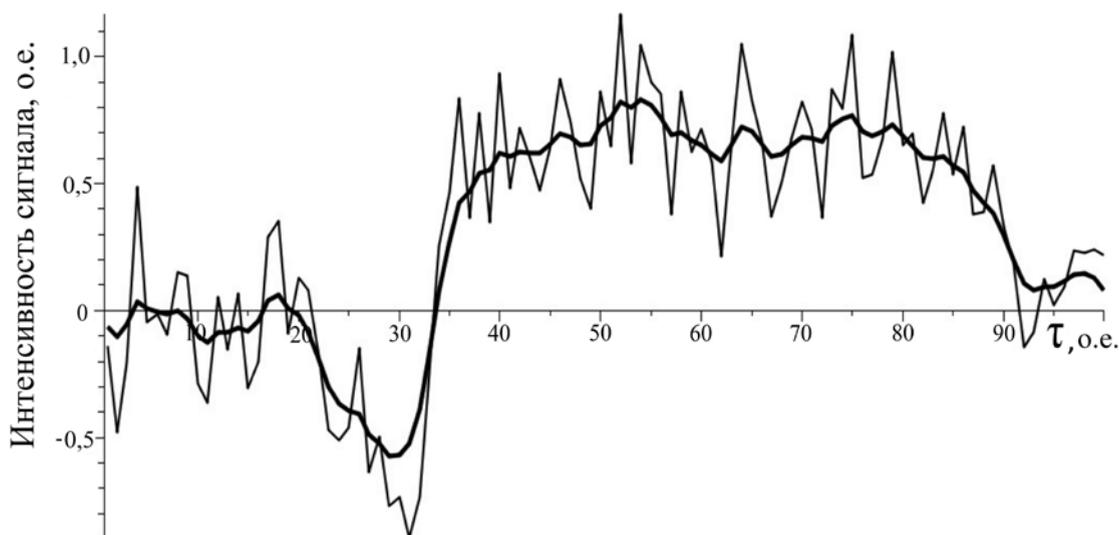


Рис. 2. Оценка сигнала, выраженного формулой (12); использован эмпирический байесовский подход

что позволяет решить задачу разладки случайного процесса. Задача (11) хорошо изучена [9], и для ее решения существуют эффективные алгоритмы.

На рис. 2 представлена оценка сигнала (12) по его зашумленной реализации.

Модель 2

Данная модель предполагает возможным произвольное число скачков. Рассмотрим последовательность бинарных случайных величин L_1, \dots, L_n . Диагональная матрица следует выражению

$$D(L) = \text{diag}(\sigma_2 + L_i d).$$

Условная оценка имеет вид

$$\hat{X}(L) = \frac{1}{\sigma_1^2} \left(\frac{1}{\sigma_1^2} I + A^T D(L)^{-2} A \right)^{-1} Y, \quad (13)$$

а оценка сигнала –

$$\hat{X} = E\hat{X}(L). \quad (14)$$

Далее будем считать, что L – однородная марковская последовательность с двумя состояниями и матрицей переходных вероятностей

$$Q = \begin{pmatrix} q & 1-q \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Единица во второй строке означает, что скачки не следуют один за другим. Это ограничение несущественно для вычисления оценки. Для вычисления по формуле (14) используем метод Монте-Карло:

$$\hat{X} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{X}(L^{(i)}), \quad (15)$$

где $L^{(i)}$ – сгенерированная марковская последовательность.

Этот метод фильтрации состоит из двух элементов: генерации бинарной однородной марковской последовательности и решения СЛАУ с трехдиагональной матрицей. Каждый из элементов не требует больших вычислительных затрат.

Как и в модели 1, рассмотрим оценку, которая получается в результате решения задачи:

$$\min_{X,L} \sum_{i=1}^n \left[\frac{(Y_i - X_i)^2}{2\sigma_1^2} + \frac{(X_i - X_{i-1})^2}{2(\sigma_2 + L_i d)^2} + \right.$$

$$\left. + \ln(\sigma_2 + L_i d) + L_i \ln \frac{1-q}{q} + L_i L_{i-1} \ln \frac{q}{1-q} + L_{i-1} \ln \frac{1}{q} \right], \quad (16)$$

причем $X_0 = L_0 = 0$. Решение задачи (16) может быть выполнено методом динамического программирования.

Уравнение Беллмана

Для вывода указанного уравнения, связанного с фильтрацией сигнала, рассмотрим последовательность функций:

$$\varphi_k(X_k, L_k) = \min_{X_{k+1}, \dots, X_n; L_{k+1}, \dots, L_n} \sum_{i=1}^n \left[\frac{(Y_i - X_i)^2}{2\sigma_1^2} + \frac{(X_i - X_{i-1})^2}{2(\sigma_2 + L_i d)^2} + \ln(\sigma_2 + L_i d) + L_i \ln \frac{1-q}{q} + L_i L_{i-1} \ln \frac{q}{1-q} + L_{i-1} \ln \frac{1}{q} \right].$$

Уравнение Беллмана имеет следующий вид:

$$\varphi_{k-1}(X_{k-1}, L_{k-1}) = \min_{X_k, L_k} \left[\frac{(Y_k - X_k)^2}{2\sigma_1^2} + \frac{(X_k - X_{k-1})^2}{2(\sigma_2 + L_k d)^2} + \ln(\sigma_2 + L_k d) + L_k \ln \frac{1-q}{q} + L_k L_{k-1} \ln \frac{q}{1-q} + L_{k-1} \ln \frac{1}{q} + \varphi_k(X_k, L_k) \right],$$

где $\hat{X}_k(X_{k-1}, L_{k-1}), \hat{L}_k(X_{k-1}, L_{k-1})$ – аргументы, на которых достигается минимум.

Краевое условие выражается как

$$\varphi_{n+1}(X_{n+1}, L_{n+1}) = 0.$$

Непосредственное решение уравнения Беллмана, связанное с вычислением последовательности функций, требует больших вычислительных затрат. Поэтому в качестве альтернативного метода рассмотрим спуск по обобщенным координатам (X, L) . Метод спуска – итерационный, на каждой итерации которого решаются две вспомогательные задачи:

$$\min_X F(X, L^{(l)}); \quad (17)$$

$$\min_L F(X^{(l+1)}, L), \quad (18)$$

где F – целевая функция в задаче (16).

Вектор $X^{(t+1)}$ вычисляется по формуле (13) с использованием вектора $L^{(t)}$. Вектор $L^{(t+1)}$ — решение задачи (18), которое находится методом динамического программирования. Последний применяется для оценки (16) при условии, что вектор X фиксирован, т. е. $X = X^{(t+1)}$. Итерации продолжаются до тех пор, пока не выполнится равенство $L^{(t+1)} = L^{(t)}$.

На рис. 3 представлен результат фильтрации, выполненной с помощью итерационного алгоритма.

Некоторым обоснованием алгоритма является следующее утверждение.

Утверждение. *Итерационный алгоритм останавливается за конечное число шагов.*

Действительно, по переменной X целевая функция является квадратичной, с положительно определенной матрицей, диагональ которой зависит от L . Отсюда следует, что на каждой итерации происходит уменьшение целевой функции. Поскольку множество значений переменной L — конечно, то алгоритм останавливается за конечное число шагов.

Двукритериальная оптимизационная задача фильтрации

В связи с описанием и использованием модели 2 рассмотрим еще один подход к фильтрации сигналов со скачками. Опре-

делим два критерия: критерий близости и критерий гладкости.

Критерий близости выразим в виде

$$F_1(X) = (Y - X)^2,$$

критерий гладкости —

$$F_2(X) = (A^T AX, X).$$

Таким образом, для получения оценки ненаблюдаемого вектора возникает двухкритериальная оптимизационная задача. Целесообразно применить метод обобщенных наименьших квадратов.

Математическое ожидание первого критерия

$$EF_1(X) = n\sigma_1^2,$$

а второго —

$$EF_2(X) = n\sigma_2^2 + (2\sigma_2 d + d^2) \times \\ \times (Q(I - Q^n)(I - Q)^{-1} e_1, e_2),$$

где $e_1 = (1, 0)$, $e_2 = (1, 0)$.

В результате для оценки необходимо найти

$$\min_X \left[\frac{(Y - X)^2}{n\sigma_1^2} + \frac{(A^T AX, X)}{\xi} \right], \\ \xi = n\sigma_2^2 + (2\sigma_2 d + d^2) \times \\ \times [Q(I - Q^n)(I - Q)^{-1} e_1, e_2],$$

что приводит к уравнению

$$(A^T A + \theta I)X = Y,$$

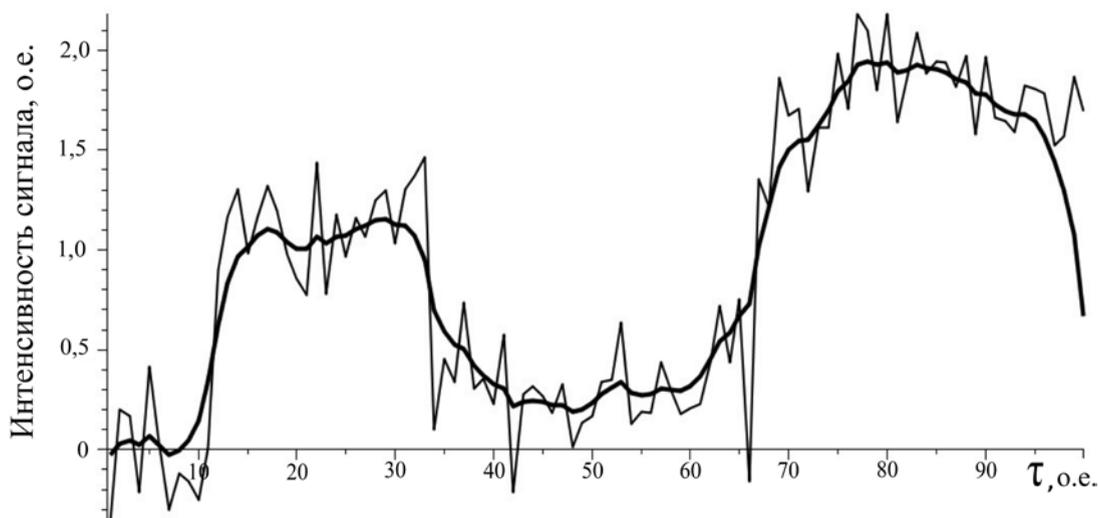


Рис. 3. Результат фильтрации сигнала. Оценка выполнена с помощью спуска по обобщенным координатам

где

$$\theta = n^{-1} \sigma_1^{-2} [n \sigma_2^2 + (2 \sigma_2 d + d^2) \times (Q(I - Q^n)(I - Q)^{-1} e_1, e_2)].$$

Оценка, которую можно при этом получить, является линейной. Нелинейная оценка получается, если использовать первый критерий в качестве ограничения и искать минимум по второму критерию:

$$\min(A^T A X, X), \quad (19)$$

при ограничении $(Y - X)^2 \leq a$.

В отличие от предыдущего случая, решение задачи (19) сводится к решению двух уравнений:

$$(A^T A + \theta I) X = Y; (Y - X)^2 = a. \quad (20)$$

Используем спектральное представление матрицы

$$A^T A + \theta I = U^T \Lambda(\theta) U.$$

Ортогональная матрица U — та же, что и выше, а диагональные элементы матрицы $\Lambda(\theta)$ выражаются как

$$\lambda_j(\theta) = \theta + 2 \left[1 - \cos \frac{j\pi}{n+1} \right].$$

В результате уравнения (20) преобразуются к следующему виду:

$$X = U^T \Lambda^{-1}(\theta) \bar{Y}; \sum_{j=1}^n \left(1 - \frac{1}{\lambda_j(\theta)} \right)^2 \bar{Y}_j^2 = a, \quad (21)$$

где $\bar{Y} = UY$.

Данная оценка является нелинейной. При варьировании величины a получаются как различные оценки $\hat{X}(a)$, так и различные значения критерия $F_2(\hat{X}(a))$. Параметр a можно связать с математическим ожиданием $EF_1(X)$, например, с помощью равенства $a = kn\sigma^2$. Константу k можно выбрать из условия $P((Y - X)^2 \leq a) \leq \eta$.

Заключение

Предлагаемые в статье модели, связанные со случайными изменениями дисперсии, позволяют адекватно описывать зашумленные процессы со скачками, а также использовать эффективные вычислительные методы для фильтрации сигнала как с ограниченным, так и с произвольным числом скачков. Для решения задачи фильтрации представлены три типа алгоритмов, использующих различные подходы: спектральные разложения, метод Монте-Карло и динамическое программирование.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 140100579.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Липцер Р.Ш., Ширяев А.Н. Статистика случайных процессов. М.: Наука, 1974. 696 с.
2. Липцер Р.Ш., Ширяев А.Н. Нелинейная фильтрация диффузионных марковских процессов. Исследования по математической статистике // Труды МИАН СССР. 1968. Т. 104. С. 135–180.
3. Applebaum D. Levy processes and stochastic calculus. Cambridge: Cambridge University Press, 2004. 384 p.
4. Bertoin J. Levy processes. Cambridge: Cambridge University Press, 1996. 266 p.
5. Oksendal B., Sulem A. Applied stochastic control of jump diffusion. New York: Springer Verlag, 2004. 208 p.
6. Беллман Р., Энджел Э. Динамическое программирование и уравнения в частных производных. М.: Мир, 1974. 204 с.
7. Мисюра И.В. Один метод фильтрации случайного сигнала // Обзорение прикладной и промышленной математики. 2010. Т. 17. Вып. 6. С. 911–912.
8. Белицер Э., Еникеева Ф.Н. Адаптивная фильтрация случайного сигнала в гауссовском белом шуме // Проблемы передачи информации. 2008. Т. 44. Вып. 4. С. 39–51.
9. Демьянов В.Ф., Малоземов В.Ф. Введение в минимакс. М.: Наука, 1972. 368 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БЕЛЯВСКИЙ Григорий Исаакович — кандидат физико-математических наук, профессор кафедры высшей математики и исследования операций Южного федерального университета.

344090, Россия, г. Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова, 8а.
beliavsky@hotmail.com

МИСЮРА Илья Владимирович – аспирант кафедры высшей математики и исследования операций Южного федерального университета.

344090, Россия, г. Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова, 8а.

ilya.misyura@gmail.com

Beliavsky G.I., Misyura I.V. SIGNAL FILTERING WITH JUMPS DURING DISCRETE TIME AND UNDER FINITE HORIZON.

The problem of filtering signals with jumps occurring at random times on a background of white noise in discrete time and with finite horizon has been considered. Two signal models being discrete analogs of diffusion with jumps were developed.

SIGNAL FILTERING, JUMP DIFFUSION, MARKOV CHAIN, BELLMAN EQUATIONS, DISCRETE TIME, FINITE HORIZON.

REFERENCES

1. **Liptser R.Sh., Shiryaev A.N.** *Statistika sluchaynykh protsessov*. Moscow: Nauka, 1974, 696 p. (rus)
2. **Liptser R.Sh., Shiryaev A.N.** *Nelineynaya fil'tratsiya diffuzionnykh markovskikh protsessov. Issledovaniya po matematicheskoy statistike*. Trudy MIAN SSSR, 1968, Vol. 104, pp. 135-180. (rus)
3. **Applebaum D.** *Levy processes and stochastic calculus*. Cambridge: Cambridge University Press, 2004, 384 p.
4. **Bertoin J.** *Levy processes*. Cambridge: Cambridge University Press, 1996, 266 p.
5. **Oksendal B., Sulem A.** *Applied stochastic control of jump diffusion*. New York: Springer Verlag, 2004, 208 p.
6. **Bellman R., Endzhel E.** *Dinamicheskoe programmirovaniye i uravneniya v chastnykh proizvodnykh*. Moscow: Mir, 1974, 204 p. (rus)
7. **Misyura I.V.** *Odin metod fil'tratsii sluchaynogo signala. Obozrenie prikladnoy i promyshlennoy matematiki*, 2010, Vol. 17, Iss. 6, pp. 911-912. (rus)
8. **Belitser E., Enikeeva F.N.** *Adaptivnaya fil'tratsiya sluchaynogo signala v gaussovskom belom shume. Problemy peredachi informatsii*, 2008, Vol. 44, Iss. 4, pp. 39-51. (rus)
9. **Dem'yanov V.F., Malozemov V.F.** *Vvedenie v minimaks*. Moscow: Nauka, 1972, 368 p. (rus)

THE AUTHORS

MISYURA Il'ya V.

Southern Federal University

8a Milchakova St., Rostov-on-Don, 344090, Russia

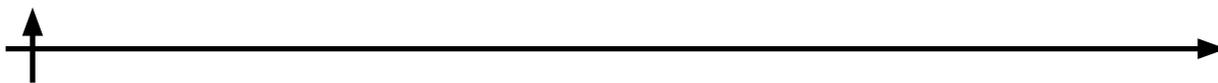
ilya.misyura@gmail.com

BELYAVSKIY Grigoriy I.

Southern Federal University

8a Milchakova St., Rostov-on-Don, 344090, Russia

beliavsky@hotmail.com



АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Алексеева О.А.	30	Петриченко М.Р.	94
Бакаев А.В.	37, 46	Петров В.М.	62
Барсуков Д.П.	120	Погода А.П.	62
Белявский Г.И.	137	Поправский Р.	30
Воробьев С.И.	69	Семенов А.С.	15
Гогличидзе О.А.	120	Семенов С.Н.	69
Дудкин В.И.	69	Серегин М.С.	9
Журкин Е.Е.	37, 46	Симакова М.Н.	75
Иголкин С.И.	54	Сысоева А.А.	9
Качалов В.И.	103	Тихомиров В.В.	110
Мелькер А.И.	54	Хохлюк В.И.	86
Мирошников К.А.	75	Цыган А.И.	120
Мисюра И.В.	137	Шаганов А.П.	9
Набережнов А.А.	9, 30	Шалыбков Д.А.	120

Научное издание

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
№ 2 (194) 2014

Учредитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В.К. Иванов* – председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А.Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии
канд. физ.-мат. наук, доцент *В.М. Капралова* – ответственный секретарь
канд. физ.-мат. наук *О.А. Ящуржинская* – научный редактор, корректор
А.С. Колгатина – технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *А.Н. Смирнова*

Директор Издательства Политехнического университета *А.В. Иванов*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 20.06.2014. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 18,09. Уч.-изд. л. 18,09. Тираж 1000. Заказ

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
Издательство Политехнического университета
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 г. выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ» (ISSN 1994-2354). Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», издается под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами **ISSN 1994-2354, (сериальный) ISSN 2304-9782**. С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика, Астрономия**. Научные направления журнала учитываются ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базе данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word 2007 – 2010, формул – в редакторе MS Equation или MathType. Таблицы набираются в том же формате, что и основной текст.

Шрифт – Times New Roman, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (<http://journals.spbstu.ru>). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться ДОСРОЧНО.

**Более подробную информацию можно получить по телефону редакции:
(812) 294-22-85 с 10.00 до 18.00 – Александра Сергеевна
или по e-mail: physics@spbstu.ru**