

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Черкаський національний університет
імені Богдана Хмельницького

ISSN 2076-5851

ВІСНИК ЧЕРКАСЬКОГО університету

Серія
ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

Виходить 1 раз на рік
Заснований у березні 1997 року

№ 1. 2017

Черкаси – 2017

**Засновник, редакція, видавець і виготовлювач –
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького
Свідоцтво про державну реєстрацію КВ № 16161-4633ПР від 11.12.2009 р.**

Наукові статті збірника рекомендовані фізикам, математикам - науковцям, викладачам вищої школи, аспірантам, студентам та пошукачам.

Журнал входить до переліку наукових фахових видань України з фізико-математичних наук (Наказ МОН України від 12 травня 2015 р. № 528).

ISSN: 2076-5851

Випуск № 1. 2017 наукового журналу Вісник Черкаського університету, серія: фізико-математичні науки рекомендовано до друку та до поширення через мережу Інтернет Вченою радою Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (протокол № 3 від 14.12.2017 року).

Журнал входить в реферативну базу даних “Україніка наукова”, реферується Українським реферативним журналом "Джерело" (засновники: Інститут проблем реєстрації інформації НАН України та Національна бібліотека України імені В. І. Вернадського, irbis-nbuv.gov.ua), Scholar Google (Вісник Черкаського університету. Серія фізико-математичні науки, scholar.google.com),

Головна редакційна колегія:

Черевко О.В., д.е.н. (головний редактор), проф.; Боєчко Ф.Ф., член-кор. НАПН України, д.б.н., проф. (заступник головного редактора); Корновенко С.В., д.і.н., проф. (заступник головного редактора); Кирилюк Є.М., д.е.н., проф. (відповідальний секретар); Архипова С.П., к.пед.н., проф.; Біда О.А. д.пед.н., проф.; Гнезділова К.М., д.пед.н., проф.; Головня Б.П., д.т.н., доц.; Гусак А.М., д.ф.-м.н., проф.; Десятов Т.М., д.пед.н., проф.; Земзюліна Н.І., д.і.н., проф.; Жаботинська С.А., д.філол.н., проф.; Кузьмінський А.І., член-кор. НАПН України, д.пед.н., проф.; Кукурудза І.І., д.е.н., проф.; Лизогуб В.С., д.б.н., проф.; Ляшенко Ю.О., д.ф.-м.н., доц.; Марченко О.В., д.філос.н., проф.; Масненко В.В., д.і.н., проф.; Мінаєв Б.П., д.х.н., проф.; Морозов А.Г., д.і.н., проф.; Перехрест О.Г., д.і.н., проф.; Поліщук В.Т., д.філол.н., проф.; Селіванова О.О., д.філол.н., проф.; Чабан А.Ю., д.і.н., проф.; Шпак В.П., д.пед.н., проф.

Редакційна колегія серії:

Ляшенко Ю.О., д.ф.-м.н., доц. (відповідальний редактор); Сторожук Н.В., к.ф.-м.н. (відповідальний секретар); Гусак А.М., д.ф.-м.н., проф.; Запорожець Т.В., д.ф.-м.н., доц.; Danielewski Marek, Professor (Poland); Filipek Robert, Professor (Poland); Hoda Fiqiri, Professor (France); Khina Boris B., Professor (Belarus); Kodentsov Alexandre, Dr. (Netherlands); Kozubski Rafal, Professor, DSc, (Poland); Leszczyński Henryk, Professor, Dr Hab. (Poland); Ugaste Ulo, Professor (Estonia); Головня Б.П., д.т.н., доц.; Мазанко В.Ф., д.т.н., проф.; Мінаєв Б.П., д.х.н., проф.; Парицька Л.Н., д.ф.-м.н., проф.; доц.; Соловйов В.М., д.ф.-м.н., проф.; Стеблянюк П.О., д.ф.-м.н., проф.; Шматко О.А., д.т.н., проф.; Буряченко К.О., к.ф.-м.н. доц.; Гладка Л.І., к.ф.-м.н., доц.; Корнієнко С.В., к.ф.-м.н., доц.; Пасічний М.О., к.ф.-м.н., Атамась В.В., к.ф.-м.н., доц.

Адреса редакційної колегії:

18000, Черкаси, бульвар Шевченка, 79,
Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького,
кафедра фізики. Тел. (0472) 32-12-20
web-сайт: <http://phys-ejournal.cdu.edu.ua>
e-mail: phys_math_bulletin@ukr.net

© Черкаський національний
університет, 2017

К.П. ГУРОВ - ПЕРСОНАЛІЯ ДО 100 РІЧЧЯ

6 березня 2018 року виповнюється 100 років з дня народження Кирила Петровича Гурова – видатного радянського фізика-теоретика в галузі фізичної кінетики та дифузії в матеріалах. Його учні та учні його учнів зараз складають основу наукового потенціалу кафедри фізики Черкаського університету, працюють також і на кафедрах автоматизації та комп'ютерно-інтегрованих технологій, прикладної математики, інтелектуальних систем прийняття рішень. Тому цілком природньо відзначити сторіччя К.П.Гурова у серії «Фізико-математичні науки» Вісника ЧУ.



Кирило Петрович Гуров (1918-1994) народився в сім'ї кадрового офіцера. У 13 років важко захворів, після чого повністю втратив слух. Незважаючи на це, успішно закінчив школу і в 1936 році поступив до фізико-математичного факультету Московського університету, вчився там по індивідуальній програмі і закінчив МДУ з відзнакою 23 червня 1941 року. (І це незважаючи на те, що в 1937 році його батько був репресований.) 23 червня того трагічного року всім було не до розподілу випускників. Кирило Гуров, незважаючи на глухоту, був направлений працювати на оборонний завод у Куйбишеві. Працював шліфувальником, перевищував норму. Я особисто бачив статтю часів війни про Кирила Гурова як передовика виробництва.

В 1944 році Кирило Петрович вернувся в Москву і поступив в аспірантуру до одного з найбільш видатних радянських фізиків і математиків (власне, за походженням і освітою українського вченого) Миколи Миколайовича Боголюбова, який тоді працював одночасно в Москві і Києві. Результатом їх роботи стала спільна стаття «Кинетические уравнения в квантовой механике» (ЖЭТФ, том 17, стор.614 (1947), яка зробила авторів всесвітньо відомими. На основі згаданих результатів Кирило Петрович успішно захистив кандидатську дисертацію. Пізніше розвиток цих ідей і результатів, методу Боголюбова-Гурова був викладений у відомій монографії «Основания кинетической теории» (видавництво Наука, 1966), яка стала класичною. Однак подальша його кар'єра на тривалий час була зупинена – йому пригадали батька-«ворога народу», так що знайти роботу у науково-дослідному інституті чи університеті виявилось неможливо. До 1954 року він працював технічним редактором у науковому видавництві (шукав і виправляв помилки у формулах і текстах). У 1954 році, після смерті Сталіна, його таки «физикнули» взяти на дослідницьку роботу в Інститут металургії АН СРСР, в якому він і пропрацював 40 років до кінця життя. Він приніс свій підхід, свої теоретичні методи, своє фундаментальне розуміння кінетики та ієрархії кінетичних процесів у фізику матеріалів (захистивши докторську дисертацію в 1968 році). Зокрема, важливу роль у розвитку теорії взаємної дифузії в металевих сплавах зіграв його «метод діркового газу».

Ось список монографій, які були написані К.П.Гуровим або під його керівництвом:

Гуров К. П. Основания кинетической теории. Метод НН Боголюбова. – Наука, 1966.

Боровский И. Б., Гуров К. П., Марчукова И.Д., Угасте Ю. Э. Процессы взаимной диффузии в сплавах. – Наука, 1973.

Гуров К. П. Феноменологическая термодинамика необратимых процессов. – Наука, 1978.

Плавление, кристаллизация и фазообразование в невесомости. Наука, 1979 (у співавторстві)

Гуров К. П., Карташкин Б. А., Угасте Ю. Э. Взаимная диффузия в многофазных металлических системах. – Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1981.

Автор цього матеріалу познайомився з Кирилом Петровичем в 1978 році, коли той був уже визнаним авторитетом у теорії дифузійних процесів. Знайомство з ним перевернуло моє життя, але про це колись буде написано окремо. Зустрічі і спілкування з Кирилом (так його називали і друзі, і учні) були для мене як ковток свіжого повітря. Для спілкування з ним всі ми повинні були вивчити мову жестів. При цьому Кирило читав по губам і взагалі закінчував фрази за співрозмовника. При такому спілкуванні будь-яка фальш автоматично відфільтровується. Говориться лише справді важливе і щире. Він не повчав, а підказував, у якому напрямі варто шукати. Щирість, простота і доброта Кирила вражали. Його любили всі – від прибиральниць до академіків.

Разом із Кирилом Петровичем, мною і черкаською науковою командою були розвинуті теорія дифузійної конкуренції фаз, теорія зародкоутворення в полі градієнта концентрації, теорія взаємної і реакційної дифузії при обмеженій ефективності джерел і стоків вакансій, теорії впливу струму на кінетику реакційної дифузії. Ідеї Кирила Петровича уже після його смерті стали вихідними при створенні теорій біфуркацій кіркендалових площин, індукованої потоками коалесценції при взаємній дифузії, теорії утворення і колапсу порожнистих наноструктур, теорії індукованої потоками нуклеації, теорії твердофазних реакцій через точковий контакт.

Всі ми живі своїми продовженнями. Продовження Кирила Гурова не затухають, а множаться з кожним роком. Будемо пам'ятати!

А.М.Гусак,
професор кафедри фізики ЧНУ

K.P. GUROV - PERSONALIA

On March 6, 2018 we celebrate the 100th anniversary of the birth of Cyril (in Russian - Kirill) Petrovich Gurov, the prominent Soviet physicist - specialist in the field of physical kinetics and diffusion in materials. His students and students of his students now form the basis of the research potential of the Department of Physics at the Cherkasy National University, they also work at the departments of automation and computer-integrated technologies, applied mathematics, intellectual decision-making systems. It is therefore quite natural to mark the centenary of professor Gurov in the series "Physics and Mathematics" edited at Cherkasy University.

Cyril Gurov (1918-1994) was born in a family of a Russian officer who was later repressed in 1937. At age 13 Cyrill fell seriously ill, after this he became completely deaf. Despite this, he successfully graduated from the school and in 1936 entered the Faculty of Physics and Mathematics of Moscow University. Cyrill graduated from Moscow State University with honors on June 23, 1941. (All this despite the fact that his father was repressed.) On June 23 of that tragic year the distribution of graduates was not the central problem. Cyril Gurov, despite deafness, was directed to work at a defense plant in Kuibyshev (now Samara). He worked as a grinder, and he systematically exceeded the production rate. I personally saw the article of the war times about Cyril Gurov as a leader in production.

In 1944, Cyril returned to Moscow and entered postgraduate study under supervision of the world-known Soviet physicist and mathematician (in fact, Ukrainian scientist, according to his origin and education) M.M. Bogolyubov, who then worked simultaneously in Moscow and Kiev. The result of their work was the joint paper "Kinetic equations in quantum mechanics" (ZhETF, volume 17, p.614 (1947), which made the authors world-famous. On the basis of the above-mentioned results, Gurov successfully defended his Ph.D., and later the development of these ideas and results, Bogolyubov-Gurov's method was described in the well-known monograph "Foundations of the kinetic theory" (Nauka Publishing House, 1966), which became classical. However, his further career for a long time was stopped – "thanks to" his father - "enemy of the people". He could not manage to find a research position till 1954, he worked as a technical editor in a scientific publishing house (he was looking for and correcting mistakes in formulas and texts). In 1954, after Stalin's death, he was offered the research position at the Institute of Metallurgy (Soviet Academy of Sciences) where he worked 40 years till the end of his life. He introduced his approach, his theoretical methods, his fundamental understanding of the kinetics and the hierarchy of kinetic processes in the physics of materials (he defended his doctoral dissertation in 1968), In particular, he played an important role in the development of the theory of mutual diffusion in metal alloys "the method of the hole gas". Here is a list of monographs written by prof. Gurov or/and under his guidance:

Gurov K. P. The foundations of kinetic theory. Method of NN Bogolyubov. - Science, 1966.



Borovskii I. B., Gurov K. P., Marchukova I. D., Ugaste Yu. E. Processes of mutual diffusion in alloys. - Science, 1973.

Gurov KP Phenomenological thermodynamics of irreversible processes – Nauka Publ., 1978.

Melting, crystallization and phase formation under zero gravity. – Ed. K.P.Gurov - Nauka Publ, 1979 (co-authored)

Gurov K. P., Kartashkin B. A., Ugaste Yu. E. Mutual diffusion in multiphase metallic systems - Nauka Publ., 1981

The author of this material got acquainted with Gurov in 1978, when he was already recognized state-of-art expert in the theory of diffusion processes. Getting acquainted with him turned my life over, but this aspect will be described elsewhere. Meetings and communication with Kirill (friends, colleagues and students used to call him in such a way) were for me like a sip of fresh air. To communicate with him all we had to learn the language of the gestures. At the same time, Cyril read on our lips and generally used to finish phrases for the interlocutor. With such communication any falsehood is automatically filtered out. Only truly important and sincere could be said. He did not teach, but just hinted in which direction we could look in our research. The sincerity, simplicity and kindness of Cyril impressed everybody. He was loved by everyone - from cleaners to academics.

Professor Gurov, me and our Cherkassy research team jointly developed the theory of diffusion competition of phases, the theory of nucleation in the gradient concentration field, the theory of inter- and reactive diffusion with limited efficiency of sources and drains of vacancies, the theory of the influence of electromigration on the kinetics of reaction diffusion. The ideas of professor Gurov, after his death, were in the origin of the theories of bifurcation of the cortical plane, induced by coalescence flows with mutual diffusion, the theory of formation and collapse of hollow nanostructures, the theory of flux-induced nucleation, and the theory of the point-contact solid-state reactions.

We all live in our continuations. The continuations of Cyril Gurov do not fade, but grow and spread with each passing year. Let's remember!

A.M. Gusak,
Professor of the Department of Physics, ChNU

ФІЗИКА МАТЕРІАЛІВ

УДК 517.9+531.19+530.145

PACS 05.20.Dd; 05.90.+m; 87.10.-e; 02.30.Jr;
02.50.Ey; 87.23.Ge; 87.17.-d

V.I. Gerasimenko

ON PROPAGATION OF INITIAL CORRELATIONS IN ACTIVE SOFT
MATTER

For collisional dynamics modeling the collective behavior of complex systems of mathematical biology, the process of propagation of initial correlations is described. The developed approach is based on the construction of a mean field limit for a solution of the Cauchy problem of the nonlinear BBGKY hierarchy for marginal correlation functions.

Key words: kinetic equation, correlation function, scaling limit, active soft matter.

1. Introduction

As well known a main consistent approach to the problem of the derivation of kinetic equations from underlying large particle dynamics was formulated by M.M. Bogolyubov [1] (see also [2]). The rigorous derivation of kinetic equations for many-particle systems in condensed states is an open problem so far [3, 4].

In modern researches, the main approach to the problem of the rigorous derivation of kinetic equations consists in the construction of scaling asymptotics of a solution of evolution equations which describe the evolution of states of large particle systems, for example, a mean field limit of a solution of the BBGKY (Bogolyubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon) hierarchy constructed by methods of the perturbation theory [3, 4].

It should be noted modern wide applications of kinetic equations to the description of collective processes of various nature, in particular, the collective behavior of complex systems of biology. We emphasize that the considerable advance in modeling of the kinetic evolution of systems of mathematical biology with a large number of constituents (entities), for example, systems of large number of cells, is recently observed [5–11] (see also references cited therein).

In this paper we consider the problem of a rigorous description of the evolution of states within the framework of marginal correlation functions governed by the nonlinear BBGKY hierarchy for a large system of interacting stochastic processes of collisional kinetic theory [12], modeling the microscopic evolution of active soft condensed matter [6, 7]. The developed approach to the derivation of kinetic equations is based on the construction of a mean field limit of a nonperturbative solution of the Cauchy problem of the nonlinear BBGKY hierarchy. One of the advantages of a such approach is the opportunity to describe the processes of propagation of initial correlations in scaling limits, in particular, that can characterize the condensed states of soft matter.

2. On collisional dynamics of active soft condensed matter

The many-constituent systems of active soft condensed matter [6, 7] are dynamical systems displaying a collective behavior which differs from the statistical behavior of usual

many-particle systems [4]. To specify such nature of constituents (entities) we consider dynamical system suggested in papers [5, 12] which is based on the Markov jump processes that must represent the intrinsic properties of living creatures (self-propelled particles).

We consider a system of entities of various M subpopulations introduced in paper [12] in case of non-fixed, i.e. arbitrary, but finite average number of entities. Every i -th entity is characterized by: $\mathbf{u}_i = (j_i, u_i) \in \mathcal{J} \times \mathcal{U}$, where $j_i \in \mathcal{J} \equiv (1, \dots, M)$ is a number of its subpopulation, and values $u_i \in \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^d$ is its microscopic characteristics.

The stochastic dynamics of n entities of various subpopulations is described by the semi-group $e^{t\Lambda_n^*}$ of the Markov jump processes defined on the space L_n^1 of the integrable functions $f_n(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n)$ defined on $(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n$, that are symmetric with respect to permutations of the arguments $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$, and equipped with the norm:

$$\|f_n\|_{L_n^1} = \sum_{j_1 \in \mathcal{J}} \dots \sum_{j_n \in \mathcal{J}} \int_{\mathcal{U}^n} du_1 \dots du_n |f_n(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n)|.$$

The infinitesimal generator Λ_n^* of this semigroup (the generator of the Kolmogorov backward equation for states of n entities) is defined on the space L_n^1 and it has the following structure [12]:

$$\begin{aligned} (\Lambda_n^* f_n)(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) &= \sum_{m=1}^M \varepsilon^{m-1} \sum_{i_1 \neq \dots \neq i_m=1}^n \left(\Lambda^{*[m]}(i_1, \dots, i_m) f_n \right)(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) \doteq \\ &\sum_{m=1}^M \varepsilon^{m-1} \sum_{i_1 \neq \dots \neq i_m=1}^n \int_{\mathcal{J} \times \mathcal{U}} A^{[m]}(\mathbf{u}_{i_1}; \mathbf{v}, \mathbf{u}_{i_2}, \dots, \mathbf{u}_{i_m}) a^{[m]}(\mathbf{v}, \mathbf{u}_{i_2}, \dots, \mathbf{u}_{i_m}) \\ &f_n(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{i_1-1}, \mathbf{v}, \mathbf{u}_{i_1+1}, \dots, \mathbf{u}_n) d\mathbf{v} - a^{[m]}(\mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_m}) f_n(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n), \end{aligned} \quad (1)$$

where $\varepsilon > 0$ is a scaling parameter [13], the functions $a^{[m]}(\mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_m})$, $m \geq 1$, characterize the interaction between entities, in particular, in case of $m=1$ it is the interaction of entities with an external environment. These functions are measurable positive bounded functions on $(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n$ such that: $0 \leq a^{[m]}(\mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_m}) \leq a_*^{[m]}$, where $a_*^{[m]}$ is some constant. The functions $A^{[m]}(\mathbf{v}; \mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_m})$, $m \geq 1$, are measurable positive integrable functions which describe the probability of the transition of the i_1 entity in the microscopic state u_{i_1} to the state v as a result of the interaction with entities in the states $u_{i_2}, \dots, u_{i_m}$ (in case of $m=1$ it is the interaction with an external environment). The functions $A^{[m]}(\mathbf{v}; \mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_m})$, $m \geq 1$, satisfy the conditions: $\int_{\mathcal{J} \times \mathcal{U}} A^{[m]}(\mathbf{v}; \mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_m}) d\mathbf{v} = 1$, $m \geq 1$. We refer to paper [12], where examples of the functions $a^{[m]}$ and $A^{[m]}$ are given in the context of biological systems.

In case of $M=1$ generator (1) has the form $\sum_{i_1=1}^n \Lambda_n^{[1]}(i_1)$ and it describes the free stochastic evolution of entities, i.e. the evolution of self-propelled particles. The case of $M=m \geq 2$ corresponds to a system with the m -body interaction of entities in the sense accepted in kinetic theory [4]. The m -body interaction of entities is the distinctive property of biological systems in comparison with many-particle systems, for example, gases of atoms with a pair interaction potential.

On the space L_n^1 the one-parameter mapping $e^{t\Lambda_n^*}$ is a bounded strong continuous semigroup of operators.

Further we restrict ourself by the case of $M=2$ subpopulations to simplify the cumbersome formulas.

3. Dynamics of correlations

The evolution of all possible states of a system of non-fixed number of the Markov jump processes within the framework of dynamics of correlations [14], [15] is described by means of the sequence $g(t) = (1, g_1(t, \mathbf{u}_1), \dots, g_n(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n), \dots)$ of correlation functions governed by the following Liouville hierarchy (hierarchy of the Kolmogorov backward equations) [15], [16]:

$$\frac{\partial}{\partial t} g_n(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) = (\Lambda_n^* g_n(t))(u_1, \dots, u_n) + \varepsilon \sum_{P: (1, \dots, n) = X_1 \cup X_2} \sum_{i_1 \in X_1} \sum_{i_2 \in X_2} \Lambda^{*[2]}(i_1, i_2) g_{|X_1|}(t, \mathbf{u}_{i_1}) g_{|X_2|}(t, \mathbf{u}_{i_2}), \quad n \geq 1, \quad (2)$$

where $\sum_{P: (1, \dots, n) = X_1 \cup X_2}$ is the sum over all possible partitions P of the set of indexes $(1, \dots, n)$ into two nonempty mutually disjoint subsets X_1, X_2 and the arguments $\mathbf{u}_i$ of the function $g_{|X_i|}$ correspond to indexes from the set X_i .

For initial states $g(0) = (g_0, g_1^{0, \varepsilon}, \dots, g_n^{0, \varepsilon}, \dots)$ from the space $L^1 = \bigoplus_{n=0}^{\infty} L_n^1$ a nonperturbative solution of the Cauchy problem of hierarchy (2) is represented as follows:

$$g(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) = \mathcal{G}(t; 1, \dots, n | g(0)), \quad n \geq 1, \quad (3)$$

where on the space L^1 the nonlinear one-parameter mapping $\mathcal{G}(t | \bullet)$ is defined by the expansion [15]

$$\mathcal{G}(t; 1, \dots, n | f) \doteq \sum_{P: (1, \dots, n) = \bigcup_j X_j} \mathfrak{A}_{|P|}(t, \{X_1\}, \dots, \{X_{|P|}\}) \prod_{X_j \subset P} f_{|X_j|}(\mathbf{u}_j), \quad n \geq 1, \quad (4)$$

in which the generating operator is the $|P|$ th-order cumulant of groups of operators $e^{t\Lambda_n^*}$, $n \geq 1$,

$$\mathfrak{A}_{|P|}(t, \{X_1\}, \dots, \{X_{|P|}\}) \doteq \sum_{P: (\{X_1\}, \dots, \{X_{|P|}\}) = \bigcup_k Z_k} (-1)^{|P|-1} (|P|-1)! \prod_{Z_k \subset P} e^{t\Lambda_{\theta(Z_k)}^*}, \quad (5)$$

the symbol $\sum_{P: (1, \dots, n) = \bigcup_j X_j}$ means the sum over all possible partitions P of the set $(1, \dots, n)$ into $|P|$ nonempty mutually disjoint subsets X_j , the set $(\{X_1\}, \dots, \{X_{|P|}\})$ consists from elements of which are subsets $X_j \subset (1, \dots, s)$ and the declusterization mapping θ is defined by the equality: $\theta(\{X_1\}, \dots, \{X_{|P|}\}) \doteq (1, \dots, n)$.

The evolution of states of large particle systems can be also described within the framework of marginal (s -particle) correlation functions governed by the fundamental evolution equations known as the nonlinear BBGKY hierarchy [16, 17]. We note that macroscopic characteristics of fluctuations of mean values of observables are determined by means of marginal correlation functions [1].

The marginal correlation functions are defined within the framework of solution (3) of the Cauchy problem of hierarchy (2) by the following series expansions:

$$G_s(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s) \doteq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n} d\mathbf{u}_{s+1} \dots d\mathbf{u}_{s+n} \mathcal{G}(t; 1, \dots, s+n | g(0)), \quad s \geq 1. \quad (6)$$

According to the estimate:

$$\|\mathcal{G}(t; 1, \dots, s | f)\|_{L^1_s} \leq s! e^{2s} c^s,$$

where $c \equiv e^3 \max(1, \max_{P: (1, \dots, s) = \bigcup_i X_i} \|f_{|X_i}\|_{L^1_{|X_i|}})$, series (6) exists and the following estimate holds: $\|G_s(t)\|_{L^1_s} \leq s! (2e^2)^s c^s \sum_{n=0}^{\infty} (2e^2)^n c^n$.

Then, according to definition (6), the evolution of all possible states of a system of non-fixed number of stochastic processes defined above can be described by means of the sequence $G(t) = (1, G_1(t), G_2(t), \dots, G_s(t), \dots) \in L^1 = \bigoplus_{n=0}^{\infty} L^1_n$ of marginal correlation functions governed by the Cauchy problem of the nonlinear BBGKY hierarchy: [16], [17]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G_s(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s) &= (\Lambda_s^* G_s(t))(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s) + \\ + \varepsilon \sum_{P: (1, \dots, s) = X_1 \bigcup X_2} \sum_{i_1 \in X_1} \sum_{i_2 \in X_2} \Lambda^{*[2]}(i_1, i_2) G_{|X_1|}(t, \mathbf{U}_1) G_{|X_2|}(t, \mathbf{U}_2) + \\ + \varepsilon \int_{\mathcal{J} \times \mathcal{U}} d\mathbf{u}_{s+1} \sum_{i=1}^s \Lambda^{*[2]}(i, s+1) (G_{s+1}(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{s+1}) + \\ + \sum_{P: (1, \dots, s+1) = X_1 \bigcup X_2, \substack{i \in X_1, s+1 \in X_2}} G_{|X_1|}(t, \mathbf{U}_1) G_{|X_2|}(t, \mathbf{U}_2)), \\ G_s(t)|_{t=0} &= G_s^{0, \varepsilon}, \quad s \geq 1, \end{aligned} \quad (7)$$

where $\varepsilon > 0$ is a scaling parameter and we use accepted in hierarchy (2) notations.

A nonperturbative solution of the Cauchy problem (7), (8) is represented by a sequence of marginal correlation functions:

$$G_s(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n} d\mathbf{u}_{s+1} \dots d\mathbf{u}_{s+n} \mathfrak{A}_{1+n}(t; \{1, \dots, s\}, s+1, \dots, s+n | G(0)), \quad s \geq 1, \quad (9)$$

where we denote by $G(0) = (1, G_1^{0, \varepsilon}, \dots, G_s^{0, \varepsilon}, \dots)$ a sequence of initial marginal correlation functions. The generating operator $\mathfrak{A}_{1+n}(t | \bullet)$ of series expansion (9) is the $(1+n)$ th-order cumulant of groups of nonlinear operators (4) of the Liouville hierarchy (2)

$$\begin{aligned} \mathfrak{A}_{1+n}(t; \{1, \dots, s\}, s+1, \dots, s+n | G(0)) &\doteq \\ \sum_{P: (\{1, \dots, s\}, s+1, \dots, s+n) = \bigcup_k X_k} (-1)^{|P|-1} (|P|-1)! \mathcal{G}(t; \theta(X_1) | \dots \mathcal{G}(t; \theta(X_{|P|}) | G(0)) \dots), \end{aligned} \quad (10)$$

where the composition of mappings (4) of corresponding noninteracting groups of interacting stochastic processes is denoted by $\mathcal{G}(t; \theta(X_1) | \dots \mathcal{G}(t; \theta(X_{|P|}) | G(0)) \dots)$ [17].

Series expansion (9) exists under the condition that: $\max_{n \geq 1} \|G_n^{0, \varepsilon}\|_{L^1_n} < (2e^3)^{-1}$. If $G_n^{0, \varepsilon} \in L^1_{0,n} \subset L^1_n$, it is a strong solution and for arbitrary initial data $G_n^{0, \varepsilon} \in L^1_n$ it is a weak solution of the Cauchy problem (7), (8).

The sequence of marginal correlation functions (9) describes the processes of the creation and the propagation of correlations in a large system of interacting stochastic processes, modeling the microscopic evolution of active soft condensed matter.

5. A mean field asymptotic behavior of marginal correlation functions

We describe the processes of the creation and the propagation of correlations in a mean field limit, namely, we establish the mean field asymptotic behavior [18] of constructed

marginal correlation functions (9) in case of the initial state specified by the one-particle marginal correlation function with correlations

$$G^{(cc)} = \left(1, G_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_1), g_2^\varepsilon(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) \prod_{i=1}^2 G_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_i), \dots, g_n^\varepsilon(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) \prod_{i=1}^n G_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_i), \dots \right), \quad (11)$$

where functions $g_n^\varepsilon(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) \equiv g_n^\varepsilon$, $n \geq 2$, are specified the initial correlations. We note that a such assumption about initial states is intrinsic for the kinetic description of many-particle systems [4], on the other hand, initial states (11) are typical for soft condensed matter.

We assume the existence of a mean field limit of initial one-particle marginal correlation function in the following sense

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\| \varepsilon G_1^{0,\varepsilon} - g_1^0 \right\|_{L_1^1} = 0, \quad (12)$$

and for initial correlations, respectively,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\| g_n^\varepsilon - g_n \right\|_{L_n^1} = 0, \quad n \geq 2. \quad (13)$$

Hence a mean field limit of initial state (11) is specified by the sequence of the limit marginal correlation functions

$$g^{(cc)} = \left(1, g_1^0(\mathbf{u}_1), g_2(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) \prod_{i=1}^2 g_1^0(\mathbf{u}_i), \dots, g_n(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) \prod_{i=1}^n g_1^0(\mathbf{u}_i), \dots \right). \quad (14)$$

Under conditions (12), (13) on initial state (11) there exists a mean field limit of marginal correlation functions (9) in the following sense:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\| \varepsilon^s G_s(t) - g_s(t) \right\|_{L_s^1} = 0, \quad s \geq 1,$$

where for $s \geq 2$ the limit marginal (s -particle) correlation function $g_s(t)$ is determined by the formula

$$g_s(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s) = \prod_{i=1}^s e^{t\Lambda^{*[1]}(i_i)} \sum_{P: \{1, \dots, s\} = \bigcup_i X_i} \prod_{X_i \subset P} g_{|X_i|}(\mathbf{u}_i) \prod_{i_2=1}^s e^{-t\Lambda^{*[1]}(i_2)} \prod_{j=1}^s g_1(t, \mathbf{u}_j), \quad (15)$$

and, respectively, the limit one-particle correlation function $g_1(t)$ is represented by the following series expansion:

$$\begin{aligned} g_1(t, \mathbf{u}_1) = & \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n} d\mathbf{u}_2 \dots d\mathbf{u}_{n+1} e^{(t-t_1)\Lambda^{*[1]}(1)} \times \\ & \times \Lambda^{*[2]}(1, 2) \prod_{j_1=1}^2 e^{(t_1-t_2)\Lambda^{*[1]}(j_1)} \dots \prod_{j_{n-1}=1}^n e^{(t_{n-1}-t_n)\Lambda^{*[1]}(j_{n-1})} \times \\ & \times \sum_{i_n=1}^n \Lambda^{*[2]}(i_n, n+1) \prod_{j_n=1}^{n+1} e^{t_n \Lambda^{*[1]}(j_n)} \sum_{P: \{1, \dots, n+1\} = \bigcup_i X_i} \prod_{X_i \subset P} g_{|X_i|}(\mathbf{u}_i) \prod_{i=1}^{n+1} g_1^0(\mathbf{u}_i), \end{aligned} \quad (16)$$

where it is used notations accepted above.

The operator $g_1(t)$ represented by series (16) is a solution of the Cauchy problem of the Vlasov-type kinetic equation with initial correlations:

$$\frac{\partial}{\partial t} g_1(t, \mathbf{u}_1) = \Lambda^{*[1]}(1) g_1(t, \mathbf{u}_1) + \quad (17)$$

$$\begin{aligned} + \int_{\mathcal{J} \times \mathcal{U}} d\mathbf{u}_2 \Lambda^{*[2]}(1, 2) \prod_{i_1=1}^2 e^{t\Lambda^{*[1]}(i_1)} (1 + g_2(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)) \prod_{i_2=1}^2 e^{-t\Lambda^{*[1]}(i_2)} g_1(t, \mathbf{u}_1) g_1(t, \mathbf{u}_2), \\ g_1(t, \mathbf{u}_1)|_{t=0} = g_1^0(\mathbf{u}_1), \end{aligned} \quad (18)$$

where the operators $\Lambda^{*[1]}(1)$ and $\Lambda^{*[2]}(1,2)$ are defined according to formula (1). We point out that derived kinetic equation for a many-constituent system modeling collective behavior of active soft condensed matter (17) is the non-Markovian evolution equation.

We remark that in case of initial states of statistically independent interacting stochastic processes specified by a one-particle marginal distribution function the kinetic evolution is governed by the Vlasov kinetic equation and equality (15) means the property of the propagation of initial chaos [18].

The proof of stated results is based on the corresponding formulas for cumulants of asymptotically perturbed semigroups of operators (5).

Indeed, if $f_s \in L_s^1$, then for arbitrary finite time interval for the strongly continuous semigroup $e^{t\Lambda_s^*}$ the following equality is valid:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\| e^{t\Lambda_n^*} f_s - \prod_{j=1}^s e^{t\Lambda^{*[1]}(j)} f_s \right\|_{L_s^1} = 0.$$

As a result of this equality for the $(s+n)th$ -order cumulants of semigroups of operators (5) the following equalities are true:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\| \frac{1}{\varepsilon^n} \mathfrak{A}_{s+n}(t, 1, \dots, s+n) f_{s+n} \right\|_{L_s^1} = 0, \quad s \geq 2.$$

In consequence of the validity of this equalities the representation of the limit one-particle correlation function $g_1(t)$ by series expansion (16) is also obtained directly in view that series expansion (9) in the case of initial data (11) takes the form

$$G_1(t, \mathbf{u}_1) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n} d\mathbf{u}_2 \dots d\mathbf{u}_{n+1} \mathfrak{A}_{1+n}(t, 1, \dots, n+1) \sum_{\mathbf{P}: (1, \dots, n+1) = \bigcup_i X_i, X_i \subset \mathbf{P}} \prod_{i \in X_i} g_{|X_i|}^{\varepsilon}(\mathbf{u}_i) \prod_{i=1}^{n+1} G_1^{0, \varepsilon}(\mathbf{u}_i),$$

where it is used notations accepted above.

We note that the sequence of limit marginal correlation functions (16) and (15) is a solution of the nonlinear Vlasov hierarchy which describe the evolution of marginal correlation functions in a mean field limit for arbitrary initial states [16, 18].

6. Conclusion

For a large system of interacting stochastic processes of collisional kinetic theory [12], modeling the microscopic evolution of active soft condensed matter, a mean field scaling asymptotics of nonperturbative solution (9) of the Cauchy problem of the nonlinear BBGKY hierarchy (7),(8) for marginal correlation functions was constructed.

The marginal correlation functions give an equivalent approach to the description of the evolution of states of large particle systems in comparison with marginal density functions governed by the BBGKY hierarchy [4]. The macroscopic characteristics of fluctuations of observables are directly determined by marginal correlation functions (9) on the microscopic level [1, 16].

In case of initial states specified by correlation functions (14), which can characterize the analogs of condensed states of many-particle systems of statistical mechanics for interacting entities of complex biological systems, a mean field asymptotic behavior of the processes of the creation and the propagation of correlations were described (15). It was established that mean field dynamics does not create new correlations except of those that generating by initial correlations. It was also proved the property known as a propagation of

initial chaos, which underlies in mathematical derivation of effective evolution equations of complex systems [4, 18].

We note that the developed approach is related to the problem of a rigorous derivation of the non-Markovian kinetic-type equations from underlying many-constituent dynamics which make it possible to describe the memory effects of collective dynamics of complex systems modeling active soft condensed matter.

We remark also that in papers [19, 20] it was developed two other approaches to the description of the process of the propagation of initial correlations in a mean field limit. In paper [19] the process of the propagation of initial chaos was established within the framework of the evolution of marginal observables (in [21] this result was generalized on case of initial states with correlations) and in paper [20] the property of the propagation of initial correlations was proved within the framework of the description of the evolution by means of a one-particle (marginal) density function governed by the generalized kinetic equation.

References (in language original)

1. Bogolyubov N. N. Dynamic theory problems in statistical physics (in Rus.) // Gostekhizdat, Moscow. – 1946. – 123 c.
2. Gurov K. P. Foundations of kinetic theory (in Rus.) // Izd-vo Nauka, Moscow. – 1966. – 352 c.
3. Cercignani C., Gerasimenko U. I., Petrina D. Y. Many-particle dynamics and kinetic equations. – Springer, The Netherlands. – 2012. – 252 c.
4. Villani C. A review of mathematical topics in collisional kinetic theory // Handbook of mathematical fluid dynamics. – 2002. – T. 1. – №. 71-305. – C. 3-8.
5. Lachowicz M. Lins between microscopic and macroscopic descriptions // Multiscale problems in the life sciences. – 2008. – C. 201-278.
6. Bellouquid A., Delitala M. Mathematical modeling of complex biological systems. – Birkhäuser Boston, 2006. – 200 c.
7. Marchetti M. C. et al. Hydrodynamics of soft active matter // Reviews of Modern Physics. – 2013. – T. 85. – №. 3. – C. 1143-1189.
8. Menzel A. M. Tuned, driven, and active soft matter // Physics Reports. – 2015. – T. 554. – C. 1-45.
9. Vicsek T., Zafeiris A. Collective motion // Physics Reports. – 2012. – T. 517. – C. 71-140.
10. Bellomo N., Dogbe C. On the modeling of traffic and crowds: A survey of models, speculations, and perspectives // SIAM review. – 2011. – T. 53. – №. 3. – C. 409-463.
11. Carlen E., Degond P., Wennberg B. Kinetic limits for pair-interaction driven master equations and biological swarm models // Mathematical Models and Methods in Applied Sciences. – 2013. – T. 23. – C. 1339-1376.
12. Lachowicz M. Individually-based Markov processes modeling nonlinear systems in mathematical biology // Nonlinear Analysis: Real World Applications. – 2011. – T. 12. – №. 4. – C. 2396-2407.
13. Banasiak J., Lachowicz M. Methods of small parameter in mathematical biology. – Birkhäuser, Boston. – 2014. – 296 c.
14. Prigogine I. Non-equilibrium statistical mechanics. – John Wiley & Sons Inc., New York. – 1962. – 319 c.

15. Gerasimenko V. I., Polishchuk D. O. Dynamics of correlations of Bose and Fermi particles // *Mathematical Methods in the Applied Sciences*. – 2011. – T. 34. – №. 1. – C. 76-93.
16. Gerasimenko V. I. Hierarchies of quantum evolution equations and dynamics of many-particle correlations // *Statistical Mechanics and Random Walks: Principles, Processes and Applications*. – Nova Science Publ., New York. – 2012. – C. 233-288
17. Gerasimenko V. I. Evolution of correlation operators of large particle quantum systems // *Methods of Functional Analysis and Topology*. – 2017. – T. 23. – №. 02. – C. 123-132.
18. Golse F. On the dynamics of large particle systems in the mean field limit // *Macroscopic and Large Scale Phenomena: Coarse Graining, Mean Field Limits and Ergodicity*. – Springer. Lect. Notes Appl. Math. Mech. –T. 3. – 2016. – C. 1-144.
19. Gerasimenko V., Fedchun Y. On kinetic models for the evolution of many-entity systems in mathematical biology // *Journal of Coupled Systems and Multiscale Dynamics*. – 2013. – T. 1. – №. 2. – C. 273-279.
20. Gerasimenko, V.I., Fedchun, Yu.Yu. Kinetic equations of soft active matter // *Reports of NAS of Ukraine*. – № 5. – 2014. – C. 11-18.
21. Gerasimenko V. I., Fedchun Y. Y. On semigroups of large particle systems and their scaling asymptotic behavior // *Semigroups of Operators-Theory and Applications*. – Springer Proceedings in Mathematics and Statistics, Springer. – 2015. – C. 165-182.

References

1. Bogolyubov, N.N. (1946). *Problems of dynamic theory in statistical physics*. Moscow: Gostekhizdat, 123p. (in Rus.)
2. Gurov, K.P. (1966). *Foundations of the kinetic theory. Method of N.N. Bogolyubov*. Moscow: Nauka, 352p. (in Rus.)
3. Cercignani, C., Gerasimenko, V., Petrina, D. (2012). *Many-particle dynamics and kinetic equations*. The Netherlands: Springer, 252p..
4. Villani, C. (2002). A review of mathematical topics in collisional kinetic theory. In: *Handbook of mathematical fluid dynamics*, Elsevier, 1, 71-305.
5. Lachowicz, M. (2008). Links between microscopic and macroscopic descriptions. In: *Multiscale problems in the life sciences. From microscopic to macroscopic*. Springer. *Lecture Notes in Math.*, 1940, 201-278.
6. Bellouquid, A., Delitala, M. (2006). *Mathematical modeling of complex biological systems: a kinetic theory approach*. Boston: Birkhäuser, 200p.
7. Marchetti, M.C., Joanny, J.F., Ramaswamy, S., Liverpool, T.B., Prost, J., Rao, M., Simha, R. Aditi. (2013). Hydrodynamics of soft active matter. *Rev. Mod. Phys.*, 85, 1143-1189.
8. Menzel, A.M. (2015). Tuned, driven, and active soft matter. *Phys. Rep.*, 554, (3), 1-45.
9. Vicsek, T., Zafeiris, A. (2012). Collective motion. *Physics Reports*, 517, 71-140.
10. Bellomo, N., Dogbé, C. (2011). On the modeling of traffic and crowds: a survey of models, speculations and perspectives. *SIAM Review*, 53, (3), 409-463.
11. Carlen, E., Degond, P., Wennberg, B. (2013). Kinetic limits for pair-interaction driven master equations and biological swarm models. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 23, 1339-1376.
12. Lachowicz, M. (2011). Individually-based Markov processes modeling nonlinear systems in mathematical biology. *Nonlinear Analysis: Real World Applications*, 12, (4), 2396-2407.

13. Banasiak, J., Lachowicz, M. (2014). *Methods of small parameter in mathematical biology*. Boston: Birkhäuser, 296p.
14. Prigogine, I. (1962). *Nonequilibrium Statistical Mechanics*. New York: John Wiley & Sons Inc., 319p.
15. Gerasimenko V.I., Polishchuk D.O. (2011). Dynamics of correlations of Bose and Fermi particles. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 34, (1), 76-93.
16. Gerasimenko, V.I. (2012). Hierarchies of quantum evolution equations and dynamics of many-particle correlations. In: *Statistical Mechanics and Random Walks: Principles, Processes and Applications*. N.Y.: Nova Science Publ., Inc., 233-288.
17. Gerasimenko, V.I. (2017). The evolution of correlation operators of large particle quantum systems. *Methods Funct. Anal. Topology*, 23, (2), 123-132.
18. Golse, F. (2016). On the dynamics of large particle systems in the mean field limit. In: *Macroscopic and large scale phenomena: coarse graining, mean field limits and ergodicity*. Springer. *Lect. Notes Appl. Math. Mech.*, 3, 1-144.
19. Gerasimenko, V.I., Fedchun, Yu.Yu. (2013). On kinetic models for the evolution of many-entity systems in mathematical biology. *J. Coupled Syst. Multiscale Dyn.*, 1, (2), 273-279.
20. Gerasimenko, V.I., Fedchun, Yu.Yu. (2014). Kinetic equations of soft active matter. *Reports of NAS of Ukraine*, (5), 11-18.
21. Gerasimenko, V.I., Fedchun, Yu.Yu. (2015). On semigroups of large particle systems and their scaling asymptotic behavior. In: *Semigroups of Operators — Theory and Applications*. Series: Springer Proceedings in Mathematics and Statistics, Springer, 113, 165-182.

Анотація. В. І. Герасименко. Про розповсюдження початкових кореляцій в активних м'яких речовинах. Для системи багатьох стохастичних марковських стрибкоподібних процесів, якою моделюється колективна поведінка складних систем математики біології, описано процес поширення початкових кореляцій. Розвинутий підхід ґрунтується на побудові скейлінгової границі середнього поля для послідовності маргінальних кореляційних функцій, яка є непертурбативним розв'язком задачі Коші для ієрархії нелінійних рівнянь ББГКІ (Боголюбов — Борн — Грін — Кірквуд — Івон). Доведення отриманих результатів ґрунтується на відповідних граничних теоремах для кумулянтів асимптотично збурених груп нелінійних операторів, якими описується динаміка кореляцій скінченної кількості марковських стрибкоподібних процесів та на використанні явного вигляду твірних операторів розкладів в ряд для маргінальних кореляційних функцій.

У випадку початкових станів, якими характеризуються конденсовані стани активних м'яких речовин, а саме, які описуються одночастинковою функцією розподілу та кореляційними функціями, в скейлінговій границі середнього поля встановлено явний вигляд граничних маргінальних функцій розподілу. В зазначеному наближенні еволюція стану системи описується за допомогою граничної одночастинкової функції розподілу, яка є розв'язком задачі Коші для немарковського кінетичного рівняння Власова з початковими кореляціями. Для граничних маргінальних функцій розподілу також встановлено властивість, відому як властивість поширення початкового хаосу. Розвинутий підхід пов'язаний з проблемою строгого виведення з динаміки складних систем кінетичних рівнянь немарковського типу, які дають можливість описувати ефекти пом'яті колективної поведінки активних м'яких конденсованих речовин.

Ключові слова: ієрархія нелінійних рівнянь ББГКІ, кінетичне рівняння, кореляційна функція, скейлінгова границя, активна м'яка речовина.

Одержано редакцією 03.08.2017

Прийнято до друку 15.09.2017

УДК 539.381; 539.382.2; 539.389.1

PACS 61.72.Cc; 61.72.Cc;
83.50.Uv; 81.40.Lm;
83.10.Ff

A. M. Gusak, A. R. Gonda

SEVERE PLASTIC DEFORMATION BY KOBO METHOD – ESTIMATIONS AND MODEL

A new phenomenological model for the description and simulation of Severe Plastic Deformation (SPD) is developed based on the inverse dependence of the material's viscosity on the concentration of point defects (the higher the concentration, the less the viscosity). In this case, the local concentration of point defects is determined by (1) the intensity of deformation, (2) the annihilation of interstitial defects and vacancies, (3) the absorption of defects at dislocations, (4) diffusive redistribution of defects. The solution of the corresponding system of nonlinear differential equations for the field of defect concentrations and the differential equation for the velocity field at a given rate of deformation at the boundary of the sample provides a non-equilibrium phase transition - a jump in viscosity and a jump in the concentration of defects at a certain distance from the surface. In this case, the width of the zone of reduced viscosity and increased defect concentration is proportional to the surface velocity of the deformation. It is in this zone that it makes sense to consider the material as a viscous medium.

Keywords: severe plastic deformation, interstitial defects, vacancies, diffusion, viscosity, creep, nonlinear differential equations.

1. Introduction

An important example of nano-trend in science and technology during last decades is a production of nano-grained metals by Severe Plastic Deformation (SPD) [1, 2]. The most popular methods of SPD are ECAP (equi-channel angular pressing) and HPT (high-pressure torsion). Less than 20 years ago Korbel and Bochniak from AGH (Cracow) suggested their own method (KoBo) for extrusion of metals and alloys [3-5]. This method has something in common with HPT, but torsion is oscillating: the external surface is subjected to periodic rotations with a frequency of a few Hertz (say, 5 Hz) and amplitude of a few (6-8) degrees.

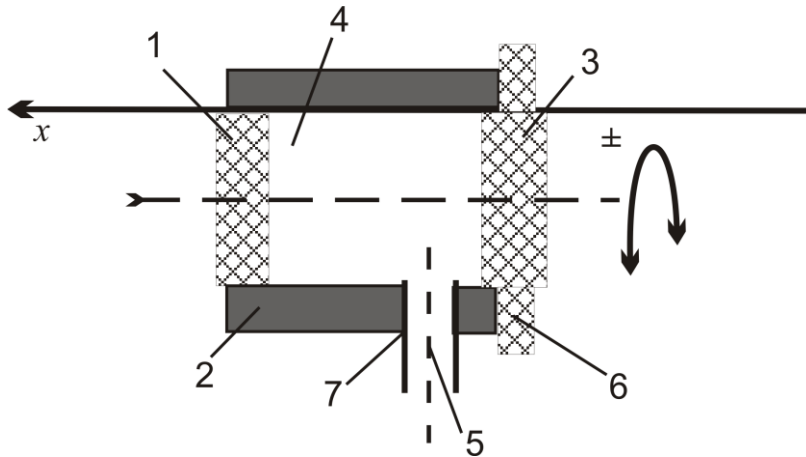


Figure 1. Scheme of KoBo lateral extrusion:

- 1—punch,
- 2—container,
- 3— reversibly rotating mandrel with ragging on the front surface,
- 4—extruded metal/billet,
- 5— product,
- 6—lock,
- 7— die located on container's side surface.

In the KoBo process, the metal billet undergoes reversible plastic twisting just before entering the cross section reducing die. The reversible metal twist does not affect directly the geometry of the billet, however, it transforms the typical for extrusion axio-radial flow into the layer like radial one. Experiments demonstrate that the metal flow during the KoBo process is actually a viscous flow, which follows Newton's law of laminar flow. They demonstrated that the metal within narrow layer around rotation zone becomes superplastic and is squeezed out practically as a viscous liquid with velocity about 0.5 mm/s. In addition, the measurements of the kinetics of metal flow have shown a linear dependence of extrusion stress on strain rate, i.e., the Newtonian type of the flow.

The first attempt of some elementary mathematical modeling of this process was made in [6], but it contained some artificial assumptions (like unknown non-zero viscosity in the non-deformed region, etc.). Here we try to construct some simple but self-consistent scheme for describing transition solid $\rightarrow$ viscous fluid due to the sharp increase of point defects concentrations under SPD.

2. Basic equations for creep, defect concentration and viscosity

According to the ideas of Korbelt and Bochniak, we will assume that the main mechanism of KoBo process is based on interstitial defects and vacancies, generated by the interaction of dislocations in the process of oscillating intensive torsion. We will treat deformation in the active zone of the KoBo process as a creep generated by applied stress and provided by nonequilibrium defects generated by SPD. If creep is realized via bulk diffusion in the grains then we have Nabarro-Herring creep with deformation rate about

$$\frac{d\varepsilon}{dt} \approx \frac{D^{bulk} \Omega}{kT} \frac{1}{l^2} \sigma \quad (1)$$

Here D^{bulk} is a self-diffusivity in the bulk of the grain, Ω is an atomic volume, kT is a Boltzmann constant times temperature, l is a mean grain size, σ is a local stress. Bulk diffusivity can be represented in terms of products of the interstitial and vacancy diffusivities D_i, D_v and respective defect concentrations (ratio of defects and atoms) N_i, N_v : $D^{bulk} \approx N_i D_i + N_v D_v$.

If creep is realized via grain-boundary diffusion then we have Coble creep with deformation rate about

$$\frac{d\varepsilon}{dt} \approx \frac{D^{GB} \Omega}{kT} \frac{\delta}{l^3} \sigma \quad (2)$$

Here D^{GB} is a mean self-diffusivity within grain-boundary, δ is a width of grain boundary, typically from half to one nanometer. Typically, at equilibrium conditions at low temperatures and small grains, Coble creep is more realistic. Yet, in our case, when the nonequilibrium defect concentration is rather high in the bulk and bulk diffusivity may be not less than the grain-boundary one, we will treat Nabarro-Herring creep mode as the main one. Then we may treat the coefficient before stress on the right-hand side of Eq. (1) as inverse dynamic viscosity. Thus, in our simplified model, the viscosity will be estimated from the expression

$$\eta \approx \frac{kT}{(N_i D_i + N_v D_v) \Omega} l^2 \quad (3)$$

Here we neglect the turbulence effect, and the distribution of tangential velocities, initiated by external rotation, is given by simplified equation

$$\frac{\partial V_y(t, X)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\eta(N_i(t, X) N_v(t, X)) \frac{\partial V_y}{\partial X} \right) \quad (4)$$

Actually, we will work only with amplitudes of tangential velocities, therefore we will further treat V_y as the local amplitudes. Here we are interested in the steady-state regime of the KoBo process, when $\frac{\partial V_y}{\partial t} \approx 0$. Then

$$\eta(N_i(t, X) N_v(t, X)) \frac{\partial V_y}{\partial X} \approx \text{const} = -\sigma_{cr}, \quad (5)$$

here σ_{cr} is a strength limit, providing plastic deformation, movement, and annihilation of dislocations leading to the generation of point defects. Velocities amplitudes should, therefore, decrease from the maximum value $V_y(X=0) = V_{\max}$ at the rotating surface, in the X-direction:

$$V_y(X) = V_{\max} - \sigma_{cr} \int_0^X \frac{1}{\eta(X')} dX' \quad (6)$$

Naturally, at some point $X = H$ velocity will come to zero: $V_y(X=H) = 0 = V_{\max} - \sigma_{cr} \int_0^H \frac{dX}{\eta(X)}$. H has a physical meaning of the active zone width in the KoBo process. It is determined by the condition (integral equation):

$$\int_0^H \frac{dX}{\eta(X)} = \frac{V_{\max}}{\sigma_{cr}} \quad (7)$$

At $X > H$ one may treat velocity as zero and viscosity as practically infinite (practically zero defect concentration).

To have the self-consistent description of KoBo process, one has to predict (at least roughly) the defect concentrations and the mean grain size in the active zone. For this, we should somehow describe the energy dissipation per unit volume of the active zone. It can be done by several methods.

The first method is almost school-like and based on the work of deformation:

Torsion force of the external source is about $M \approx F_{cr} R$, where R is a radius of the rotating part. (Here we neglect the factors like 1/2). Work per one oscillation is about $A_1 \approx M \cdot \varphi_{\max} \approx (\sigma_{cr} \pi R^2) \cdot R \cdot \varphi_{\max}$ with $\varphi_{\max}$ as an amplitude angle of rotation,

$\varphi_{\max} \approx V_{\max} / \nu / R$ (typically 6-8 degrees). Work per unit time is $\frac{dA}{dt} \approx (\sigma_{cr} \pi R^2) R \varphi_{\max} \nu$ with ν as a frequency of external rotations (typically a few times per second, say 5Hz). The volume of active zone is about $\pi R^2 H$. Thus, the energy dissipation per unit volume (w) is about

$$w \approx \frac{1}{\pi R^2 H} (\sigma_{cr} \pi R^2) R \varphi_{\max} \nu = \frac{\sigma_{cr} \varphi_{\max} R \nu}{H} \quad (8)$$

Second, the alternative way is to use the expression for energy dissipation in viscous media (Landau, [7]):

$$w = \eta \left(\frac{\partial V}{\partial X} \right)^2 \quad (9)$$

Using eq. (5) for the steady-state regime, one can reformulate eq. (9) as

$$w \approx \frac{\sigma_{cr}^2}{\eta} \approx \sigma_{cr} \frac{\partial V}{\partial X} \approx \sigma_{cr} \frac{V_{\max}}{H} \approx \sigma_{cr} \frac{\varphi_{\max} R \nu}{H} \quad (10)$$

As one can see, equations (8) and (10) give the same energy dissipation per unit volume.

Dissipation per atomic volume is

$$w \Omega \approx \frac{\sigma_{cr}^2}{\eta} \Omega \approx \sigma_{cr} \frac{\varphi_{\max} R \nu}{H} \Omega.$$

If one assumes that some fraction $\bar{w}_r$ of energy dissipation is used for generation of the interstitial defects (with E_i^{form} being a formation energy of interstitial defect), then the average number of interstitials generated per unit volume per unit time is

$$\bar{q}_i = r \frac{w}{E_i^{form}} \approx r \frac{\sigma_{cr}^2}{\eta E_i^{form}} \approx r \sigma_{cr} \frac{\varphi_{\max} R \nu}{H E_i^{form}}.$$

Then the generation of defects per unit atomic cell per unit time is

$$\bar{q}_{i1} \approx r \sigma_{cr} \frac{\varphi_{\max} R \nu}{H E_i^{form}} \Omega \quad (11)$$

In our model, we admit the nonuniform distribution of defects and corresponding viscosity. Therefore, in general case we should use the following expression (without using H but using an expression for viscosity):

$$q_{i1} = \begin{cases} r \frac{\sigma_{cr}^2}{\eta E_i^{form}} \Omega \approx r \frac{\sigma_{cr}^2 \Omega^2}{l^2 k T E_i^{form}} (N_i D_i + N_v D_v), & X < H \\ 0, & X > H \end{cases} \quad (12)$$

(generation of defects proceeds only within the active zone).

We will further assume that the generation of vacancies proceeds simultaneously with interstitials (like in Frenkel pairs production), and will approximately assume $q_{i1} \approx q_{v1} \equiv q_1$.

Thus, we can now formulate the basic equations for the defect concentrations (mole fractions):

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = q_1 - \frac{N_i}{\tau_i} - \alpha D_i N_i N_v + D_i \frac{\partial^2 N_i}{\partial X^2} \quad (13)$$

$$\frac{\partial N_v}{\partial t} = q_1 - \frac{N_v}{\tau_v} - \alpha D_v N_i N_v + D_v \frac{\partial^2 N_v}{\partial X^2} \quad (14)$$

Here we did not take into account the flux of defects in the stress gradient. It is important for extrusion but not for the redistribution of defects (see below). Second terms on the right-hand side of eq. (13,14) are responsible for the sinks of interstitials and vacancies, mainly at the dislocations. The values $L_i = \sqrt{D_i \tau_i}$, $L_v = \sqrt{D_v \tau_v}$ are treated as the migration paths of interstitials and vacancies to the dislocations. The third term in both equations (13,14) is responsible for the annihilation of interstitials and vacancies, $\lambda = 1/\sqrt{\alpha}$ is a distance at which vacancies and interstitials start to “feel each other”, $\lambda^2 / D_i = 1/(\alpha D_i)$ is a time for a couple to annihilate. Interstitial diffusivity D_i is used here since interstitials diffuse much faster than vacancies.

We are interested in the observable steady-state KoBo regime. Therefore, we will take the time derivatives of defects concentrations as zero:

$$q_1 - \frac{N_i}{\tau_i} - \alpha D_i N_i N_v + D_i \frac{\partial^2 N_i}{\partial X^2} \approx 0 \quad (15)$$

$$q_1 - \frac{N_v}{\tau_v} - \alpha D_i N_i N_v + D_v \frac{\partial^2 N_v}{\partial X^2} \approx 0 \quad (16)$$

Moreover, we will see below by direct calculations that the transient layer between active and inert zones is significantly less than the active zone with H. Therefore, we will start our evaluations from the points in active zone far from H, where both concentrations are almost constant:

$$q_1 - \frac{N_i}{\tau_i} - \alpha D_i N_i N_v \approx 0. \quad (15')$$

$$q_1 - \frac{N_v}{\tau_v} - \alpha D_i N_i N_v \approx 0. \quad (16')$$

Comparison of eqs. (15, 16) implies:

$$\frac{N_i}{\tau_i} = \frac{N_v}{\tau_v} \Rightarrow \frac{N_v}{N_i} = \frac{\tau_v}{\tau_i} = \frac{L_v^2}{L_i^2} \frac{D_i}{D_v} \quad (17)$$

If the sinks of vacancies and interstitials are the same dislocations then the migration lengths should be the same ($\frac{L_v^2}{L_i^2} = 1$) and

$$\frac{N_v}{N_i} = \frac{D_i}{D_v} \Leftrightarrow N_v D_v = N_i D_i \quad (18)$$

Of course eq. (18) is only an approximation, but we will use it below for our estimations. In particular, in this case the viscosity and defect source expressions (3,12) become following:

$$\eta \approx \frac{kT l^2}{2D_i \Omega} \frac{1}{N_i} \quad (19)$$

$$q_1 = \begin{cases} r \frac{2\sigma_{cr}^2 \Omega^2}{l^2 k T E_i^{form}} D_i N_i, & X < H \\ 0, & X > H \end{cases} \quad (20)$$

Substituting eqs. (18, 20) into eq. (15) or (16), one gets approximate steady-state uniform (averaged) solution for the active zone $X < H$:

$$r \frac{2\sigma_{cr}^2 \Omega^2}{l^2 k T E_i^{form}} D_i N_i = D_i \frac{N_i}{L^2} + \alpha D_i \frac{D_i}{D_{V_i}} N_i^2 \Rightarrow$$

$$N_i^{st} = \frac{D_V}{\alpha D_i} \left(r \frac{2\sigma_{cr}^2 \Omega^2}{l^2 k T E_i^{form}} - \frac{1}{L^2} \right) \quad \text{at } X < H. \quad (21)$$

Thus, physically realistic solution with high defect density is possible only under condition

$$r \frac{2\sigma_{cr}^2 \Omega^2}{l^2 k T E_i^{form}} > \frac{1}{L^2} \quad (22)$$

Otherwise, the non-zero solution is possible only with diffusion term and will give the active zone only of the magnitude of defect migration path L which is not centimeters as in KoBo but microns.

Substituting Eq. (21) into Eq. (19), one can predict an average viscosity in the active zone of KoBo:

$$\eta \approx \frac{k T l^2 \alpha}{2 D_V \Omega} \frac{1}{\left(r \frac{2\sigma_{cr}^2 \Omega^2}{l^2 k T E_i^{form}} - \frac{1}{L^2} \right)_i} \quad (23)$$

Substituting eq. (23) into eq.(7), one can estimate the width H of an active zone:

$$H = \eta \frac{V_{\max}}{\sigma_{cr}} = \frac{k T l^2 \alpha}{2 D_V \sigma_{cr} \Omega} \frac{V_{\max}}{\left(r \frac{2\sigma_{cr}^2 \Omega^2}{l^2 k T E_i^{form}} - \frac{1}{L^2} \right)_i} \quad (24)$$

3. Estimations

We will use the following values of the main parameters, part of which are substantiated in our previous paper [6], but which earlier had been used for another model:

$$r = 0.5, \sigma_{cr} = 10^8 \text{ Pa}, L = 10^{-6} \text{ m}, l = 10^{-8} \text{ m}, \Omega = 10^{-29} \text{ m}^3, E_i^{form} = 10^{-18} \text{ J},$$

$$T = 300 \text{ K}, D_i = 10^{-5} \text{ m}^2 / \text{s}, D_i / D_V = 10^4, \alpha = 10^{18} \text{ m}^{-2}$$

Average defect concentration in the active zone:

$$N_i^{st} = \frac{D_V}{\alpha D_i} \left(r \frac{2\sigma_{cr}^2 \Omega^2}{l^2 k T E_i^{form}} - \frac{1}{L^2} \right) \approx 1.4 \cdot 10^{-10},$$

$$N_V^{st} = \frac{D_i}{D_V} N_i^{st} \approx 1.4 \cdot 10^{-6}$$

Average viscosity in the active zone:

$$\eta^{st} \approx \frac{k T l^2}{2 D_i \Omega} \frac{1}{N_i^{st}} \approx 1.5 \cdot 10^7 \text{ Pa} \cdot \text{s}$$

Maximal velocity of tangential motion:

$$V_{\max} \approx \varphi_{\max} R v \approx 0.1 \text{ m/s}$$

Approximate width of active KoBo zone:

$$H = \eta \frac{V_{\max}}{\sigma_{cr}} = \frac{k T l^2 \alpha}{2 D_V \sigma_{cr} \Omega} \frac{V_{\max}}{\left(r \frac{2\sigma_{cr}^2 \Omega^2}{l^2 k T E_i^{form}} - \frac{1}{L^2} \right)_i} \approx 1.5 \cdot 10^{-2} \text{ m}$$

Thus, we predict the active zone width about centimeter which is rather close to the real case.

4. Mathematical model including diffusive redistribution

Now we consider the non-uniform model including the diffusive redistribution of defects but preserving the steady-state approximation. In this case, two equations (15,16) are reduced to the following form:

$$\begin{cases} \left(r \frac{2\sigma_{cr}^2 \Omega^2}{l^2 k T E_i^{form}} - \frac{1_i}{L_i^2} \right) N_i - \alpha \frac{D_i}{D_v} N_i^2 + \frac{\partial^2 N_i}{\partial X^2} \approx 0, & X < H \\ \left(-\frac{1_i}{L_i^2} \right) N_i - \alpha \frac{D_i}{D_v} N_i^2 + \frac{\partial^2 N_i}{\partial X^2} \approx 0, & X > H \\ N_v(X) = \frac{D_i}{D_v} N_i(X) \end{cases} \quad (25)$$

$$\eta(X) \approx \frac{kTl^2}{2D_i\Omega} \frac{1}{N_i(X)}, \quad \int_0^H \frac{dX}{\eta(X)} = \frac{V_{max}}{\sigma_{cr}}.$$

To get the numeric solution, it is convenient to use the non-dimensional length $\xi = X/H$, $\Delta\xi = 1/M$. Then $H \int_0^1 \frac{d\xi}{\eta(\xi)} = \frac{V_{max}}{\sigma_{cr}}$, so that

$$H = \frac{V_{max}}{\sigma_{cr} \int_0^1 \frac{d\xi}{\eta(\xi)}} \quad (26)$$

Then we have the finite difference equation:

$$\begin{aligned} A[k]N_i[k] - B(N_i[k])^2 + \frac{N_i[k-1] + N_i[k+1] - 2N_i[k]}{1/M^2} &= 0 \\ A[k] &= \begin{cases} H^2 \left(r \frac{2\sigma_{cr}^2 \Omega^2}{l^2 k T E_i^{form}} - \frac{1}{L_i^2} \right), & 1 \leq k \leq M-1 \\ \left(-\frac{H^2}{L_i^2} \right), & M \leq k \leq 2M \end{cases} \\ B &= H^2 \alpha \frac{D_i}{D_v} \end{aligned} \quad (27)$$

To get the iteration scheme, we treat $N_i[k]$ in eq. (26) as a new iteration and $N_i[k-1]$, $N_i[k+1]$ as a previous iteration, so that one has the quadratic equation for the new iteration. Choosing (naturally) only the positive root, one obtains:

$$N_i^{new}[k] := \frac{M^2}{2B} \left(A[k]/M^2 - 2 + \sqrt{(2 - A[k]/M^2)^2 + 4B/M^2 \cdot (N_i[k-1] + N_i[k+1])} \right), \quad (28)$$

$$1 \leq k \leq 2M-1$$

Boundary conditions are following:

$$N_i[0] := N_i[1], \quad N_i[2M] := N_i[2M-1].$$

After finding the next iteration for the defect concentration, we find the new iteration for the active zone width

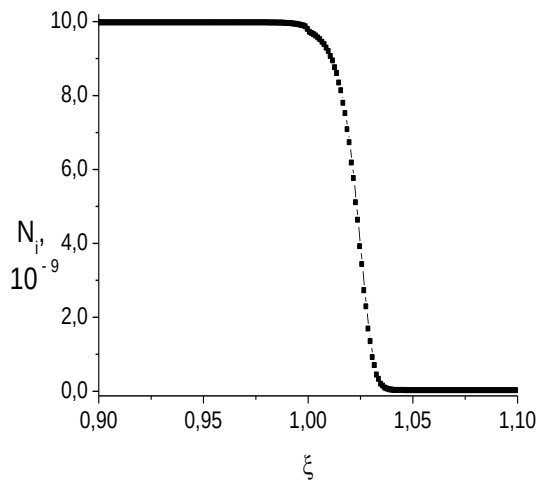
$$H^{new} := \frac{V_{\max} k T l^2}{\sigma_{cr} D_i \Omega \int_0^1 N_i(\xi) d\xi} = \frac{V_{\max} k_B T l^2 M}{\sigma_{cr} D_i \Omega \sum_{k=0}^{M-1} N_i^{new}[k]}.$$

Zero iteration is taken from

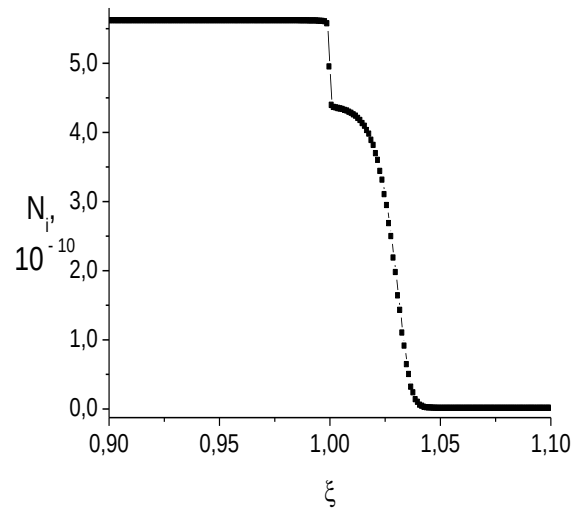
homogeneous approximation without diffusion: for defect concentration eq. (21) for $k < M$ and zero for $k > m$, and for H-equation (24).

Calculations demonstrate that our iteration scheme converges very fast and effectively.

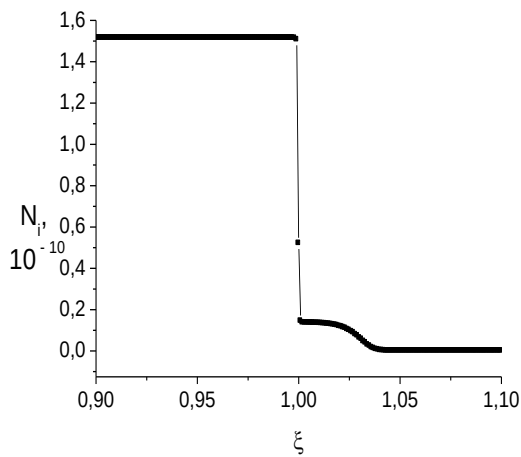
5. Numerical results



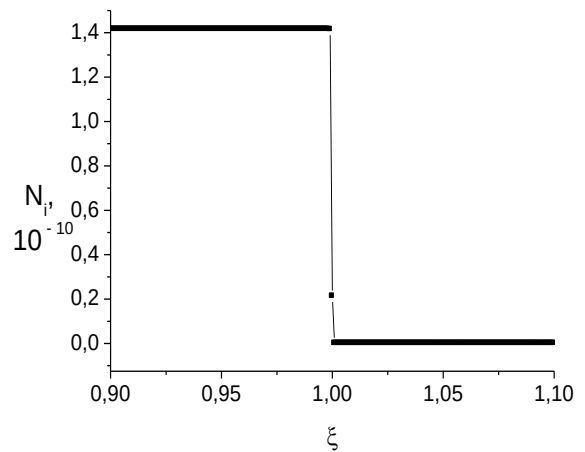
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure 2. Convergence of concentration profile for interstitials according to iteration procedure eq. 28 after 80 (a), 82 (b), 83 (c), 91 (d) iterations.

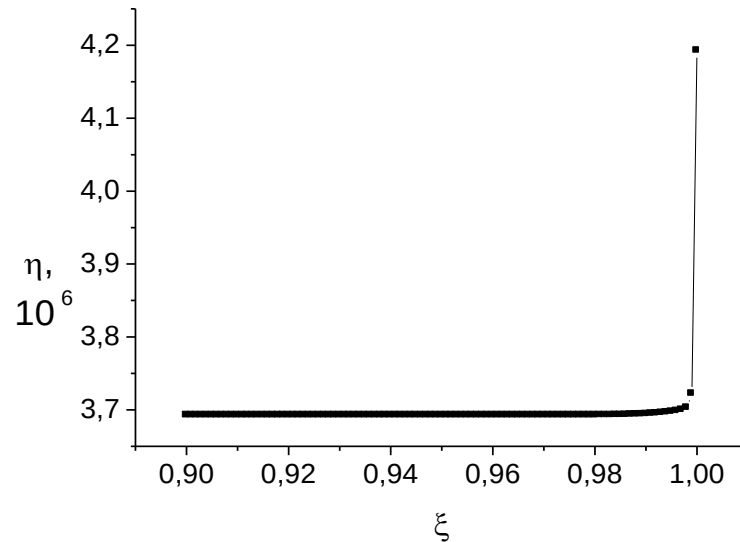


Figure 3. Non-equilibrium phase transition under KoBo-process – sharp decrease of viscosity within active deformation zone ($0 < x < H$, $H \approx \frac{kTl^2\alpha}{2D_v\sigma_{cr}\Omega} \left(r \frac{2\sigma_{cr}^2\Omega^2}{l^2kTE_i^{form}} - \frac{1}{L^2} \right)$)

5. Conclusions

1. New phenomenological scheme of SPD description for KoBo method of extrusion is developed. Viscosity is treated in terms of Nabarro-Herring creep under high concentration of defects generated by external oscillating rotations at the surface of the sample.
2. Generation of defects is estimated in the terms of energy dissipation in viscous media.
3. Non-equilibrium phase transition solid→viscous is described.
4. The width of active zone and defect concentration in active zone is predicted.
5. Account of diffusive redistribution of defects changes results insignificantly.

Acknowledgements

This work was supported by the Marie Curie International Research Staff Exchange Scheme Fellowship IRSES within the 7th European Community Framework Program under Grant 612552; Ministry of Education and Science of Ukraine under Grant 0115 U 000638 and Grant 0117 U 000577.

References (in language original)

1. Lowe T., & Valiev R. Z. (Eds.). (2012). *Investigations and applications of severe plastic deformation* (Vol. 80). Springer Science & Business Media.
2. Valiev R. Z., Estrin Y., Horita Z., Langdon T. G., Zehetbauer M. J., & Zhu Y. (2016). Producing bulk ultrafine-grained materials by severe plastic deformation: ten years later. *Jom*, 68(4), 1216-1226.
3. Korbel A., & Bochniak W. (1998). *U.S. Patent No. 5,737,959*. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.
4. Korbel A., & Bochniak W. (2017). Liquid-like behavior of solid metals. *Manufacturing Letters*, 11, 5-7.

5. Korbel A., Bochniak W., Ostachowski, P., Paliborek A., Łagoda M., & Brzostowicz A. (2016). A new constitutive approach to large strain plastic deformation. *International Journal of Materials Research*, 107(1), 44-51.
6. Gusak A., Danielewski M., Korbel A., Bochniak M., & Storozhuk N. (2014). Elementary model of severe plastic deformation by KoBo process. *Journal of Applied Physics*, 115(3), 034905.
7. Landau L. D., & Lifshitz E. M. (1986). Theory of Elasticity, vol. 7. *Course of Theoretical Physics*, 3, 109.

References:

1. Lowe T., Valiev R. Z. (ed.). Investigations and applications of severe plastic deformation. – Springer Science & Business Media, 2012. – T. 80.
2. Valiev R. Z. et al. Producing bulk ultrafine-grained materials by severe plastic deformation: ten years later // *Jom*. – 2016. – T. 68. – №. 4. – С. 1216-1226.
3. Korbel, Andrzej, and Wlodzimierz Bochniak. "Method of plastic forming of materials." U.S. Patent No. 5,737,959. 14 Apr. 1998.
4. Korbel A., Bochniak W. Liquid-like behavior of solid metals // *Manufacturing Letters*. – 2017. – T. 11. – С. 5-7.
5. Korbel A. et al. A new constitutive approach to large strain plastic deformation // *International Journal of Materials Research*. – 2016. – T. 107. – №. 1. – С. 44-51.
6. Gusak A. et al. Elementary model of severe plastic deformation by KoBo process // *Journal of Applied Physics*. – 2014. – T. 115. – №. 3. – С. 034905.
7. Landau L. D., Lifshitz E. M. Theory of Elasticity, vol. 7 // *Course of Theoretical Physics*. – 1986. – T. 3. – С. 109.

Анотація. *А.М. Гусак, А.Р. Гонда. Інтенсивна пластична деформація КоВо-методу – оцінки та модель. Розвинута нова, феноменологічна концепція опису та моделювання інтенсивної пластичної деформації (ІПД), основана на оберненій залежності в'язкості матеріалу від концентрації точкових дефектів (чим більше ця концентрація, тим менше в'язкість). При цьому локальна концентрація точкових дефектів визначається, (1) інтенсивністю деформації, (2) анігіляцією міжвузлових дефектів та вакансій, (3) поглинанням дефектів на дислокаціях, (4) дифузійним перерозподілом дефектів. Розв'язок відповідної системи нелінійних диференціальних рівнянь для поля концентрацій дефектів та диференціального рівняння для поля швидкостей при заданій швидкості деформації на границі зразка дає нерівноважний фазовий перехід – стрибок в'язкості і стрибок концентрації дефектів на певній відстані від поверхні. При цьому ширина зони пониженої в'язкості та підвищеної концентрації дефектів пропорційна поверхневій швидкості деформації. Саме в цій зоні має сенс розглядати матеріал як в'язке середовище.*

Ключові слова: інтенсивна пластична деформація, міжвузлові дефекти, вакансії, дифузія, в'язкість, повзучість, нелінійні диференціальні рівняння.

Одержано редакцією 23.11.2017

Прийнято до друку 15.12.2017

Marek Danielewski¹, Lucjan Sapa²¹Faculty of Materials Science and Ceramics, AGH University of Science and Technology
Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Poland. E-mail: daniel@agh.edu.pl²Faculty of Applied Mathematics, AGH University of Science and Technology

NONLINEAR KLEIN-GORDON EQUATION IN CAUCHY-NAVIER ELASTIC SOLID

We show that the quaternionic field theory can be rigorously derived from the classical balance equations in an isotropic ideal crystal where the momentum transport and the field energy are described by the Cauchy-Navier equation. The theory is presented in the form of the non-linear wave and Poisson equations with quaternion valued wave functions. The derived quaternionic form of the Cauchy-Navier equation couples the compression and torsion of the displacement. The wave equation has the form of the nonlinear Klein-Gordon equation and describes a spatially localized wave function that is equivalent to the particle. The derived wave equation avoids the problems of negative energy and probability. We show the self-consistent classical interpretation of wave phenomena and gravity.

Keywords: quantum wave, quaternion algebra, Klein-Gordon equation, gravity.

1. Introduction

In 1821 Navier formulated the general theory of elasticity [1], “A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field” was published by Maxwell in 1856 [2]. The hypothesis that we make use of in this work can be found in his paper. Let us begin with the well-known Maxwell remark on the ether [2]:

“On our theory it (energy) resides in the electromagnetic field, in the space surrounding the electrified and magnetic bodies, as well as in those bodies themselves, ... may be described... according to a very probable hypothesis, as the motion and the strain of one and the same medium (elastic ether)”.

In the almost unnoticed part of his paper, Maxwell wrote:

“...assumption, therefore, that gravitation arises from the action of the surrounding medium... leads to the conclusion that every part of this medium possesses, when undisturbed, an enormous intrinsic energy... As I am unable to understand in what way a medium can possess such properties, I cannot go any further in this direction in searching for the cause of gravitation.”

The properties of such a medium are presented in Table 1. Maxwell’s hypothesis was already investigated [3, 4], but connection with quantum mechanics was incomplete [5]. The first basis for relativistic quantum mechanics was found by Klein in 1926 and it is known as the Klein–Gordon equation, KGE [6]. Dirac maintained that the KGE equation is unacceptable [7] throughout his life.

Basing on the Maxwell hypothesis [2] we combine the theory of elasticity [1] and the quaternion algebra discovered by Hamilton in 1843 [8]. Quaternion formulation of the elasticity theory allows expressing momentum conservation in the Klein form of the wave equation [6] and the Poisson equation. Quaternion formalism allows analyzing such

phenomena [11]. Properties of the medium (crystal) are shown in Table 1. For simplicity, we consider the small deformation limit and consequently neglect here the effects due to density changes.

Table 1

The physical constants of the ideal isotropic crystal.

Physical Quantity	Unit	Symbol for unit	Value	SI unit	Reference
Lattice parameter	Planck length	l_P	$1.616229(38) \cdot 10^{-35}$	m	[9]
Poisson ratio		ν	0.25	-	[10]
Mass of particle	Planck mass	m_P	$2.176470(51) \cdot 10^{-8}$	kg	[9]
Planck density	Mass density	ρ	$2.062072 \cdot 10^{97}$	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	[9]
Duration of the internal process	Planck time	t_P	$5.39116(13) \cdot 10^{-44}$	s^{-1}	[9]
Young modulus	Energy density	Y	$4.6332447 \cdot 10^{114}$	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$	This work

2. The quaternion representation of the deformation field

The Navier-Cauchy momentum equation in an elastic solid shows coupling between compression and torsion in the displacement $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$. Coupling becomes evident in the boundary condition (nonlocal) for the suitable differential equations on the quaternionic deformation field $\sigma = \sigma_0 + \hat{\phi} \in H$, where symbol H denotes the quaternion algebra, $\sigma_0 = \text{div} \mathbf{u}_0$, $\hat{\phi} = \text{rot} \mathbf{u}_\phi$ and $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_\phi$.

In the isotropic crystal (Poisson number $\nu = 0.25$) the displacement $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$ is described by

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = 3 \frac{0.4Y}{\rho} \text{grad div} \mathbf{u} - \frac{0.4Y}{\rho} \text{rot rot} \mathbf{u}, \quad (1)$$

where Y and ρ denote the Young modulus and density shown in Table 1.

From Eq. (1), the local energy density in the deformation field follows [1]

$$e = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}} \circ \dot{\mathbf{u}} + \frac{3}{2} \frac{0.4Y}{\rho} (\text{div} \mathbf{u})^2 + \frac{1}{2} \frac{0.4Y}{\rho} \text{rot} \mathbf{u} \circ \text{rot} \mathbf{u}, \quad (2)$$

where $\dot{\mathbf{u}} = \partial \mathbf{u} / \partial t$ and $\circ$ is the standard product in $\mathbb{R}^3$

In the small deformation limit $Y/\rho \cong \text{const}$, and one gets equivalently

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = 3c^2 \text{grad div} \mathbf{u} - c^2 \text{rot rot} \mathbf{u}, \quad (3)$$

$$e = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}} \circ \dot{\mathbf{u}} + \frac{1}{2} c^2 (\text{div} \mathbf{u})^2 + \frac{1}{2} c^2 \text{rot} \mathbf{u} \circ \text{rot} \mathbf{u} + c^2 (\text{div} \mathbf{u})^2, \quad (4)$$

where the Young modulus was estimated from the velocity of the transverse wave: $c = \sqrt{0.4Y/\rho} = 2.99792458 \cdot 10^8$.

Every deformation can be expressed by compression and rotation, i.e., can be divided into an irrotational and a solenoidal component. Thus, let $\mathbf{u}$ belongs to the C^3 class of functions. By the Helmholtz decomposition theorem: $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_\phi$, $\text{rot} \mathbf{u}_0 = 0$ and $\text{div} \mathbf{u}_\phi = 0$, the Eq. (3) and formula (4) become

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} (\mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_\phi) = 2c^2 \text{grad div} \mathbf{u}_0 + c^2 \Delta (\mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_\phi), \quad (5)$$

$$e = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}} \circ \dot{\mathbf{u}} + \frac{1}{2} c^2 \left[(\operatorname{div} \mathbf{u}_0)^2 + \operatorname{rot} \mathbf{u}_\phi \circ \operatorname{rot} \mathbf{u}_\phi \right] + c^2 (\operatorname{div} \mathbf{u}_0)^2. \quad (6)$$

Thus, there exists a deformation field σ , such that one can represent the solenoidal (vector) and irrotational (scalar) fields as a superposition of the real and imaginary field parts at each point. From (5) and (6)

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_0 + \hat{\phi} \in H, \\ \sigma^* &= \sigma_0 - \hat{\phi} \in H, \end{aligned} \quad (7)$$

Where H denotes the quaternion algebra [11], $\sigma_0 = \operatorname{div} \mathbf{u}_0$, $\hat{\phi} = \operatorname{rot} \mathbf{u}_\phi$, $\operatorname{div} \hat{\phi} = \operatorname{div} \operatorname{rot} \mathbf{u}_\phi = 0$ and $\hat{\phi} = \phi_1 \mathbf{i} + \phi_2 \mathbf{j} + \phi_3 \mathbf{k}$, where $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ are the quaternion imaginary units obeying the following relations:

$$\begin{aligned} \mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 &= -1, & \mathbf{ij} &= -\mathbf{ji} = \mathbf{k}, \\ \mathbf{jk} &= -\mathbf{kj} = \mathbf{i}, & \mathbf{ki} &= -\mathbf{ik} = \mathbf{j}. \end{aligned} \quad (8)$$

Because $\mathbf{u}$ belongs to the $\mathbb{C}^3$ class, and upon acting on Eq. (5) by the rotation and divergence operators, we can express it by the system

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \hat{\phi}}{\partial t^2} = c^2 \Delta \hat{\phi}, \\ \frac{\partial^2 \sigma_0}{\partial t^2} = 3c^2 \Delta \sigma_0. \end{cases} \quad (9)$$

The local energy density of the deformation field per mass unit, formula (6), is now expressed by

$$e = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{u}} \circ \hat{\mathbf{u}} + \frac{1}{2} c^2 \sigma \cdot \sigma^* + c^2 \sigma_0^2, \quad (10)$$

where $\hat{\mathbf{u}} = \dot{u}_1 \mathbf{i} + \dot{u}_2 \mathbf{j} + \dot{u}_3 \mathbf{k}$. By adding Eqs. (9) and from (7), the system (9) is expressed by a single partial differential equation:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = c^2 \Delta \sigma + 2c^2 \Delta \sigma_0. \quad (11)$$

In the next section we will show that upon splitting Eq. (11) into the system of wave and Poisson equations, the nonlinear form of the wave equation follows.

3. From the quaternion equation of motion to nonlinear wave and Poisson equations

We consider a stationary wave, $m = Ec^{-2} = \text{const}$. Thus, Eq. (11) can be written as a system:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \Delta + \frac{8\pi m}{m_p t_p^2} \sigma^* \right) \sigma = 0, \\ 2c^2 \Delta \sigma_0 = -\frac{8\pi m}{m_p t_p^2} \sigma \cdot \sigma^*. \end{cases} \quad (12)$$

The wave equation in (12) can be written in the more compacted form

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \sigma + \frac{8\pi m}{m_p c^2 t_p^2} \sigma^* \cdot \sigma = 0, \quad (13)$$

or in the covariant notation

$$\partial_\mu \partial^\mu \sigma + m \frac{8\pi}{\hbar t_p} \sigma^* \cdot \sigma = 0, \quad (14)$$

where $\partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$ and $\hbar = m_p c^2 t_p = 1.0545727 \cdot 10^{-34} [\text{kg m}^2 \text{s}^{-1}]$.

The wave equation in the most compacted form is given by

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m \ell_p \sigma^*) \cdot \sigma = 0 \quad (15)$$

where $\ell_p = 8\pi / (m_p l_p^2) = 4.4205986 \cdot 10^{78} [\text{kg}^{-1} \text{m}^{-2}]$.

System (12) is a hyperbolic-elliptic quaternion representations of a wave equation (11) and has solution of the form:

$$\sigma = \sigma_0 + \hat{\phi} = \sigma_0 + \phi_1 \mathbf{i} + \phi_2 \mathbf{j} + \phi_3 \mathbf{k} \in H. \quad (16)$$

The second equation in (12) is the Poisson equation and describes the irrotational, e.g., compression, potential in the deformation field

$$c^2 \Delta \sigma_0 = -4\pi m \frac{1}{m_p t_p^2} \sigma \cdot \sigma^*, \quad (17)$$

it can be expressed as a function of the local mass density: $\rho = m \sigma \cdot \sigma^* / l_p^3$. Thus (17) becomes:

$$c^2 \Delta \sigma_0 = -4\pi \rho \frac{l_p^3}{m_p t_p^2} = -4\pi \rho G, \quad (18)$$

using data in Table 1, the gravitational constant equals: $G = l_p^3 / (t_p^2 m_p) = 6.674082 \cdot 10^{-11} [\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}]$. Equations (9)-(15) require boundary conditions for a solution.

4. The additional integral equation

The energy is conserved thus, for $t \geq 0$ from Eq. (10) follows

$$\int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{1}{2} \hat{\mathbf{u}} \circ \hat{\mathbf{u}} + \frac{1}{2} c^2 \sigma \cdot \sigma^* + c^2 \sigma_0^2 \right) d^3 \mathbf{r} = \text{const}. \quad (19)$$

In a case of the bounded closed volume $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, the above energy conservation formula becomes

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \hat{\mathbf{u}} \circ \hat{\mathbf{u}} + \frac{1}{2} c^2 \sigma \cdot \sigma^* + c^2 \sigma_0^2 \right) d^3 \mathbf{r} &= \frac{E(\Omega)}{m_p} = \frac{mc^2}{m_p}, \\ \int_{\Omega} \left(\frac{m_p}{2c^2} \hat{\mathbf{u}} \circ \hat{\mathbf{u}} + \frac{1}{2} m_p \sigma \cdot \sigma^* + m_p \sigma_0^2 \right) d^3 \mathbf{r} &= m(\Omega). \end{aligned} \quad (20)$$

The integral (20) can be treated as a **nonlocal boundary condition** for Eqs. (11)-(15).

5. The nonlocal boundary condition

In order to obtain a more simple and useful nonlocal boundary condition, the formula for the local energy density (4), should be expressed by the local energy flux S in the continuity equation

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \text{div } S = 0. \quad (21)$$

Below we derive the quaternion form of the energy flux following the Cauchy schema. Formula (4) upon differentiation becomes

$$\frac{\partial e}{\partial t} = \dot{\mathbf{u}} \circ \ddot{\mathbf{u}} + 3c^2 \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \dot{\mathbf{u}} + c^2 \operatorname{rot} \mathbf{u} \circ \operatorname{rot} \dot{\mathbf{u}} \quad (22)$$

and using Eq. (3) we have

$$\frac{\partial e}{\partial t} = \dot{\mathbf{u}} \circ (3c^2 \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u} - c^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{u}) + 3c^2 \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \dot{\mathbf{u}} + c^2 \operatorname{rot} \mathbf{u} \circ \operatorname{rot} \dot{\mathbf{u}}. \quad (23)$$

Using identities $\operatorname{div} (a\mathbf{u}) = \mathbf{u} \circ \operatorname{grad} a + a \operatorname{div} \mathbf{u}$ and $\operatorname{div} (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{B} \circ \operatorname{rot} \mathbf{A} - \mathbf{A} \circ \operatorname{rot} \mathbf{B}$, the formula (23) becomes

$$\frac{\partial e}{\partial t} - \operatorname{div} [3c^2 (\operatorname{div} \mathbf{u}) \dot{\mathbf{u}} - c^2 (\operatorname{rot} \mathbf{u}) \times \dot{\mathbf{u}}] = 0. \quad (24)$$

Comparing (21) and (24), the energy flux equals $S = c^2 (\operatorname{rot} \mathbf{u}) \times \dot{\mathbf{u}} - 3c^2 (\operatorname{div} \mathbf{u}) \dot{\mathbf{u}}$ or in the quaternionic notation

$$\hat{S} = c^2 \hat{\phi} \times \hat{\mathbf{u}} - 3c^2 \sigma_0 \hat{\mathbf{u}} \quad (25)$$

or equivalently

$$\hat{S} = c^2 (\sigma - \sigma_0) \times \hat{\mathbf{u}} - 3c^2 \sigma_0 \hat{\mathbf{u}}. \quad (26)$$

Thus, the relation (21) can be written in the form of the continuity equation

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div} \hat{S} = 0. \quad (27)$$

Moreover from (27) and the Gauss theorem we obtain

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} e \, d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial e}{\partial t} \, d^3 \mathbf{r} = - \int_{\Omega} \operatorname{div} \hat{S} \, d^3 \mathbf{r} = - \int_{\partial \Omega} \hat{S} \circ \hat{\mathbf{n}} \, d(\partial \Omega), \quad (28)$$

where $\hat{\mathbf{n}}$ is a normal outside vector to the boundary $\partial \Omega$, $\hat{\mathbf{n}} = n_1 \mathbf{i} + n_2 \mathbf{j} + n_3 \mathbf{k}$. Hence the condition

$$\int_{\partial \Omega} \hat{S} \circ \hat{\mathbf{n}} \, d(\partial \Omega) = 0 \quad (29)$$

is equivalent to the law of energy conservation (20) and it is a well posed nonlocal boundary condition for Eqs. (11)-(15).

The Klein-Gordon equation fulfills the laws of special relativity, but contains two fundamental problems [12]. The first one is that it allows negative energies as a solution. As can be seen, the energy computed using formula (20) and solutions of Eq. (15) is per definition always positive. The second problem of the KGE is the indefinite probability density, e.g., it allows negative probabilities. From Eqs. (26) and (27) it follows that such a situation is avoided in the derived wave equation.

6. Conclusions

The alternative, mathematically correct derivation of the quaternion form of the momentum conservation law in an elastic solid is presented. Using the quaternion algebra, we demonstrated the transition from the classical Navier-Cauchy motion equation to its quaternion valued analogue. This quaternionic analogue elucidates the coupling between the irrotational and solenoidal displacement in the deformation field (compression and torsion) and allows for a physical interpretation of the wave mechanics and lets some of the quantum mysteries disappear. Below we compare the classical and quaternion forms of the equation of motion. The last column shows the terms that vanish in Eqs. (3) and (11) but contain information on the oscillation of internal energy due to the deformation caused by the spatially localized wave. These terms are essential to get system (12).

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = c^2 (2\Delta \mathbf{u} - 3 \text{rot rot } \mathbf{u}) + c^2 \text{grad div } \mathbf{u} + \nabla V(t) - \nabla V(t), \left[\frac{\text{m}}{\text{s}^2} \right]$$

$$\left[\begin{array}{c} \text{momentum} \\ \text{change per} \\ \text{mass unit} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{torsion \& compre-} \\ \text{ssion: "wave force"} \\ \text{per mass unit} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{compression force} \\ \text{per mass unit} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{gradient of mech-} \\ \text{anical potential} \\ \text{per mass unit} \end{array} \right]$$

Quaternion analogue: $\Downarrow$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = c^2 \Delta \sigma + 2c^2 \Delta \sigma_0 + \frac{8\pi m}{m_p t_p^2} (\sigma \cdot \sigma^* - \sigma \cdot \sigma^*), \left[\frac{1}{\text{s}^2} \right]$$

$$\left[\begin{array}{c} \text{momentum change} \\ \text{per Planck} \\ \text{particle \& length} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{torsion \& compression:} \\ \text{"wave force" per} \\ \text{Planck particle \& length} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{compression force} \\ \text{per Planck} \\ \text{particle \& length} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{fluctuation of mechani-} \\ \text{cal potential per Planck} \\ \text{particle \& length} \end{array} \right]$$

We derived a spatially localized nonlinear wave function that is equivalent to the particle:

$$\partial_\mu \partial^\mu \sigma + 8\pi \frac{mc^2}{\hbar t_p} \sigma^* \sigma = 0$$

and its essential consequence, the formula for the irrotational potential field (gravity field):

$$\Delta \phi = 4\pi \rho G, \text{ where } \phi = -c^2 \sigma_0.$$

The wave and Poisson equations were derived from assumptions which are independent of the postulates of quantum mechanics. The formulae for the local energy density in its quaternionic form allow obtaining the nonlocal boundary conditions providing the energy conservation. The energy computed using a new wave equation is per definition always positive. The problem of the indefinite probability of the density, present in classical KGE, is ruled out as well.

This derivation is new evidence that there is a well-defined mathematical connection between classical and quantum mechanics. The method allows the self-consistent classical interpretation of the wave phenomena and yields the non-relativistic gravity field. It is obvious that it can be generalized upon neglecting the assumptions of the constant density of mass and the constant Young modulus within the deformation field.

Acknowledgments

This work is supported by a National Science Center (Poland) decision no. DEC-2011/02/A/ST8/00280. The authors are grateful K. Tkacz-Śmiech for invaluable comments.

References (in language original)

1. Landau, L. D., Lifshitz, E. M., Theory of Elasticity, 3rd ed. (Butterworth-Heinemann Elsevier Ltd., Oxford 1986). ISBN 0-7506-2633-X.
2. Maxwell, J. C., A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field, Phil. Trans. R. Soc. Lond. 155 (1865) 459-512, pp. 488 and 493; doi: 10.1098/rstl.1865.0008.
3. Kleinert H., Gravity as a Theory of Defects in a Crystal with only Second Gradient of Elasticity, Ann. Phys. **44** (1987) 117.

4. Kleinert, H. and J. Zaanen, Nematic world crystal model of gravity explaining absence of torsion in spacetime, *Phys. Lett. A* 324 (2004) 361.
5. Danielewski, M., The Planck-Kleinert Crystal, *Z. Naturforsch.* 62a (2007) 564-568.
6. Klein, O., The Atomicity of Electricity as a Quantum Theory Law, *Nature* 118 (1926) 516, doi:10.1038/118516a0.
7. Dirac, P. A. M., *Mathematical Foundations of Quantum Theory*, Ed. Marlow A. R. (Academic, New York 1978), pp. 3,4.
8. Hamilton, W. R., On Quaternions, or on a New System of Imaginaries in Algebra, *The London, Edinburgh and Dublin Phil. Magazine and J. of Sci. (3rd Series)* 25 (1844), pp. 10-13
9. National Institute of Standards and Technology, <http://physics.nist.gov> (2010)
10. Lakes R S, *Elastic freedom in cellular solids and composite materials in Mathematics of Multiscale Materials*, ed. Golden K, et al., IMA vol. 99 (Springer, NY, Berlin 1998), pp. 129-153.
11. Gürlebeck K and Sprößig W, *Quaternionic Analysis and Elliptic Boundary Value Problems* (Akademie-Verlag, Berlin) 1989.
12. Weinberg, S., *The Quantum Theory of Fields* (University Press, Cambridge 1995) Vol. 1. pp. 7,8.

References

1. Landau L. D., Lifshitz E. M. (1986). *Theory of Elasticity*, 3rd ed. Oxford: Butterworth-Heinemann Elsevier Ltd. ISBN 0-7506-2633-X.
2. Maxwell J. C. (1865). A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, 155, 459-512, pp. 488 and 493; doi: 10.1098/rstl.1865.0008.
3. Kleinert H. (1987). Gravity as a Theory of Defects in a Crystal with only Second Gradient of Elasticity, *Ann. Phys.*, 44, 117.
4. Kleinert H., Zaanen J. (2004). Nematic world crystal model of gravity explaining absence of torsion in spacetime, *Phys. Lett. A*, 324, 361-365.
5. Danielewski M. (2007). The Planck-Kleinert Crystal, *Z. Naturforsch.*, 62a, 564-568.
6. Klein O. (1926) The Atomicity of Electricity as a Quantum Theory Law, *Nature*, 118, 516, doi:10.1038/118516a0.
7. Dirac P. A. M. (1978). *Mathematical Foundations of Quantum Theory*, Ed. Marlow A. R. New York: Academic.
8. Hamilton W. R. (1844). On Quaternions, or on a New System of Imaginaries in Algebra. *Edinburgh and Dublin Phil. Magazine and J. of Sci. (3rd Series)* 25, 10-13.
9. National Institute of Standards and Technology. (2010). <http://physics.nist.gov>
10. Lakes R. S. (1998). *Elastic freedom in cellular solids and composite materials in Mathematics of Multiscale Materials*. Springer, NY, Berlin, 99, 129-153.
11. Gürlebeck K. and Sprößig W. (1989). *Quaternionic Analysis and Elliptic Boundary Value Problems*. Berlin: Akademie-Verlag.
12. Weinberg S. (1995). *The Quantum Theory of Fields*. Cambridge: University Press, 1. 7-8.

Анотація. Данілевські М., Сапа Л. Нелінійне рівняння Клейна-Гордона у пружному твердому середовищі Коші-Нав'є. Показано, що кватерніонна теорія поля може бути строго отримана з класичних рівнянь балансу в ізотропному ідеальному кристалі, де передавання імпульсу і енергія поля описуються рівняннями Коші-Нав'є. Теорія представлена у вигляді нелінійного хвильового рівняння та рівняння Пуассона з кватерніоно-значними хвильовими функціями. Отримана кватерніонна форма рівняння Коші-Нав'є зв'язує між собою стиснення і кручення поля зміщень. Хвильове рівняння має вигляд нелінійного рівняння Клейна-Гордона та описує просторово локалізовану

хвильову функцію, еквівалентну частинці. Виведене рівняння хвилі уникає проблем негативної енергії та ймовірності. Дається самоузгоджена класична інтерпретація хвильових явищ та гравітації.

Ключові слова: квантова хвиля, кватерніонна алгебра, рівняння Клейна-Гордона, гравітація.

Одержано редакцією 08.08.2017

Прийнято до друку 20.09.2017

УДК 621.78-978. 004.94

PACS 02. 05.12.31.36.37

A. Gokhman, D. Terentyev, M. Kondria

ISOCHRONAL ANNEALING OF ELECTRON-IRRADIATED TUNGSTEN MODELLED BY CD METHOD: INFLUENCE OF CARBON ON THE FIRST AND SECOND STAGES OF RECOVERING

The evolution of the microstructure of tungsten under electron irradiation and post-irradiation annealing has been modelled using a multiscale approach based on Cluster Dynamics simulations. In these simulations, both self-interstitials atoms (SIA) and vacancies, carbon atoms isolated or in clusters, are considered. Isochronal annealing has been simulated in pure tungsten and tungsten with carbon, focusing on recovery stages I and II. The carbon atom, single SIA, single vacancy and vacancy clusters with sizes up to four are treated as the mobile pieces. Their diffusivities as well as the energy formation and binding energies are based on the experimental data and ab initio predictions and some of these parameters have been slightly adjusted, without modifying the interaction character, on isochronal annealing experimental data. The recovery peaks are globally well reproduced. These simulations allow interpreting the second recovery peak as the effect of carbon.

Key words: Post-irradiation Annealing, Tungsten, Carbon Effect, Cluster Dynamics.

1. Introduction

Tungsten is one of the candidate materials for the plasma facing component of fusion reactors because of its high melting point, high sputtering resistivity, and high temperature strength. Numerous studies have explored the recovery processes of radiation-induced damage in tungsten. Residual electrical resistivity was commonly used as an index of the damage present in materials for the damage recovery study, resulting in the identification of the temperatures and activation energies for different annealing stages. To date, the physical mechanisms governing the damage recovery of tungsten are still controversial. The next progress in study of this phenomenon could be done by Cluster Dynamics (CD) and Adaptive Kinetic Monte Carlo (AKMC) simulations. In our paper CD is applied to simulate the kinetics of point defects in post-irradiation annealing tungsten after electron irradiation. Special attention to effect of carbon is devoted.

2. Discussion of model and input material parameters

The mean field isotropic model on the electron-irradiated and post-irradiation annealing of pure tungsten and tungsten with carbon is applied. Because the distance between point defects expected to be more great than size of them the frustration effect isn't considered. Hence, the CD model for bcc iron with chromium and carbon [1] was modified to study of tungsten with carbon system.

In additional, new CD code takes into account the conclusion [2] on the mobility of vacancy dimer, V_2 , vacancy cluster with size of three and four, V_3 and V_4 .

The lattice parameter of tungsten, a_0 , is taken of 3.1652 °Å [3]; line dislocation density, ρ_d , of 10^{12} m^{-2} [4]; grain size, d , of 50µm; Burgers vector, b , of 2.74 °Å [3]. Capture efficiency for vacancy and (self-interstitial atoms) by dislocation net, Z_v (Z_i) are taken 1(1.2) as in [1]. Recombination radius for all pairs: vacancy-SIA, carbon-SIA, carbon-vacancy, (vacancy-carbon)-vacancy, (vacancy-carbon)-carbon is taken the same and equal to 4.65°Å ($r_{rec} = 4.65^\circ\text{Å}$) as in [1,5]. The migration energy of vacancy, E_{mv} , is taken of 1.5 eV according to experimental data [6]. The migration energy of di-vacancy, E_{m2v} , three-vacancy, E_{m3v} , and four-vacancy, E_{m4v} , is taken as 1.6, 1.7 and 1.8 eV, respectively. Vacancy pre-exponential factors for vacancy clusters and SIA, D_{v0} , D_{2v0} , D_{3v0} , D_{4v0} and D_{i0} are assumed to be of $2 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$. The value of SIA migration energy, E_{mi} , of 0.013eV was calculated in [7]. In our study E_{mi} is taken as the fitting parameter to get the best reproduction of experimental data on recovery of tungsten. Formation energy of SIA is taken of 9.466 eV according to [5]. Temperature dependence of carbon diffusivity into tungsten has been studied experimentally and theoretically in [8-12]. Following to data [8-12], pre-exponential factor, D_{C0} , and migration energy of carbon in tungsten, E_{cm} , are taken in our study as $2 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ and 1.7eV. Value of surface energy, γ , is taken of 3.119 J/m², which is between calculated values [13]: $\gamma = 2.275 \text{ J/m}^2$ for the crystallographic plane (100) and 3.221 J/m² for the crystallographic plane (110). Values of binding energy of SIA dimer, E_{bi} , pairs SIA-carbon, E_{bic} , vacancy-carbon, E_{bvc} , (vacancy-carbon)-vacancy, E_{bvcv} , and (vacancy-carbon)-carbon, E_{bvcc} , are assumed to be 2.2, 1.15, 2.3, 2.3 and 2.3 eV, respectively. For comparison we present here some calculated literature data:

$E_{bi} = 2.12\text{eV}$ [14]; $E_{bvc} = 1.93 \text{ eV}$ [12] and 1.39eV in [15].

3. Master Equation of CD simulations

Master Equation of CD simulations for both electron irradiation and post-irradiation annealing of tungsten is written by the system of ordinary differential equations for concentrations of vacancies (SIA_s) (Eqs. 1-3) and carbon - point defects complexes (Eqs. 4-7):

$$\begin{aligned}
 \frac{dC_{1v(i)}}{dt} = & G_{dpa} - \frac{4\pi r_{rec} (D_v + D_i) C_{1v} C_{1i}}{\Omega_w} - \frac{4\pi r_{rec} (D_c + D_i) C_c C_{1iv(i)}}{\Omega_w} \\
 & - \rho_d Z_v \left(1 + \frac{6(\rho_d Z_v)^{-0.5}}{d} \right) D_{v(i)} \left(C_{1v(i)} - C_{1v(i)}^e \right) - 4\beta_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v(i)} + 4\alpha_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} \beta_{nv(i)}^{v(i)} C_{nv} \\
 & + \sum_{n=3} \alpha_{mv(i)}^{v(i)} C_{nv(i)} + \beta_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} \beta_{ni(v)}^{v(i)} C_{ni(v)} \\
 & - \frac{4\pi r_{rec} (D_c + D_{v(i)})}{\Omega_w} \cdot \left(C_c C_{1v(i)} - (C_c + C_{v(i)}) \exp\left(-\frac{E_{bcv(i)}}{k_B T}\right) \right) - \\
 & k_v \cdot \frac{4\pi r_{rec} D_v C_{1v} C_{vc}}{\Omega_w} \left(1 - \exp\left(-\frac{E_{bvcv}}{k_B T}\right) \right)
 \end{aligned} \tag{1}$$

$$\frac{dC_{2v(i)}}{dt} = 2\beta_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v} - 2\alpha_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - \beta_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} + \alpha_{3v(i)}^{v(i)} C_{3v} - \beta_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v} + \beta_{3v(i)}^{i(v)} C_{3v(i)} \quad (2)$$

$$\frac{dC_{nv(i)}}{dt} = \beta_{(n-1)v(i)}^{v(i)} C_{(n-1)v(i)} + \left(\beta_{(n+1)v(i)}^{i(v)} + \alpha_{(n+1v(i))}^{v(i)} \right) C_{(n+1)v(i)} \quad (3)$$

$$- \left(\beta_{nv(i)}^{v(i)} + \beta_{nv(i)}^{i(v)} + \alpha_{nv(i)}^{v(i)} \right) C_{nv(i)} \quad \text{for } n > 2$$

$$\frac{dC_{vcc}}{dt} = \frac{4\pi r_{rec} D_c}{\Omega_w} \cdot C_c \cdot C_{vc} \left(1 - \exp \left(- \frac{E_{bvcc}}{k_B T} \right) \right) \quad (4)$$

$$\frac{dC_{vcv}}{dt} = \frac{4\pi r_{rec} D_v}{\Omega_w} \cdot C_v \cdot C_{vc} \left(1 - \exp \left(- \frac{E_{bvcv}}{k_B T} \right) \right) \quad (5)$$

$$\frac{dC_{ic}}{dt} = \frac{4\pi r_{rec} (D_c + D_i)}{\Omega_w} \cdot \left(C_c C_i - (C_c + C_i) \exp \left(- \frac{E_{bic}}{k_B T} \right) \right) - \frac{4\pi r_{rec} D_c}{\Omega_w} \cdot C_c \cdot C_{vc} \left(1 - \exp \left(- \frac{E_{bvcc}}{k_B T} \right) \right) \quad (6)$$

$$\frac{dC_{vc}}{dt} = \frac{4\pi r_{rec} (D_c + D_{v(i)})}{\Omega_w} \cdot \left(C_c C_{1v(i)} - (C_c + C_{v(i)}) \exp \left(- \frac{E_{bcv(i)}}{k_B T} \right) \right) - \frac{4\pi r_{rec} D_v C_{1v} C_{vc}}{\Omega_w} \left(1 - \exp \left(- \frac{E_{bvcv}}{k_B T} \right) \right) \quad (7)$$

Here G_{dpa} is electron flux, which equal to ratio of irradiation exposure (in dpa) to irradiation time for the case of electron irradiation and zero for the case of post-irradiation annealing, k_v is equal to one for vacancy and zero for SIA, $D_v (D_i) = D_{v(i)0} \cdot \exp \left(- \frac{E_{mv(i)}}{k_B T} \right)$ is

the diffusivity of free vacancy (SIA), $\Omega_w = \frac{a_0^3}{2}$ is the atomic volume of tungsten, $C_{1i} (C_{li})$ is the concentration of free vacancies (SIA_s), $C_{1v(i)}$ is the thermal equilibrium vacancy (SIA) concentration, $C_{nv(i)}$ is the concentration of vacancy (SIA) clusters contain of n vacancies (SIA_s), C_{vc} is the concentration of vacancy-carbon pairs, C_{vcc} and C_{vcv} are the concentration of (vacancy-carbon)-carbon and (vacancy-carbon)-vacancy complexes; $\beta_{nv(i)}^{v(i)}$ and $(\alpha_{mv(i)}^{v(i)})$ are the absorption and emission coefficients of vacancies V_1, V_2, V_3 and V_4 (SIA) from VC (SIAC), which are calculated similar to [1].

The system of Equations (1-7) describes:

- (1) formation of free vacancy and SIA due electron irradiation;
- (2) vacancy - SIA recombination;
- (3) trapping of vacancy (SIA) by dislocation net;
- (4) trapping of vacancy (SIA) by carbon;
- (5) vacancy (SIA) – recombination;
- (6) absorption of vacancy (SIA) by vacancy cluster (VC) and SIA cluster (SIAC);
- (7) emission of vacancy and SIA from VC and SIAC, respectively;
- (8) absorption (emission) of VC with two, three and four vacancies by (from) VC;
- (9) absorption (emission) of carbon or vacancy by (from) vacancy-carbon complex.

4. Cluster Dynamics simulations

Because the evolution of point defect system in post-irradiation annealed tungsten is the set of kinetics processes with the different characteristic times, the integration of the Master Equation (1-7) is the typical problem of stiff ordinary differential equations. Stiff equation is a differential equation for which classical numerical methods for solving the equation are numerically unstable, unless the step size is taken to be extremely small. Hence, the FORTRAN subroutine package, *LSODE*, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations [16] based on the backward differentiation formula method [17] has been taken as a main program of computer code. Following to [18], the electron irradiation exposure, irradiation time and irradiation temperature are taken as 0.0001 dpa, 43200 seconds and 5 K; the temperature step of isochronal annealing is taken about 5 K, the time of annealing on each step is taken 300 seconds for temperature below 450 K and about 600 seconds for temperature from 450 K to 500 K. CD simulations have been done for the initial concentration of free carbon atoms in tungsten about 100 ppm and for tungsten free from carbon.

It was found that electron irradiation of 0.0001 dpa during 43200 seconds at temperature of 5 K results in formation of Frenkel pairs with concentration about 100 ppm in both pure tungsten and tungsten with carbon. The increase of E_{mi} to 0.163 eV provided the quite good correspondence between experimental data [18] and simulation data in our study. Calculated by CD temperature dependences of concentration of free and clustering vacancies and SIAs; free carbon atoms, vacancy-carbon, SIA-carbon, VC-V and VC-V complexes in the post-irradiation annealed tungsten are presented on Figures (1-3). For the temperature range of isochronal annealing from 4.2 to 100 K (Stage I of the recover spectrum of tungsten [18]), we observe:

(1) decrease of the concentration of free vacancies to value about 29 ppm (57 ppm) for pure tungsten (tungsten with carbon) and of free SIA to zero for both pure tungsten (tungsten with carbon), formation of SIA clusters (SIAC) with concentration of clustering SIA about 21 ppm (10.6 ppm) for pure tungsten (tungsten with carbon), no vacancies clusterization for both pure tungsten (tungsten with carbon) in the temperature range from 55 to 100 K;

(2) formation of carbon-SIA pairs with concentration about 43 ppm and decrease of free carbon atoms to value about 57 ppm for tungsten with carbon in the same temperature range;

(3) no formation of vacancy-carbon, (vacancy-carbon)-vacancy and (vacancy-carbon)-carbon.

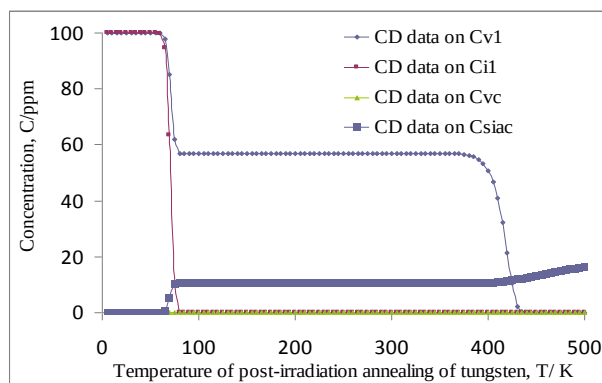


Figure 1. Temperature dependence of concentration of free vacancies (C_{v1}), free SIAs (C_{i1}), clustering vacancies into VC (C_{vc}) and clustering SIA into SIAC (C_{siac}) in post-irradiation annealing tungsten.

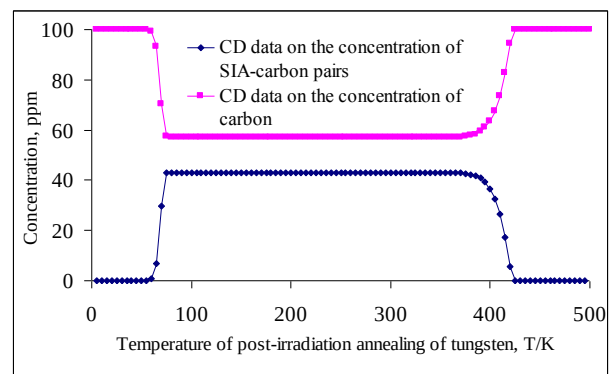


Figure 2. Temperature dependence of concentration of SIA-carbon pairs and carbon in post-irradiation annealing tungsten.

With aim to compare our CD results with experimental data [18], the differential isochronal resistivity recovery has been calculated on Equation (8) according to [18,19]:

$$100\% \cdot \frac{(\rho - \rho_0) / \rho_0}{\ln T - \ln T_0} = 100\% \cdot \frac{(n - n_0) / n_0}{\ln T - \ln T_0} \quad (8)$$

Here ρ and ρ_0 are the specific electrical resistivities; n and n_0 are the total number of Frenkel pairs at temperatures T and T_0 . It was found that our CD simulations reproduce well the recovery peak centered at about 70 K (Fig. 4).

For the temperature range of isochronal annealing from 100 to 500 K (Stage II of the recover spectrum [18]), is observed in CD simulations:

(1) decrease of the concentration of free vacancies to zero, no significant changes of concentration of free SIA, clustering vacancies and SIA for the tungsten with carbon in the temperature range from 360 to 500 K;

(2) decrease of the concentration of carbon-SIA pairs to zero, increase of concentration of carbon atoms to 100 ppm, for the tungsten with carbon in the same temperature range;

(3) no significance change of concentrations of point defects for pure tungsten;

(4) very slight increase of concentration of vacancy-carbon, (vacancy-carbon)-vacancy and (vacancy-carbon)-carbon.

It was found that our CD simulations result in the recovery peak centered at about 420 K for the tungsten with carbon and no recovery peak for pure tungsten (Fig. 4).

Latter confirms the hypothesis of [18] on the role of impurities as traps for point defects on the Stage II.

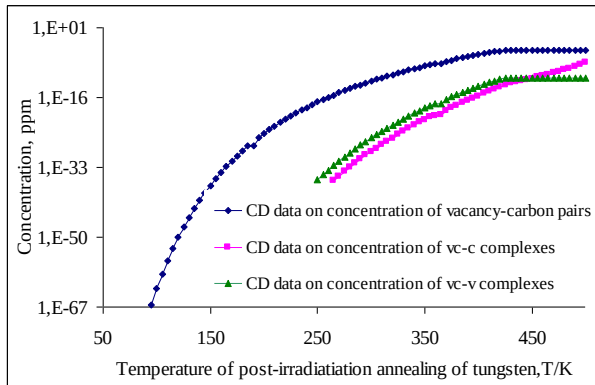


Figure 3. Temperature dependence of concentration of vacancy-carbon pairs, vc-c and vc-v complexes in post-irradiation annealing tungsten.

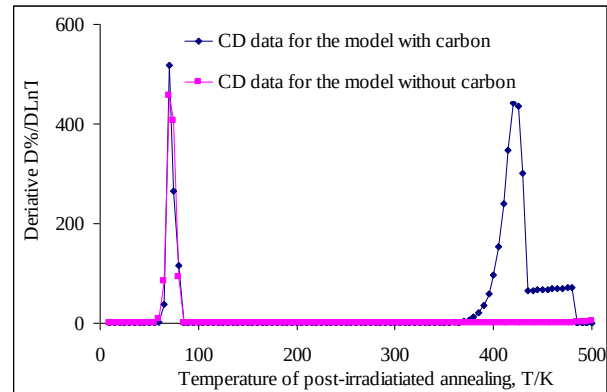


Figure 4. Derivative versus temperature plot of the irradiation recovery data for post-irradiation annealing tungsten.

5. Discussion

The first-order process attributed to recombination of a particularly close SIA-vacancy pair and the second-order process attributed to extensive diffusion of one of these defects, presumably SIA are discussed in [18] to reveal the physical nature of the peak centered about 70K at the Stage I. The conclusion on the mixture of the both first-order and second-order processes with dominating of the second-order process is done in [18]. It corresponds to the recombination of SIA-vacancy pairs and to self-trapping of SIA (formation of SIAC_s) and to trapping of SIA by impurities and some immobile sinks but the nature of them is not revealed in [18].

Let's consider the results of our CD simulation, which complement data [18]:

(1) All point defects are immobile under post-irradiation annealing in the temperature range from 5 to 50K

(2) Values of C_{v1} and C_{i1} are about of 53 and 0 ppm, respectively, for annealing temperature of 100K. Concentration of free vacancies fall downs slowly than SIA at the Stage I. It shows that recombination of SIA-vacancy pair isn't alone process and hence the first-order process doesn't attribute to this Stage.

(3) Values of concentration of SIA_s clustering into $SIAC_s$ and SIA-carbon pairs about 10.5 ppm and 43.0 ppm, respectively, for annealing temperature of 100K. With taking into account that concentration of C_{v1} decreases on 47 ppm, it means that at least 7.5 ppm C_{v1} are trapped by immobile sink, which is dislocation net.

There is a set of observed experimental small recovery peaks [18], which are not reproduced in our CD simulations. The possible reason is the paucity of data points in any of the apparent peaks in the Stage II region, which prohibits meaningful speculation concerning the shape of these peaks [18].

Next CD simulations will describe the stage III of recovering tungsten [18] need in new set of material parameters for the corresponding temperature diapason: 500-1000K.

6. Conclusion

1. We have shown how CD simulations reproduce well Stages I and II of the isochronal resistivity recovery experiment of electron-irradiated tungsten.

2. The carbon doesn't effect on the position of the recovery peak centered about 70K (Stage I) in tungsten with carbon.

3. The taking into account of the carbon presence needs to reveal the reason of recovery peak at the Stage II in tungsten with carbon.

Acknowledgements

This work was supported by the project "Development of theory for radiation damage in W-based alloys for fusion application".

References (in language original)

1. Gokhman A. Simulation of nanostructure evolution under helium implantation in Fe-(2.5-12.5)at% Cr alloys at temperature of 343K / A. Gokhman, S. Pecko and V. Slugeň // Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology – 2015. – Vol. 170 –P . 745-757.
2. Fu C. C. Multiscale modelling of defect kinetics in irradiated iron/ C. C. Fu, J. Dalla Torre, F. Willaime, J.L. Bocquet, A. Barbu // Nature Materials– 2005. – Vol. 4 – P. 68-74.
3. Fikar J. / J. Fikar, R. Schaublin // Nucl. Instr. Methods Phys. Res. – 2009. – Vol. B 267. – P. 3218–3222.
4. Dieter G. E. Mechanical Metallurgy / G. E. Dieter. – London, symmetric edition. : McGraw-Hill Book Company, 1988. – 352p.
5. Li Y. G. / A Cluster Dynamics Model for Accumulation of Helium in Tungsten under Helium Ions and Neutron Irradiation/ Y. G. Li, W. H. Zhou, R. H. Ning, L. F. Huang, Z. Zeng1, X. Ju // Commun. Comput. Phys. . – 2012. – Vol. 11. – P. 1547-1568
6. Satta A. / Vacancy self-diffusion parameters in tungsten: Finite electron-temperature LDA calculations / A. Satta, F. Willaime, Stefano de Gironcoli // Phys. Rev. – 1998. – Vol. B 57 – P. 11184.
7. Derlet P. M. , Multiscale modeling of crowdion and vacancy defects in body-centered-cubic transition metals/ P. M. Derlet, D. Nguyen-Manh, S. L. Dudarev // Phys. Rev. – 2007. – Vol. B 76. – P. 054107

8. Withop, Arthur (1966). The diffusion of carbon into tungsten (PhD Thesis, The University of Arizona, the United States).
9. Aleksandrov L. N. / L. N. Aleksandrov // *Zavodskaya Laboratoriya*. – 1960. – Vol. 25. – P. 925-935.
10. Becker, J. A., E. I. Becker, and Re. G. Brandes // *J. Appl. Phys.* – 1961. – Vol. 32. – P. 411-423.
11. Bushmer C. P. Carbon Self-Diffusion in Tungsten Carbide/ C. P. Bushmer, P. H. Crayton // *Journal of Material Science*– 1971. – No 6 – P. 981-988.
12. Liu Yue-Lin. Dissolution and diffusion properties of carbon in tungsten / Yue-Lin Liu, Hong-Bo Zhou, Shuo Jin, Ying Zhang, Guang-Hong Lu // *J. Phys.* – 2010. – Vol. 22 – P. 445504 (6pp).
13. Tyson W. R. Surface free energies of solid metals: Estimation from liquid surface tension measurements, *Surface Science* / W. R. Tyson, W. A. Miller // *Surface Science*. – 1977. – Vol. 62 – P. 67-276.
14. Becquart C. S., C. Domain, U. Sarkar, and et al. // *J. Nucl. Mater.* – 2010 – Vol. 403 – P. 75 -88.
15. Nguyen-Manh D. Ab-initio Modelling of Point Defect-Impurity Interaction in Tungsten and other Bcc Transition Metals/ D. Nguyen-Manh // *Advanced Materials Research* – 2009. – No 59 – P. 253-256.
16. LSODA is part of the ODEPACK provided by Alan C. Hindmarsh 1984 on the CASC server of the Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA 94551, USA.
17. Gear C.W. Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations / C.W. Gear– NJ. : . Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1971
18. Neely H. H. Keeper and A. Sosin, Electron Irradiation and Recovery of Tungsten / H. Neely, D. W. Keeper, A. Sosin // *Phys. stat. sol.* – 1968. – Vol. 28. – P. 675-682.
19. Ngayam-Happy R. Isochronal annealing of electron-irradiated dilute Fe alloys modelled by an ab initio based AKMC method: Influence of solute–interstitial cluster properties / R. Ngayam-Happy, P. Olsson, C. S. Becquart, C. Domain // *Journal of Nuclear Materials*. – 2010. –Vol. 407. – P. 16–28.

References

1. Gokhman A., Pecko S. and Slugeň V. (2015). Simulation of nanostructure evolution under helium implantation in Fe-(2.5-12.5)at% Cr alloys at temperature of 343K. *Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology*. Vol. 170 –P. 745-757.
2. Fu C. C., Dalla Torre, Willaime F., Bocquet J.L., Barbu A.. (2005). Multiscale modelling of defect kinetics in irradiated iron. *Nature Materials* Vol. 4 – P. 68-74.
3. Fikar J., Schaublin R.. (2009). *Nucl. Instr. Methods Phys. Res Vol. B* 267. – P. 3218–3222.
4. Dieter G. E. (1988). *Mechanical Metallurgy*. – London, symmetric edition. : McGraw-Hill Book Company (in England)
5. Li Y. G., Zhou W. H., Ning R. H., Huang L. F., Zeng Z., Ju X. (2012). Cluster Dynamics Model for Accumulation of Helium in Tungsten under Helium Ions and Neutron Irradiation. *Commun. Comput. Phys.* Vol. 11. – P. 1547-1568
6. Satta A., Willaime F., Stefano de Gironcoli. (1998). Vacancy self-diffusion parameters in tungsten: Finite electron-temperature LDA calculations. *Phys. Rev. Vol. B* 57 – P. 11184.
7. Derlet P. M., Nguyen-Manh D., Dudarev S. L., (2007). Multiscale modeling of crowdion and vacancy defects in body-centered-cubic transition metals. *Phys. Rev. Vol. B* 76. – P. 054107

8. Withop Arthur (1966).). *The diffusion of carbon into tungsten* (PhD Thesis, The University of Arizona, the United States).
9. Aleksandrov L. N. (1960). *Zavodskaya Laboratoriya*. Vol. 25. P. 925-935.
10. Becker, J. A., E. I. Becker, and Re. G. Brandes. (1961). *J. Appl. Phys.* Vol. 32. – P. 411-423.
11. Bushmer C. P., Crayton P. H. (1971). Carbon Self-Diffusion in Tungsten Carbide. *Journal of Material Science No 6* – P. 981-988.
12. Yue-Lin Liu, Hong-Bo Zhou, Shuo Jin, Ying Zhang, Guang-Hong Lu. (2010). Dissolution and diffusion properties of carbon in tungsten. *J. Phys.* Vol. 22 – P. 445504 (6pp).
13. Tyson W. R, Miller W. A. (1977). Surface free energies of solid metals: Estimation from liquid surface tension measurements. *Surface Science*. Vol. 62 – P. 67-276.
14. Becquart C. S., C. Domain, U. Sarkar, and et al. (2010). *J. Nucl. Mater.* Vol. 403 – P. 75 -88.
15. Nguyen-Manh D. (2009). Modelling of Point Defect-Impurity Interaction in Tungsten and other Bcc Transition Metals. *Advanced Materials Research No 59* – P. 253-256.
16. LSODA is part of the ODEPACK provided by Alan C. Hindmarsh 1984 on the CASC server of the Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA 94551, USA.
17. Gear C.W. (1971). Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations. Gear– NJ. : Prentice-Hall, Englewood Cliffs. (in USA)
18. Neely H., Keeper D. W., Sosin A. (1968). Keeper and A. Sosin, Electron Irradiation and Recovery of Tungsten. *Phys. stat. sol.* Vol. 28. – P. 675-682.
19. Ngayam-Happy R., Olsson P., Becquart C. S., Domain C. (2010). Isochronal annealing of electron-irradiated dilute Fe alloys modelled by an ab initio based AKMC method: Influence of solute–interstitial cluster properties. *Journal of Nuclear Materials*. Vol. 407. – P. 16–28

Анотація. Гохман О., Терентьев Д., Кондря М. Ізохронний відпал електронно-опроміненого вольфраму, моделювання за методом кластерної динаміки: вплив вуглецю на першу і другу стадії відновлення. Еволюція мікроструктури вольфраму під впливом електронного опромінення та після опромінюваного ізохронного відпалу була досліджена з використанням мультимасштабного підходу, який базується на моделюванні методом кластерної динаміки. У цих симуляціях розглядаються вільні точкові дефекти (міжвузельні атоми та вакансії), кластери точкових дефектів з розміром до 10000 мономерів, а також кластери, які складаються з атомів вуглецю та точкових дефектів. Зміна дефектної структури у процесі ізохронного відпалу вольфраму без домішок та вольфраму з вуглецем досліджується на першій стадії (температура ізохронного відпалу від 5 до 100 K) та другій стадії (температура ізохронного відпалу від 100 до 500 K) відновлення. Атоми вуглецю, вільні міжвузельні атоми, вільні вакансії та вакансійні кластери з розміром до чотирьох вакансій розглядаються як рухомі об'єкти, дифузія яких відбувається у трьохмірному просторі. Кластери міжвузельних атомів, вакансійні кластери з розміром п'ять та більше вакансій, а також кластери, які складаються з атомів вуглецю та точкових дефектів, розглядаються як нерухомі об'єкти. Вибір параметрів моделі, а саме, значення коефіцієнтів дифузії, енергії формування та енергію зв'язування точкових дефектів та точкових дефектів із атомами вуглецю ґрунтується на даних експерименту та результатів розрахунків з перших принципів. Деякі параметри моделі були додатково скоректовані незначним чином для досягнення найкращого узгодження даних моделювання методом кластерної динаміки та експериментальних даних щодо впливу ізохронного відпалу на відновлення дефектної структури електронно-опроміненого вольфраму. Експериментальний пік відновлення при температурі 70 K на першій

стадії у цілому добре відтворюється у моделюванні методом кластерної динаміки як для вольфраму без домішків, так і для вольфраму з вуглецем. Експериментальні піки відновлення на другій стадії відновлення дефектної структури вольфраму формуються, згідно з нашим дослідженням, завдяки взаємодії точкових дефектів та атомів вуглецю.

Ключові слова: відпал, опромінювання, вольфрам, вуглець, кластерна динаміка.

Одержано редакцією 03.09.2017

Прийнято до друку 15.10.2017

УДК 539.3

PACS 02.70

A. D. Petrov

BEHAVIOR OF MATERIAL WITH A MEMORY OF FORM AND PSEUDOELASTICITY UNDER NONSTATIONARY LOADING OF THE BODY

A nonstationary thermo-elastic-plastic problem is examined for pseudoelastic bodies. The key feature of theory consists in that the diagram of tension of deformations appears as a three-unit broken line and can have a falling down segment. Thus the characteristic points of the diagram depend on the material's temperature and phase state. Such character of the diagram leads to the discontinuous solutions and as a result to the moving boundaries of phase transitions. The example of thin stripe at uniaxonic tension is considered. It is shown that deformation is not homogeneous through the stripe and its development depends on the material's properties. The got results confirm an idea that front of races change of deformation spreads with permanent speed that depends only on mechanical properties of material.

Keywords: thermo-elastic-plasticity, pseudoelasticity, form memory, phase transitions.

1. Introduction

The list of alloys that exhibit pseudoelasticity includes Ni-Ti alloys and various copper, iron, silver and gold-based alloys. Pseudoelasticity is the ability of a material to accumulate deformations upon loading at a high temperature regime and then return to its original state after unloading (through the hysteresis loop). The mechanism of this reduction is the transformation from the martensite phase to the original austenite phase.

Such alloys as NiTi, CuZnAl, CuAlNi, AuCd and others can restore deformations up to 3%. Important characteristics of some of these materials are internal damping, pseudoelasticity and high yield strength. It is noted that the amount of experimental data of high quality of macroscopic behavior of NiTi remains limited.

A characteristic feature of the SPF material diagram under active loading is an area of ideal plasticity (NiTi stress-strain response at 70 ° C [3]). Similar sections are also present at unloading, but at certain temperatures.

2. Local diagram of pseudelastic material

To describe the local relationship between physical quantities, a model of an elastoplastic body with a softening point under active loading and constant temperature was used [1-3]. The temperature field of the body is assumed to be known, being obtained by solving the corresponding problem of nonstationary thermal conductivity or from other sources [2].

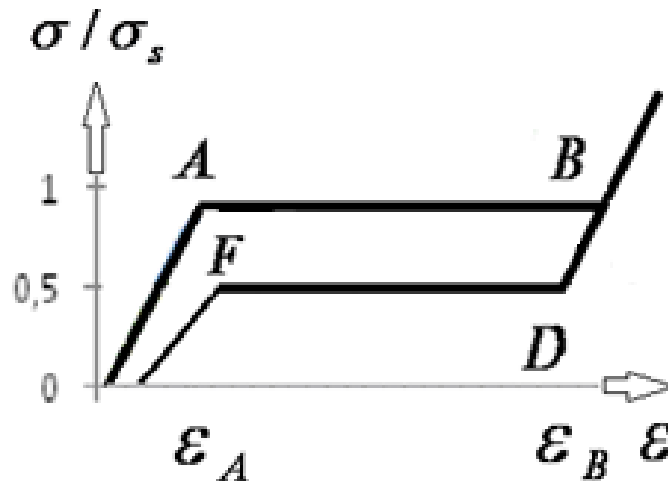


Fig. 1. The local material diagram.

The table below gives the coordinates of the points is obtained on the basis of the processing of the experimental data given in [3].

$T^{\circ}\text{C}$	$A(\varepsilon\%, \sigma(\text{GPa}))$	$B(\varepsilon\%, \sigma(\text{GPa}))$	$D(\varepsilon\%, \sigma(\text{GPa}))$	$F(\varepsilon\%, \sigma(\text{GPa}))$
100	1,00; 0,82	6,50; 0,82	6,05; 0,45	0,55; 0,45
90	1,00; 0,78	6,50; 0,78	6,03; 0,41	0,53; 0,41
80	1,00; 0,67	6,50; 0,67	6,07; 0,38	0,57; 0,38
70	1,00; 0,59	6,30; 0,59	5,81; 0,30	0,51; 0,30
60	1,00; 0,44	6,20; 0,44	5,72; 0,23	0,52; 0,23
50	1,00; 0,42	5,80; 0,42	5,16; 0,15	0,36; 0,15
40	1,00; 0,39	5,70; 0,39	4,88; 0,07	0,18; 0,07
30	1,00; 0,31	5,00; 0,31	4,00; 0,00	0,00; 0,00
20	1,20; 0,28	4,30; 0,28	3,10; 0,00	0,00; 0,00
10	1,40; 0,22	4,30; 0,22	2,90; 0,00	0,00; 0,00
0	2,00; 0,20	3,90; 0,20	1,90; 0,00	0,00; 0,00

When the temperature changes during the loading process, the transition from one diagram to another occurs. Different local diagrams of the material can be used at different points of the body.

3. Statement of the non-stationary problem of the theory of thermo-elastic-plasticity for a pseudoelastic material

Let us determine the velocity of the slow wave from which the plastic deformation field propagates along the one-dimensional body $x \in [0; L]$. On the edge $x=0$ the speed of stretching the sample $v=V_0$ is set and its edge $x=L$ is fixed and here $v=0$.

In general, the required values are: the speed of movement in the axial direction $v(x, t)$ (the movement $u(x, t)$ is determined if necessary by integration $v(x, t)$ over time); axial stress $\sigma(x, t)$; axial strain $\varepsilon(x, t)$ and temperature $T(x, t)$. Here $x \in [0; L], t \in [0, \infty)$.

To determine the unknown quantities, we use a system of equations

$$\rho \cdot \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial \sigma}{\partial x}, \dot{\varepsilon} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial x}, \sigma = \begin{cases} E_1 \varepsilon - K \alpha_T (T - T_0) & \text{npu } \varepsilon \in [0, \varepsilon_s], \\ E_2 (\varepsilon - \varepsilon_s) + \sigma_s - K \alpha_T (T - T_0) & \text{npu } \varepsilon \in [\varepsilon_s, \varepsilon_c], \\ E_3 (\varepsilon - \varepsilon_c) + \sigma_c - K \alpha_T (T - T_0) & \text{npu } \varepsilon \in (\varepsilon_c, \infty), \end{cases} \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + W.$$

Here, ρ – is the density of the material, E_1, E_2, E_3 is the modules of the local material diagram (Figure 1), as well as the coefficient of linear thermal expansion α_T , which can depend on temperature, W – source of heat, which is released as a result of a phase transition.

We pass in system (1) to dimensionless normalized quantities for which we retain the previous notation

$$v \Rightarrow \frac{v}{v_*}, \varepsilon \Rightarrow \frac{\varepsilon}{\varepsilon_{ST}}, \sigma \Rightarrow \frac{\sigma}{\sigma_{ST}}, T \Rightarrow \frac{T}{T_*}, x \Rightarrow \frac{x}{x_*}, t \Rightarrow \frac{t}{t_*}. \quad (2)$$

Here v_*, T_*, x_*, t_* are some given scale values of displacement speed, temperature, spatial coordinate and time. $\sigma_{ST}, \varepsilon_{ST}$ ($\sigma_{ST} = E_1(T_*)\varepsilon_{ST}$) The flow stresses of the material for stress and deformation, determined at the $T = T_*$.

As a result of the transition to dimensionless normalized quantities (2), we rewrite the system of equations (1) this way

$$\frac{\partial v}{\partial t} = k_{1*} \frac{\partial \sigma}{\partial x}, \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = k_{2*} \frac{\partial v}{\partial x}, \sigma = \begin{cases} E_{1*} \varepsilon - K_* \alpha_{T*} (T - T_0) & \text{npu } \varepsilon \in [0; \varepsilon_s], \\ E_{2*} (\varepsilon - \varepsilon_s) + \sigma_s - K_* \alpha_{T*} (T - T_0) & \text{npu } \varepsilon \in [\varepsilon_s; \varepsilon_c], \\ E_{3*} (\varepsilon - \varepsilon_c) + \sigma_c - K_* \alpha_{T*} (T - T_0) & \text{npu } \varepsilon \in (\varepsilon_c; \infty). \end{cases} \quad (3)$$

The notation

$$k_{1*} = \frac{\sigma_{ST} t_*}{\rho x_* V_*}, k_{2*} = \frac{v_* t_*}{x_* \varepsilon_{ST}}, E_{1*} = \frac{E_1(T)}{E_1(T_*)}, E_{2*} = \frac{E_2(T)}{E_2(T_*)}, E_{3*} = \frac{E_3(T)}{E_3(T_*)}, \alpha_{T*} = \frac{\alpha_T T_*}{\varepsilon_{ST}}, K_* = \frac{E_{1*}}{1 - 2\nu}, k_{3*} = t_* \frac{a^2}{x_*^2}. \quad (4)$$

To simplify the calculations, we choose $k_{2*} = 1$. Then we can take

$$v_* = \varepsilon_{ST} \frac{x_*}{t_*}, \quad k_{1*} = \frac{E_1 t_*^2}{\rho x_*^2}$$

We use the finite-difference method. To numerically solve the system (3), we introduce grids with respect to time t and coordinate x as follows [4]

$$\begin{aligned} \omega_t &= \{t_p; t_{p+1} = t_p + \tau; t_0 = 0; p = 0; 1; 2; \dots\}, \\ \omega_h &= \left\{x_i; x_{i+1} = x_i + h; x_0 = 0; h = \frac{L}{n}; i = 0; 1; 2; \dots n\right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Then an explicit difference system equivalent to a complete system of partial differential equations (3) can be written as

$$v^{p+1} = v^p + \tau k_{1*} \lambda(\sigma^p), \quad \varepsilon^{p+1} = \varepsilon^p + \tau \lambda(v^p), \quad (6)$$

$$T^{p+1} = T^p + \tau k_{3*} \mu(T^p) + \tau W^p t_*.$$

We shall formulate the boundary conditions for the heat equation as the conditions for free heat exchange

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0; \quad x = 0; L.$$

From this we obtain the calculated difference formulas on the boundary of the rod

$$T_0^p = (k_2 T_1^p - k_3 T_2^p + k_4 T_3^p) / k_1; \quad T_n^p = (k_2 T_{n-1}^p - k_3 T_{n-2}^p + k_4 T_{n-3}^p) / k_1. \quad (7)$$

The magnitude of the stress at an arbitrary instant of time is determined explicitly by the corresponding formula in (3). In the calculation formulas (6) we introduce the notation for difference operators approximating the first derivatives with respect to the coordinate. They can be set in various ways.

Here, to approximate the derivatives, we obtain the following difference formulas [4]. Equations (7) use the coefficients determined by using the spline function. If cubic B-splines that have a fourth order of approximation are used, then

$$k_1 = 11; k_2 = 18; k_3 = 9; k_4 = 2.$$

In the case of using strained splines that have the fifth order of approximation $k_1 = 11,2646; k_2 = 18,4641; k_3 = 9,1344; k_4 = 1,9349$.

4. Results of numerical experiment

Let's consider a series of numerical results. In Fig. 2, the left column shows the time variation of the deformation and stress fields under active loading. The transition from A to B, austenite to martensite ($A \rightarrow M$) occurs at $V_0 = -1,3v_*$. The right column shows the deformation and stress field changes in time during the reverse transition ($M \rightarrow A$) from D to F at $V_0 = 1,7v_*$. Lines 1 give the distribution of deformations along the length of the rod at fixed instants of time, and lines 2 show the corresponding distribution of stresses in the body.

The obtained results support the assumption that the front of the stepwise change in strain propagates at a constant rate, which depends only on the mechanical properties of the material.

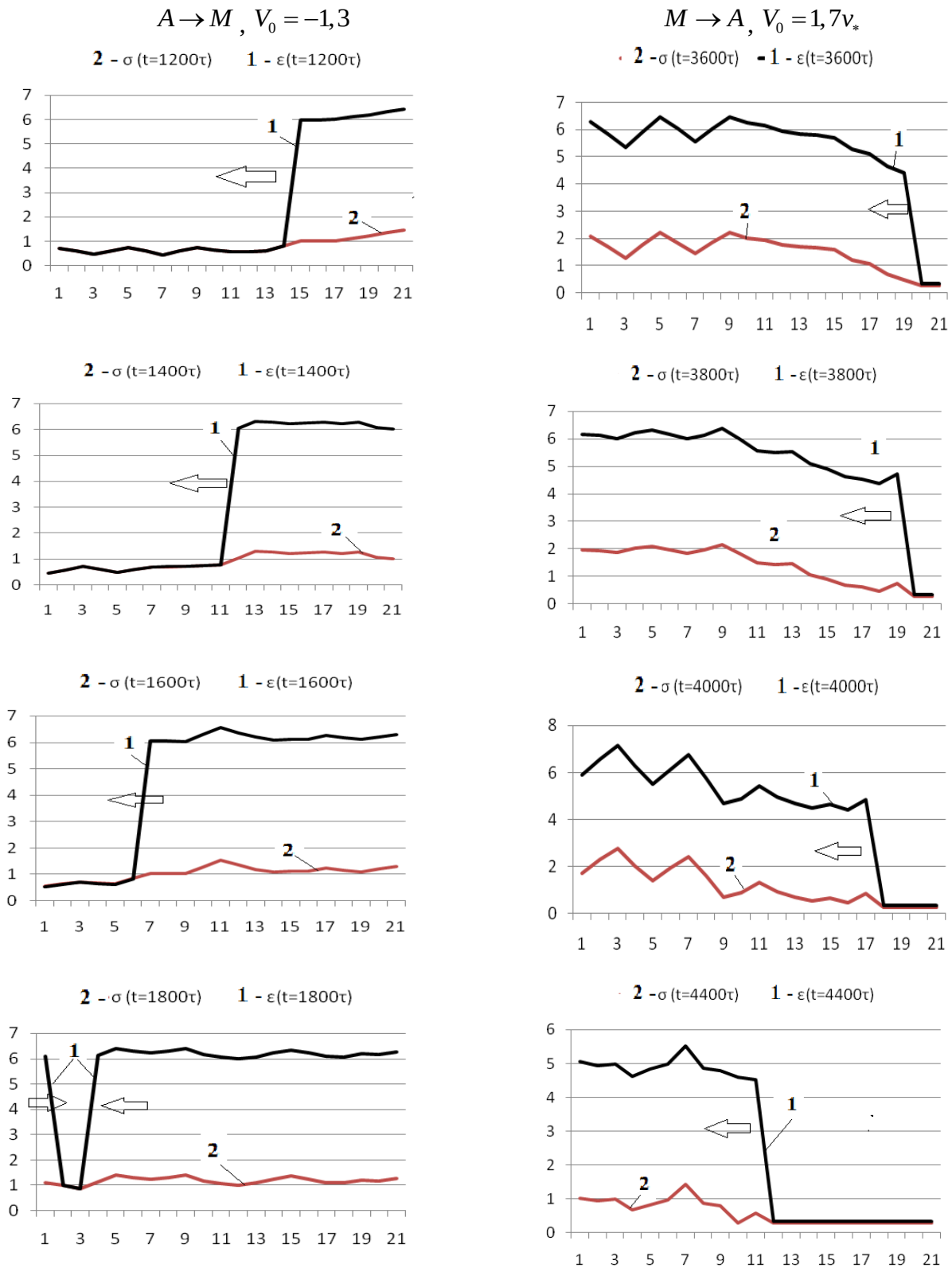


Fig. 2. Distribution of stresses and plastic deformations for different instants of time ($\tau = 0,001$).

The change in the temperature field along the axis of the rod for different instants of time is shown in Fig. 3.

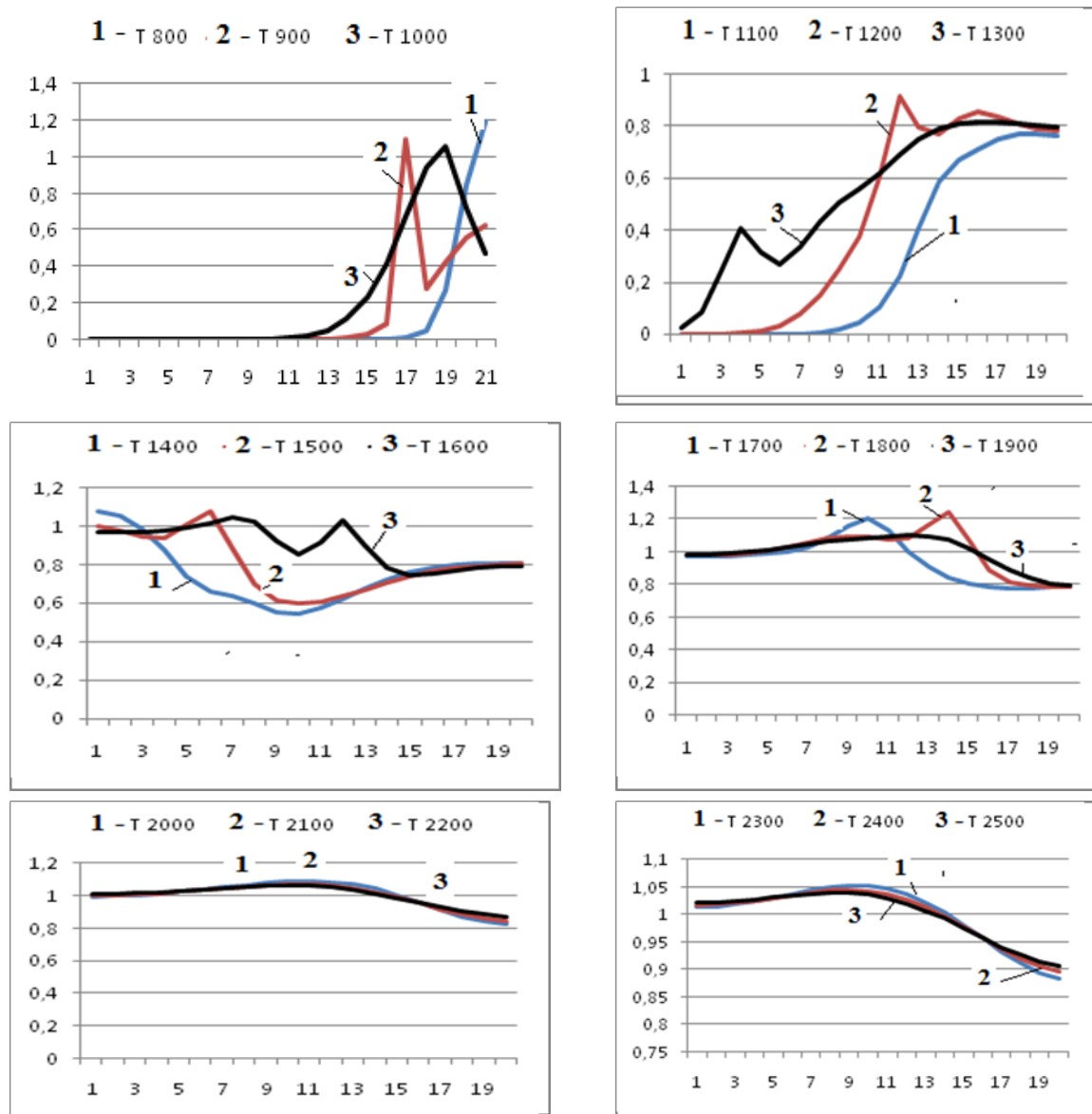


Fig. 3. The time variation in the temperature field due to heat release.

Here, the temperature field arises in connection with the stress-strain state and is due to heat generation during the sequence of phase transitions (jumps in the diagram from Composition A to B). The results are presented in dimensionless form, the temperature at the phase transition point is assumed to be equal to the conventional unit. Numbers 1, 2, 3 indicate the curves for the specified time.

5. Conclusions

A version of the model of behavior of a pseudoelastic material has been developed and experimentally substantiated. In this model, the possibility of quantitative evaluation of the associated interactions between stresses, temperature, deformation and material loading rate is built that is suitable for modeling the continual level.

We obtained the numerical confirmation that the front of the stepwise change in the strain propagates at a constant rate that depends only on the mechanical properties of the material.

Recurrent formulas allow us to obtain the third (for temperature) and fourth (for the velocities of displacements, stresses and deformations) order of approximation of the method with respect to the coordinates.

When constructing the solution of the complete system of thermomechanical equations, all unknown quantities were represented as spline functions [4]. This makes it possible to write more accurate difference expressions for the differential operators that make up the difference schemes and, on the whole, increase the accuracy of the computation by coordinates by at least an order of magnitude.

Given the same accuracy of calculations with the classical finite-difference method, this method allows us to obtain results faster by virtue of the choice of larger steps of integration along the coordinates, which leads to a significant decrease in the number of nodes of the spatial grid used.

References (in language original)

1. Abeyaratne R., Knowles J.K. Evolution of phase transitions. – Cambridge University Press, 2006. – 258 p.
2. Shaw, J. A., Kyriakides, S. Thermomechanical aspects of NiTi. / J. : Mechanics and Physics of Solids, 1995. – No 43, p.1243-1281.
3. Shaw, J. A., Kyriakides, S. On the nucleation and propagation of phase transformation fronts in a NiTi alloy./ J. : Acta Materialia, 1997. – No 45, p.683-700.
4. Стеблянюк П.А. Методи розщеплення в просторових задачах теорії пластичності. – Київ: Наукова думка, 1998. – 304 с.

References

1. Abeyaratne R., Knowles J.K. (2006) Evolution of phase transitions. – Cambridge University Press
2. Shaw, J. A., Kyriakides S. (1995) Thermomechanical aspects of NiTi. J. Mechanics and Physics of Solids 43, 1243-1281
3. Shaw, J. A., Kyriakides S. (1997) On the nucleation and propagation of phase transformation fronts in a NiTi alloy. Acta Materialia 45, 683-700
4. Steblyanko P.A. (1998). Methods of decomposition in space problems of the theory of plasticity. – Kyiv: Naukova dumka (in Russ.)

Анотація. *Петров А. Д. Поведінка матеріалу з пам'яттю форми та псевдопружністю при нестационарному навантаженні тіл. Розглядається нестационарна термо-пружно-пластична задача для тіл з пам'яттю форми. Особливість теорії полягає в тому, що діаграма напруги деформацій в матеріальній точці представляється у вигляді триланкової ламаної і може мати спадаючу ділянку. При цьому характерні точки діаграми залежать від температури і фазового стану матеріалу. Такий характер діаграми призводить до розривних рішень і як наслідок до рухливих меж фазових переходів. Розглянутий приклад тонкої смуги при одноосному розтягуванні. Отримані результати підтверджують думку про те, що фронт стрибкоподібної зміни деформації поширюється з постійною швидкістю, яка залежить лише від механічних властивостей матеріалу і температури.*

Ключові слова: термо-пружно-пластичність, псевдопружність, пам'ять форми, фазові переходи.

Одержано редакцією 05.11.2017

Прийнято до друку 15.12.2017

С. І. Дерев'янка, В. В. Морозович, Я. Д. Король,
О. Ю. Ляшенко, Ю. О. Ляшенко

ТВЕРДОФАЗНІ РЕАКЦІЇ В ПОРОШКОВИХ ПАЯЛЬНИХ СУМІШАХ СИСТЕМИ Cu-Sn

В роботі описано технологію виготовлення масивних зразків інтерметалічних сполук системи Cu-Sn, а саме: δ -Cu₄₁Sn₁₁ та ϵ -Cu₃Sn і подальший процес виготовлення з них порошків і паяльних сумішей. Було підібрано склад і цикл термічної обробки для паяльних сумішей. Було експериментально досліджено вплив різних флюсів на спаювання порошків інтерметалідів δ -Cu₄₁Sn₁₁ та ϵ -Cu₃Sn і проаналізовано зміну фазового складу отриманих паяльних сумішей до та після реакції.

Ключові слова: інтерметалічні сполуки, твердофазні реакції, спікання порошків, рентгеноструктурний аналіз, паяльна суміш, скануюча електронна мікроскопія.

Вступ

Технологія пайки в мікроелектроніці зіткнулася з великими труднощами протягом останніх двох десятиліть через заборону використання добре відомих припоїв на основі свинцю, а також внаслідок значної мініатюризації з'єднань [1]. Серед підходів до підвищення надійності з'єднань виділяється метод з'єднання через проміжну рідку фазу (ПРФ). В цьому методі тонкий, з низькою температурою плавлення, проміжний прошарок металічного матеріалу розташовують між металевими контактами і відпалюють при температурі, вищій, ніж температура плавлення проміжного прошарку, але набагато нижчій, ніж температура плавлення металевих контактів. Після плавлення проміжного прошарку, вся рідина поступово витрачається на утворення продуктів твердофазної реакції на інтерфейсі між твердими контактами і рідиною. Ці продукти реакції можуть мати значно вищу температуру плавлення [2,3], ніж початковий проміжний прошарок, що забезпечує можливість використання з'єднання у високопотужній електроніці. Разом з тим, метод ПРФ має певні недоліки: так товщина з'єднувального прошарку повинна бути достатньо малою, інакше цикл термічної обробки буде доволі довгим [2]. Також необхідно підбирати атмосферу для контролю окислення металевих поверхонь [3]. Наприклад товщина з'єднувального прошарку у вертикальних з'єднаннях трьохвимірних інтегральних схем (англ. 3D Integrated Circuits) становить лише 20 мкм [2,4], але термічний цикл, що необхідний для завершення з'єднання ПРФ, займає декілька годин. У свою чергу звичайний термічний цикл пайки – оплавлення займає лише кілька хвилин [1].

Для подолання цих труднощів було запропоновано модифікацію методу ПРФ [5]: порошок міді (крупність близько 6 мкм) з нанесеним прошарком олова товщиною в 0,5 мікрона був відпалений між двома дисками Cu. За термічного відпалу з температурою 300°C протягом 30 с олово повністю витрачається на утворення інтерметалічної фази Cu₃Sn, що приводить до утворення композитного проміжного прошарку, який складається з термодинамічно стійкої суміші твердого розчину Cu-Sn та проміжної фази Cu₃Sn. Хоча тривалість термічного циклу за використання цього методу значно скоротилася, виникла потреба у прикладанні значно більшого тиску у 10 МПа на поверхню мідної пластинки у порівнянні з методом ПРФ (<0,001 МПа [2]). Також відпал проводився у шкідливій для людини атмосфері мурашиної кислоти. Всі описані

недоліки ПРФ методу з'єднання контактів та його модифікацій спонукають розробку нових підходів до створення надійних з'єднань в мікроелектронній промисловості.

В даній роботі експериментально досліджено один із перспективних методів використання паяльних сумішей – паст, що містять порошки інтерметалічних сполук ϵ - Cu_3Sn та δ - $\text{Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ перемішаних з кислотовмісними флюсами для пайки мідних контактів. Застосування таких паяльних сумішей може суттєво скоротити час, необхідний для утворення з'єднання в порівнянні з ПРФ методом. В розділі 2 проведено опис технології виготовлення порошків інтерметалідів та порошкових паяльних сумішей у системі Cu-Sn. В розділі 3 приведено і обговорено експериментальні результати дослідження спікання і мікроструктури паяльних сумішей, які були термічно оброблені за різних температур.

1. Експериментальні методи отримання паяльних сумішей на основі порошків інтерметалідів системи Cu-Sn

1.1. Експериментальне обладнання

Для вирішення поставлених задач було використано наступне обладнання: рентгенівський дифрактометр типу ДРОН, вакуумний пост ВУП-4, муфельну піч, модернізований скануючий електронний мікроскоп РЕМ-200 з модулем енергодисперсійного рентгенівського мікроаналізу (EPCA).

2.2 Виготовлення порошків інтерметалідів системи Cu-Sn

Для приготування паяльних порошкових сумішей були виготовлені інтерметаліди бінарної системи Cu-Sn з концентраційними складами: δ - $\text{Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ (66.61 мас. % Cu) та ϵ - Cu_3Sn (61.63 мас. % Cu) відповідно з діаграмою стану Cu-Sn (Рис. 1).

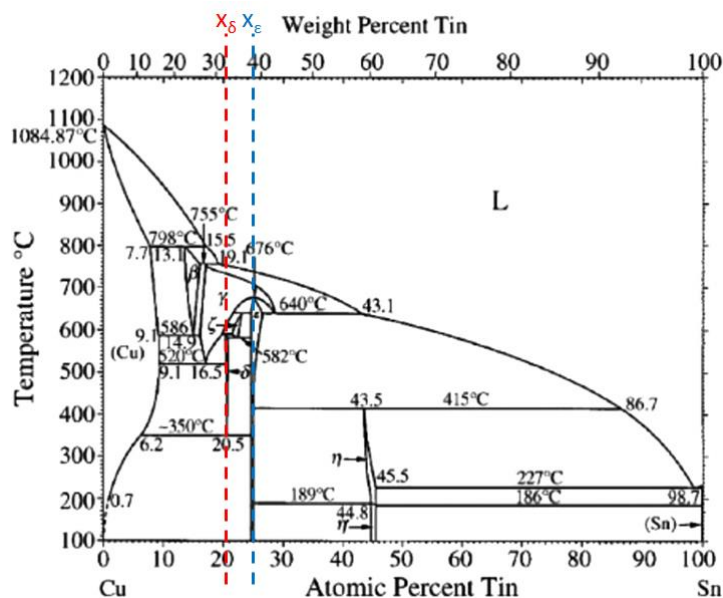


Рис. 1. Діаграма стану системи Cu-Sn [6].

Для виготовлення інтерметалідів використовувались чисті компоненти Cu (99.99%) і Sn (99.98%). Виготовлення δ - $\text{Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ та ϵ - Cu_3Sn фаз відбувалось за наступною процедурою: в тигель з оксиду алюмінію поміщали мідь та олово в відповідних масових пропорціях, після чого тигель з сумішшю цих металів був поміщений в кварцеву трубку. Далі тигель з сумішшю металів був термічно оброблений за температури 1100°C протягом 3 годин в атмосфері Ar (для запобігання

окиснення інтерметалідів). Після термічної обробки зразок було загартовано у воді за температури 20°C для отримання однорідної структури необхідної проміжної фази.

Додатково був виплавлений зразок α -Cu, що є твердим розчином з масовою часткою 13,5% Sn в Cu. Він слугував еталоном для визначення цієї фази методом рентгеноструктурного аналізу в термічно оброблених порошкових сумішах. Для виплавлення зразка α -Cu в тигель помістили 86,5 мас. % міді та 13,5 мас. % олова. Далі суміш була термічно оброблена в атмосфері Ar за температури 1100°C протягом 1 год. Після цього суміш була охолоджена до температури 800°C та загартована у воді температурою 20°C. Далі масивний зразок отриманої α -фази Cu-13,5 мас.%Sn було гомогенізовано в атмосфері Ar за температури 500°C впродовж 7 год.

2.3 Технологія виготовлення паяльних сумішей для пайки мідних контактів

Для отримання порошків інтерметалідів δ -Cu₄₁Sn₁₁ та ϵ -Cu₃Sn відповідні масивні зразки кожної з фаз було подрібнено в керамічній ступі та проведено кілька етапів просіювання через сита з розмірами комірок: 225, 90 та 40 мкм.

Отримані порошки інтерметалідів були досліджені за допомогою СЕМ. Для цього порошки δ -Cu₄₁Sn₁₁ та ϵ -Cu₃Sn фаз було залито компаудом, що після затвердіння дозволяє проводити дослідження зразків на СЕМ. Зображення на Рис. 2а отримано в зворотньо-розсіяних електронах. На Рис. 2а зображено порошок фази δ -Cu₄₁Sn₁₁ (світлі зони), що оточений компаудом (темні зони). На Рис. 2б наведено зображення у вторинних електронах порошку ϵ -Cu₃Sn фази у компауді.

Аналіз зображення отриманого зразку показав, що максимальні розміри порошинок δ -Cu₄₁Sn₁₁ та ϵ -Cu₃Sn фази є приблизно рівними 40 мкм (Рис. 2а), а мінімальні розміри порошинок - 5 мкм (Рис. 2б).

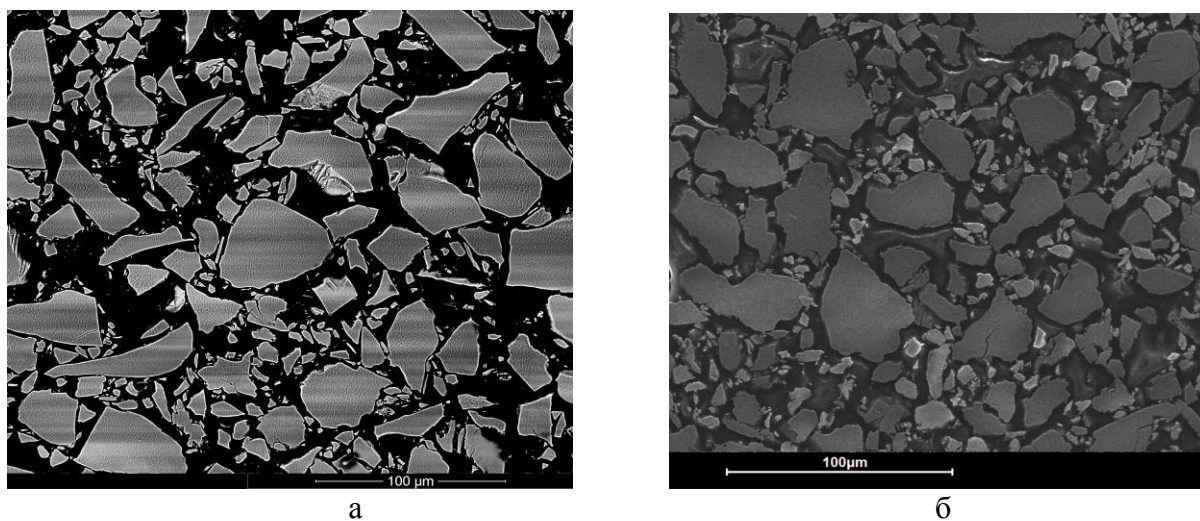


Рис. 2. СЕМ зображення порошків: а) δ -Cu₄₁Sn₁₁ фази; б) ϵ -Cu₃Sn фази, що зняті в режимі зворотньо-розсіяних електронів.

Перед виготовленням паяльних сумішей порошки інтерметалідів проходили 30-ти хвилинний процес травлення в розчині суміші соляної кислоти HCl та ZnCl₂, що необхідно для очищення поверхні зразків та зняття оксидної плівки. Після цього порошки були ретельно промиті в етиловому спирті для видалення залишків травника і висушені на повітрі. З порошків інтерметалідів було виготовлено чотири види паяльних сумішей (Зразки 1-4) шляхом додавання флюсів до порошків та термічної обробки (Табл. 1). Додавалося два типи флюсів: комерційний каніфольний м'яко-активований

(КМА) флюс (Weld Team Decapant Liquid, Lincoln Electric Group) (далі КМА флюс) та розведена до 85% ортофосфорна кислота (H_3PO_4) (див. Табл. 1).

Таблиця 1

Зразки паяльних сумішей

Назва	Порошкові інтерметаліди	Тип флюсу	Частка флюсу (мас. %)
Зразок 1	$\delta-Cu_{41}Sn_{11}$	КМА	17,5
Зразок 2	$\delta-Cu_{41}Sn_{11}$	розчин H_3PO_4	12,3
Зразок 3	25 % - Cu_3Sn , 25 % - Cu 50 % - $Cu_{41}Sn_{11}$	КМА	14,8
Зразок 4	25 % - Cu_3Sn , 25 % - Cu , 50 % - $Cu_{41}Sn_{11}$	розчин H_3PO_4	19,7

В роботі проведено рентгеноструктурний аналіз отриманих порошків інтерметалічних фаз $\delta-Cu_{41}Sn_{11}$ та $\epsilon-Cu_3Sn$ та паяльних сумішей на основі цих порошків відпалених за різних температур. Дифрактограми еталонів фаз $\delta-Cu_{41}Sn_{11}$, $\epsilon-Cu_3Sn$ та Cu брались з бази даних International Committee of Diffraction Database [7]. Порівняння дифрактограм проміжних фаз та їх еталонів підтвердили вміст у відповідних порошках лише $\delta-Cu_{41}Sn_{11}$ (Рис. 3а) та $\epsilon-Cu_3Sn$ фаз (Рис. 3б). На рисунках лінії дифрактограм віднормовані до 100 одиниць та рознесені по інтенсивності.

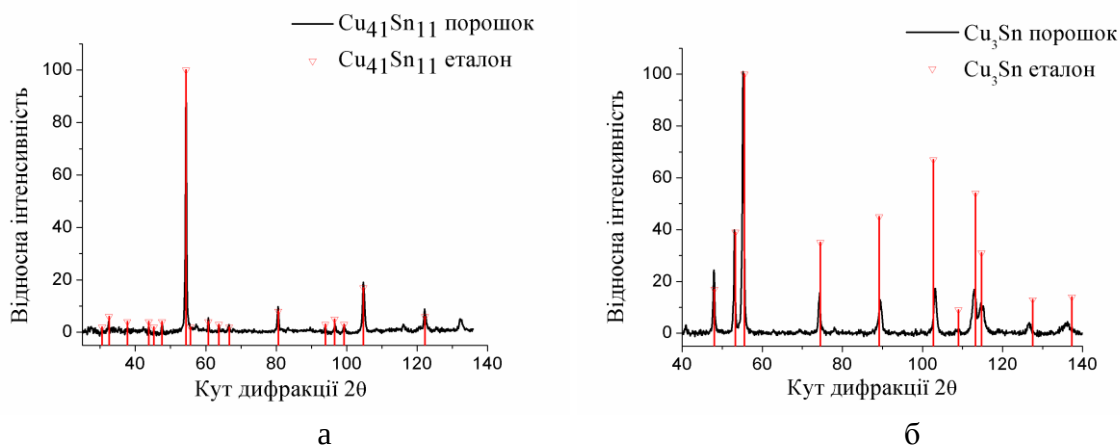


Рис. 3. Дифрактограми порошків інтерметалідів а) $\delta-Cu_{41}Sn_{11}$ та еталону $\delta-Cu_{41}Sn_{11}$ фази; б) $\epsilon-Cu_3Sn$ та еталону $\epsilon-Cu_3Sn$ фази.

Також був проведений локальний енергодисперсійний рентгенівський спектральний аналіз вихідного порошку $\delta-Cu_{41}Sn_{11}$ фази (Рис. 4).

На Рис. 4 зображено область Spectrum 3, в якій було проведено енергодисперсійний рентгенівський спектральний аналіз всередині окремої порошокинки $\delta-Cu_{41}Sn_{11}$ фази. Було визначено, що масова частка Cu становить 66,38 %, що відповідає у межах похибки $\delta-Cu_{41}Sn_{11}$ фазі згідно діаграми стану (Рис. 1).

Також було проведено рентгеноструктурний аналіз α -фази $Cu-13,5$ мас. % Sn та зроблено порівняння з дифрактограмою від мідної пластинки, що використовувалася для виготовлення порошків інтерметалідів (Рис. 5). Видно, що піки на дифрактограмі зразка α -фази $Cu-13,5$ мас. % Sn зміщені вліво відносно ліній Cu , що пояснюється розчиненням олова в ґратці міді.

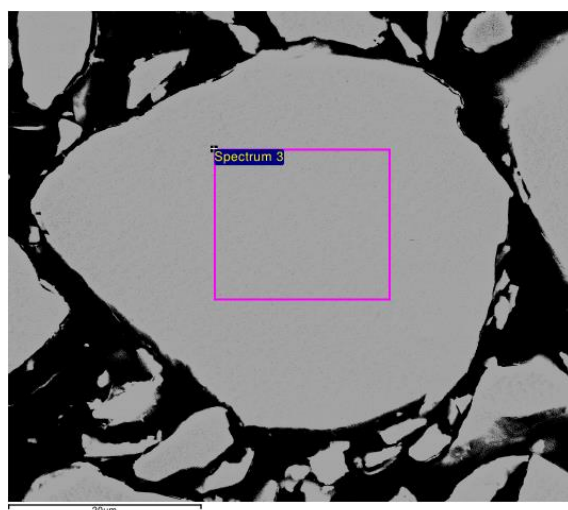


Рис. 4. Область енергодисперсійного рентенівського спектрального аналізу порошку $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$

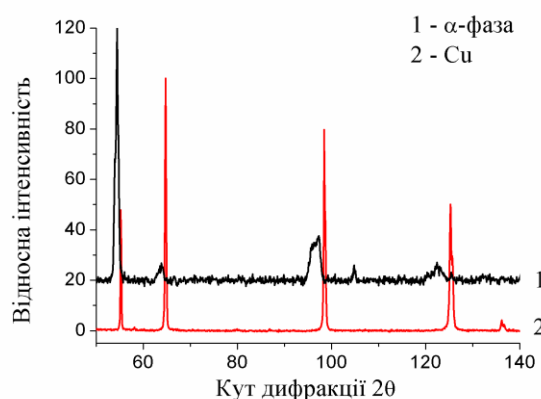


Рис. 5. Дифрактограми α -фази Cu-13,5 мас.%Sn (лінія 1) системи Cu-Sn та еталонного зразка Cu (лінія 2).

3. Результати дослідження паяльних сумішей для пайки мідних контактів

Термічна обробка паяльних сумішей проводилась за такою технологією: кожен тип паяльних сумішей був поміщений в окремий тигель з оксиду алюмінію. Далі паяльні суміші були розігріті до 130°C і проходили термічну обробку протягом 10 хвилин на повітрі для активації флюсу та його часткового випаровування. Потім вони були поміщені в кварцеву трубку з атмосферою Ag та термічно оброблені в муфельній печі протягом 1 години за температури 350°C . Далі Зразки 1-4 були нагріті до 500°C і витримані за цієї температури протягом 1 години, після чого повільно охолоджені до кімнатної температури.

Було проаналізовано дифрактограми Зразків 1 і 2 на наявність наборів ліній, що відповідають різним фазам системи Cu-Sn в паяльних сумішах після термічної обробки (Рис. 6).

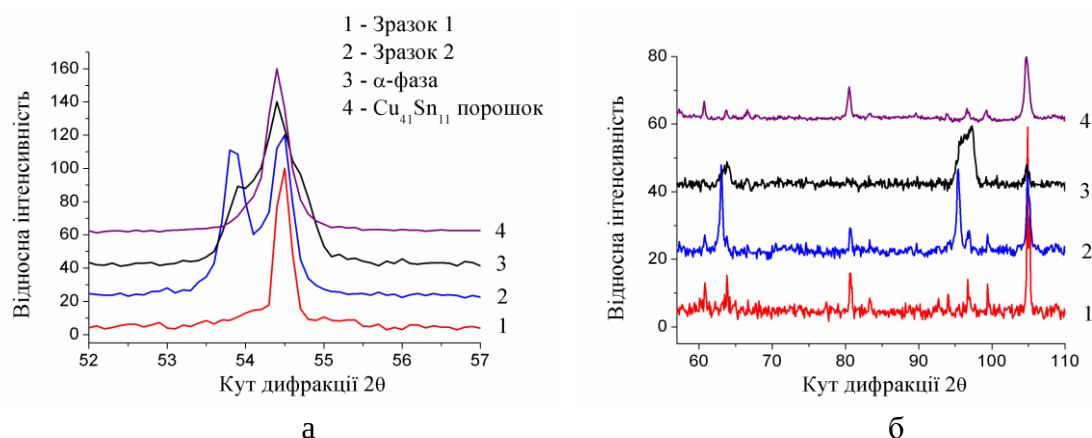


Рис. 6. Дифрактограми Зразка 1 (лінія 1), Зразка 2 (лінія 2), α -фази Cu-13,5 мас.%Sn (лінія 3) та порошку інтерметаліду $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ (лінія 4) за кутів дифракції:
а) $52\text{--}57^\circ$; б) $57\text{--}110^\circ$.

Аналіз дифрактограм, що зображені на Рис. 6, дозволяє зробити висновок, що після термічної обробки Зразка 1 (лінія 1) фаза $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ не розпадається на інші фази на відміну від Зразка 2 (лінія 2). В порошку інтерметаліду Зразка 2 виникли додаткові

піки: 53.8° , 63° , 95.5° , 120.3° . Було встановлено, що додаткові піки належать твердому розчину системи Cu-Sn, з вмістом Sn не менше 13.5 масових відсотків (див. Рис. 6).

В роботі також проведено аналіз дифрактограм Зразка 3 та Зразка 4 (Рис. 7).

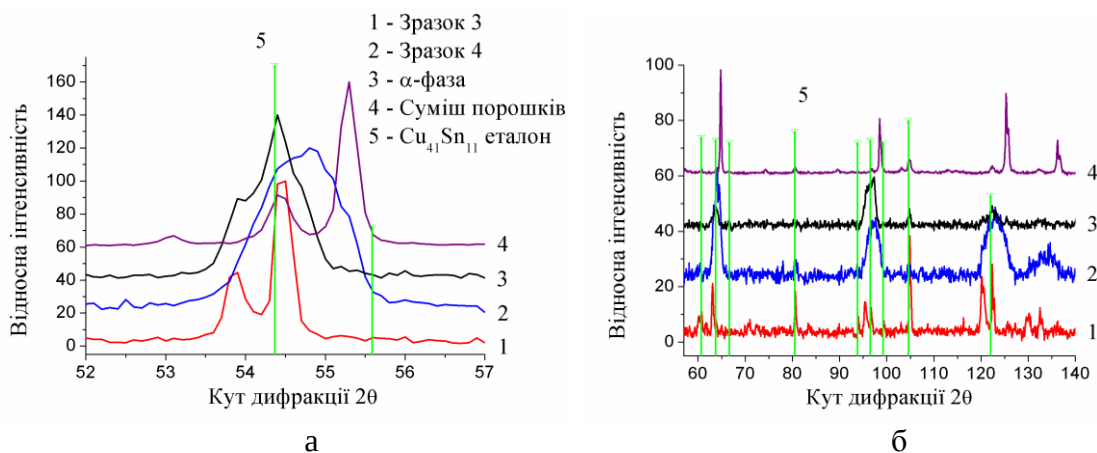


Рис. 7. Дифрактограми Зразка 3 (лінія 1), Зразка 4 (лінія 2), α -фази Cu-13,5 мас.%Sn системи Cu-Sn (лінія 3), суміші порошків інтерметалідів, що входять в склад Зразка 3 і 4 та штрих-діаграми еталона фази δ -Cu₄₁Sn₁₁ за кутів дифракції: а) $52-57^\circ$; б) $57-140^\circ$.

На Рис. 7 проведено порівняння дифрактограм Зразка 3 (лінія 1) та Зразка 4 (лінія 2). Видно, що після термічної обробки Зразка 3 виникли додаткові піки: 53.8° , 63° , 95.5° . Було з'ясовано, що вони належать твердому розчину системи Cu-Sn, з вмістом Sn не менше 13.5 масових відсотків (лінія 1, Рис. 7). Решта піків дифрактограми Зразка 3 належать фазі δ -Cu₄₁Sn₁₁. Аналіз дифракційних піків Зразка 4 вказує на наявність в ньому суміші неперервного ряду твердих розчинів системи Cu-Sn та інтерметаліду δ -Cu₄₁Sn₁₁.

Також було проведено локальний енергодисперсійний рентгенівський спектральний аналіз (далі EPSCA) Зразка 2 в точках показаних на Рис. 8б.

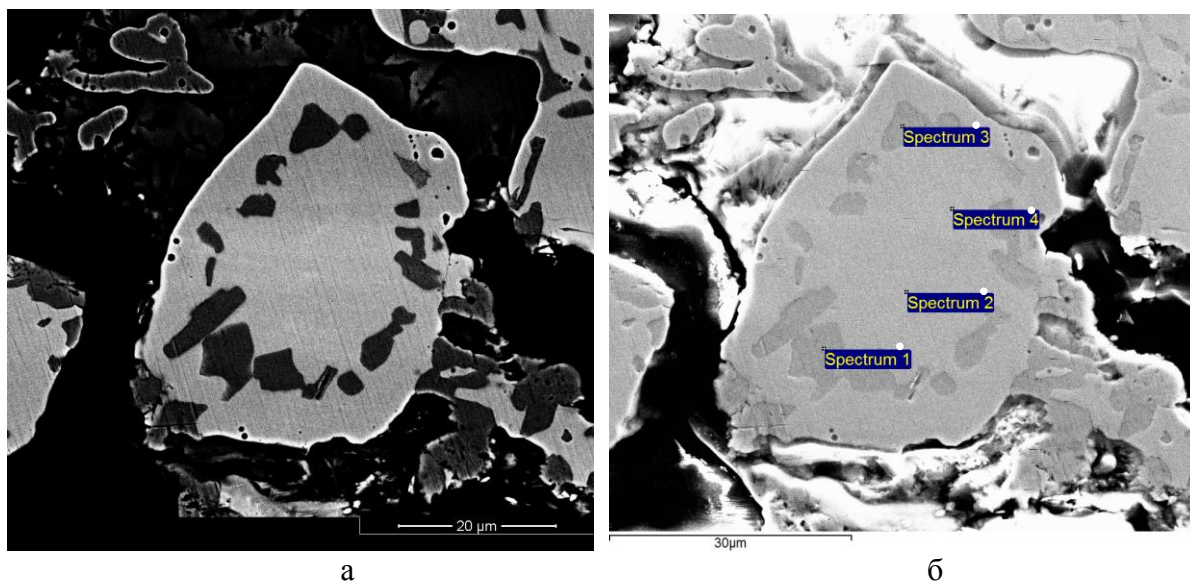


Рис. 8. СЕМ зображення ділянки Зразка 2: а) в режимі зворотньо-розсіяних електронів б) з позначенням точок проведення EPSCA.

На Рис. 8а приведено зображення частинки $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази в Зразок 2. На зображенні частинки спостерігаються світлі і темні ділянки, що відповідають різним фазам системи Cu-Sn. В Табл. 2 проведено результати ЕРСА в деяких характерних точках цієї частинки (див. Рис. 10б).

Згідно з Табл. 2 частинка складається з двох фаз: $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази в точках spectrum 2 і spectrum 4 (світлі ділянки порошинки) та α -фази в точках spectrum 1 і spectrum 3 (темні ділянки порошинки), що свідчить про те, що в об'ємі $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази (Зразок 2) утворюється α -фаза системи Cu-Sn в результаті термічної обробки.

Таблиця 2

Результати спектрального аналізу Зразок 2

Назва точки дослідження	Масова концентрація Cu (%)	Масова концентрація Sn (%)	Фаза
Spectrum 1	83.61	16.39	2-фазна зона: α -фаза + $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$
Spectrum 2	66.33	33.67	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$
Spectrum 3	82.89	17.11	2-фазна зона: α -фаза + $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$
Spectrum 4	66.04	33.96	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$

Для більш точного аналізу розпаду $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази на проміжних етапах термічної обробки було проведено рентгеноструктурний аналіз додаткових зразків 5-11 (Табл. 3). Всі зразки перед виготовленням паяльних сумішей проходили процедуру протравлювання поверхні та промивки (див. Розділ 2.3).

Таблиця 3

Список додаткових зразків та їх термічної обробки

Назва	Порошкові інтерметаліди	Тип флюсу	Термічна обробка	Результати дифрактометрії
Зразок 5	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$	Відсутній	Відсутня	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$
Зразок 6	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$	H_3PO_4 14,9 мас. %	10 хвилин, 130°C, на повітрі.	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ Cu
Зразок 7	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$	H_3PO_4 14 мас. %	1. 10 хвилин, 130°C, на повітрі. 3. 5 хвилин, 350°C, в атмосфері Ar.	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ Cu
Зразок 8	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$	H_3PO_4 12,6 мас. %	1. 10 хвилин, 130°C, на повітрі. 2. 1 година, 350°C, в атмосфері Ar.	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ α -фаза
Зразок 9	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$	КМА 18,4 мас. %	1. 10 хвилин, 130°C, на повітрі.	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ Cu
Зразок 10	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$	КМА 14,1 мас. %	1. 10 хвилин, 130°C, на повітрі. 2. 5 хвилин, 350°C, в атмосфері Ar.	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ Cu
Зразок 11	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$	КМА 14,9 мас. %	1. 10 хвилин, 130°C, на повітрі. 2. 1 година, 350°C, в атмосфері Ar.	$\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ Cu

Було проведено порівняння дифрактограм Зразків 6-8 (Рис. 9а) та Зразків 9-11 (Рис. 9б) з еталонами Cu та $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази.

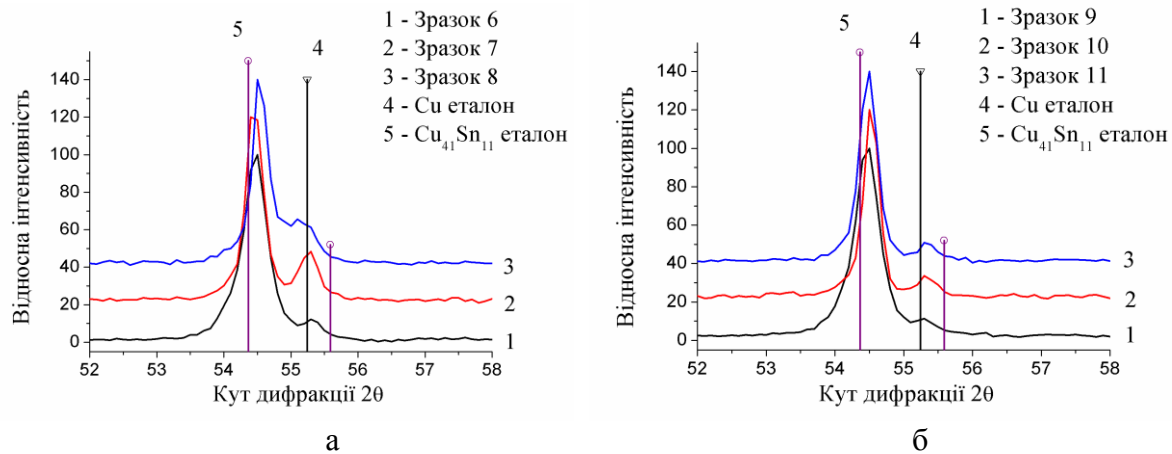


Рис. 9. Дифрактограми: а) Зразка 6 (лінія 1), Зразка 7 (лінія 2), Зразка 8 (лінія 3), еталона Cu (лінія 4) та еталона $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази (лінія 5); б) Зразка 9 (лінія 1), Зразка 10 (лінія 2), Зразка 11 (лінія 3), еталона Cu (лінія 4) та еталона $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази (лінія 5) за кутів дифракції 52°-58°.

Проведений аналіз дифрактограм Зразків 5, 6 та 9 показав, що мідь в цих зразках з'являється на етапі термічної обробки за температури 130°C протягом 10 хвилин на повітрі. Також було встановлено (див. Рис. 9а), що за наступної термічної обробки (Зразок 8, що отриманий з використанням ортофосфornoї кислоти в якості флюсу) протягом 1 години за температури 350°C основні піки Cu починають зміщуватись вліво, що вказує на утворення твердого розчину Sn в Cu. В Зразках 9-11 (Рис. 9б, Табл. 3) із співставлення величин піків видно, що після термічної обробки $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази з використанням КМА флюсу також утворюється Cu, але в меншій кількості, ніж в Зразках 6-8 (Рис. 9а), в яких у якості флюсу використовується ортофосфорна кислота. При подальшій термічній обробці за 350°C протягом 1 години Зразка 11 (див. Рис. 9б), утворення твердого розчину Sn в Cu не спостерігається.

Висновки

В роботі запропоновано спосіб виплавки інтерметалічних фаз $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ та $\epsilon\text{-Cu}_3\text{Sn}$ системи Cu-Sn, технологію виготовлення з них порошків та паяльних сумішей. Описано етапи термічної обробки паяльних сумішей і досліджено зміну фазового складу в залежності від температури спікання сумішей і типу використаного флюсу.

Показано, що після етапу протравлювання порошкових сумішей в розчині $\text{HCl}+\text{ZnCl}_2$ фазовий склад зразків не змінюється. Перший етап термічної обробки паяльних сумішей $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази за температури 130°C призводить до утворення прошарку Cu на поверхнях порошків як у випадку використання в якості флюсу ортофосфornoї кислоти, так і у випадку застосування КМА флюсу. При подальшій термічній обробці за температури 350°C в зразках з використанням ортофосфornoї кислоти в якості флюсу збільшується кількість міді та виникає твердий розчин олова у міді. В зразках з КМА флюсом частка міді не змінюється і твердий розчин олова у міді не утворюється.

Розташування піків на дифрактограмі паяльної суміші, що складається з порошків $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази та КМА флюсу, після 1 години відпалу за температури 350°C та 1 години за температури 500°C вказує на наявність лише $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази. У випадку термічної обробки паяльної суміші, що складається з $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази та ортофосфornoї

кислоти в якості флюсу, спостерігається утворення суміші неперервного ряду твердих розчинів різної концентрації системи Cu-Sn та інтерметаліду $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$.

Аналіз дифрактограм зразків, що складаються з суміші порошків фаз в пропорціях 25 % - Cu_3Sn , 25 % - Cu (~50 мкм), 50 % - $\text{Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ і обох типів флюсу (КМА та ортофосфорної кислоти), після термічної обробки вказує на наявність піків $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ фази та твердого розчину Sn в Cu з масовою концентрацією першого не більше 13,5 %.

В майбутніх дослідженнях планується розглянути використання розроблених паяльних сумішей для пайки мідних контактів.

Подяки

Робота виконана в рамках прикладної держбюджетної теми МОН України (номер державної реєстрації: 0117U000577).

Список використаної літератури:

1. Tu K. N. Electronic thin-film reliability / K. N. Tu. – Los Angeles: University of California, 2010. – 412 с.
2. Bosco N. S. Strength of joints produced by transient liquid phase bonding in the Cu–Sn system / N. S. Bosco, F. W. Zok // Acta Materialia, – Vol. 53 (7) – 2005, P. 2019–2027.
3. Li J. F. Interfacial reaction in Cu/Sn/Cu system during the transient liquid phase soldering process / J. F. Li., P. A. Agyakwa, C. M. Johnson // Acta Materialia, – 59(3), – 2011, P. 1198-1211.
4. Chen C. Vertical interconnects of microbumps in 3D integration / C. Chen, D. Yu, K. N. Chen // MRS Bulletin, – 40(03) – 2015, P. 257-263.
5. Liu. X Thermally stable $\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}$ composite joint for high-temperature power device / X. Liu, S. He, H. Nishikawa // Scripta Materialia, – 110 – 2016, P. 101–104.
6. Massalski T. Binary Alloy Phase Diagrams, Vol. 3 / T. B. Massalski, H. Okamoto, P. R. Subramanian, L. Kacprzak. – ASM International, Metals Park, OH, 1996.
7. International Centre for Diffraction Data (ICDD), 12 Campus Blvd., Newtown Square, PA 19073–3273 U.S.A., 2011.

References

1. Tu K. N. (2010) Electronic Thin-Film Reliability. Los Angeles: University of California.
2. Bosco N. S., Zok F. W. (2005). Strength of joints produced by transient liquid phase bonding in the Cu–Sn system, Acta Materialia, 53(7), 2019–2027.
3. Li, J. F., Agyakwa, P. A., Johnson, C. M. (2011). Interfacial reaction in Cu/Sn/Cu system during the transient liquid phase soldering process. Acta Materialia, 59(3), 1198-1211.
4. Chen, C., Yu, D., Chen, K. N. (2015). Vertical interconnects of microbumps in 3D integration. MRS Bulletin, 40(03), 257-263
5. Liu, X., He, S., Nishikawa, H. (2016). Thermally stable $\text{Cu}_3\text{Sn}/\text{Cu}$ composite joint for high-temperature power device. Scripta Materialia, 110, 101-104.
6. Massalski T. B., Okamoto H., Subramanian P. R., Kacprzak L. (1996) Binary Alloy Phase Diagrams, Vol. 3. ASM International, Metals Park, OH.
7. International Centre for Diffraction Data (ICDD), 12 Campus Blvd., Newtown Square, PA 19073–3273 U.S.A., 2011.

Summary. *Derevianko S. I., Morozovych V. V., Korol Ya. D., Liashenko O. Yu., Lyashenko Yu. O. The solid state reactions in powder soldering mixtures of Cu-Sn system*
This paper describes a method of production of massive samples of intermetallic compounds

of Cu-Sn system, namely $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ and $\varepsilon\text{-Cu}_3\text{Sn}$, and the subsequent process of production of powders and solder mixtures from these bulk compounds. Various compositions of powders and fluxes and heat treatment cycles were selected for experimental study of solder mixtures sintering. Influence of various fluxes on the $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ and $\varepsilon\text{-Cu}_3\text{Sn}$ intermetallic powder sintering and phase transformation inside the solder mixtures are studied and discussed.

Pre-alloyed $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ powder inside solder pastes prepared by mixing this powder and commercial RMA flux do not undergo phase transformation after 1 hour annealing at 350°C and 1 hour annealing at 500°C .

Location of peaks on the diffractogram indicates only presence of $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ phase. Instead, the same heat treatment of the solder pastes made on the basis of orthophosphoric acid results in the phase transformations inside $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ powder – formation of the continuous set of Cu-Sn solid solutions with maximum 13,5 wt% Sn.

X-ray diffraction analysis of two types of annealed solder pastes, which consist of powder mixtures with composition 25 % - Cu_3Sn , 25 % - Cu, 50 % - $\text{Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ and different fluxes (commercial RMA flux and orthophosphoric acid) indicates the presence of $\delta\text{-Cu}_{41}\text{Sn}_{11}$ phase and Cu-Sn solid solution with maximum 13,5 wt% Sn.

Keywords: X-ray diffraction analysis, intermetallic compounds, solid state reactions, sintering of powders, soldering mixture, scanning electron microscopy.

Одержано редакцією 27.09.2017

Прийнято до друку 30.10.2017

УДК 538.9

PACS 61.72.Qq, 64.60.A-, 64.60.De, 64.70.kd, 85.40.Ls

О. А. Бобров, М. О. Пасічний, О. Ю. Ляшенко, А. М. Гусак

РОЗМІРНИЙ ЕФЕКТ РОЗПОДІЛУ ЧАСІВ ДО ВІДМОВИ ТА ЧАСІВ ПЕРЕТВОРЕННЯ

Відмова двовимірних паяних контактів обмеженого розміру рівнозначна до фазового перетворення у обмеженій двовимірній системі. Моделюються розмірні залежності розподілів часу до відмови та часу перетворення. Небезпека ранніх відмов внаслідок розширення розподілу часу до відмови робить вивчення розмірного ефекту важливим питанням мікроелектроніки. Розширення розподілу часу перетворення є суттєвим у фазових перетвореннях ансамблів мікро- та наночастинок. Зі зменшенням розміру розподіл часів до відмови та часів перетворення змінюється з нормального розподілу до Пуассонівського через логнормальний розподіл чи розподіл Вейбулла. Знайдені аналітичні наближення перехідних режимів.

Ключові слова: розмірний ефект, час до відмови, 2-вимірний фазовий перехід, розподіл ймовірності, кінетика Колмогорова-Аврамі, flip-chip технологія.

1. Вступ

Як вперше помітив Кінг-Нінг Ту, відмови мікроелектронних пристроїв та фазові перетворення першого роду (наприклад, кристалізація аморфних тонких плівок) мають

багато спільного [1-3]. Справді, фазові перетворення першого роду відбуваються внаслідок зародження та наступного росту зерен нової фази в об'ємі материнської фази. Кінетика такого явища зазвичай описується рівняннями КЖМА (Колмогорова, Джонсона, Меля, Аврамі) [4-6]. Часова залежність перетвореної частки повного об'єму виражається S-кривою:

$$X(t) = 1 - \exp(-k \cdot t^\beta), \quad (1)$$

де β – це показник Аврамі, який залежить від розмірності простору, типу зародкоутворення (гомогенне чи гетерогенне) та механізму росту. Відповідно швидкість росту перетвореної частки наступна:

$$\frac{dX}{dt} = k \cdot \beta \cdot t^{\beta-1} \cdot \exp(-k \cdot t^\beta). \quad (2)$$

Цей вираз є математично подібним до розподілу Вейбулла, який часто використовується для апроксимації розподілу часів до відмови компонентів інтегральних мікросхем:

$$f(t) = \frac{\beta}{\eta} \cdot \left(\frac{t}{\eta}\right)^{\beta-1} \cdot \exp\left(-\left(\frac{t}{\eta}\right)^\beta\right). \quad (3)$$

Вказана аналогія потребує окремого детального дослідження. У цій роботі ми обмежимося лише наступними міркуваннями. Можна уявити будь-яку відмову, як перехід від фази «прилад працює» до фази «прилад не працює належним чином». При цьому майбутній «кіллер» пристрою (наприклад пора, що утворилася внаслідок електроміграції у інтегральній схемі) зароджується у деякому місці та росте, чи переміщується у інше місце [7] аж до відмови. Взагалі «ріст», починаючи від зародження та закінчуючи відмовою, може відбуватися у деякому багатовимірному просторі параметрів.

Для мікроелектроніки є дуже важливим не тільки передбачити середній час до відмови, але й дисперсію часів до відмови, і навіть форму розподілу часів до відмови. У багатьох випадках проблема ранньої відмови може бути критичною. Така проблема внаслідок розширення розподілу часів до відмови стає все більше важливою зі зменшенням розмірів мікроелектронних пристроїв (зокрема, розмірів паяних контактів) [8].

Кінетика фазових переходів у малих частинках була вивчена у [9-11]. Однак в основному була досліджена зміна S-кривої КЖМА, що означає усереднення над нескінченною кількістю частинок. Як і очікувалося, було отримано зменшення показника Аврамі до 1 із зменшенням розмірів (див. нижче). Вивчення фазового переходу ансамблю однакових за розміром частинок показує збільшення розкиду часу перетворення для найменших частинок. В зазначених статтях був вивчений розмірний ефект для середнього часу перетворення [9-11]. Наскільки нам відомо, розмірний ефект для дисперсії та інших характеристик розподілу ще не досліджений.

У роботі ми розглядаємо випадок, коли відмова та фазове перетворення не лише подібні, але збігаються насправді. Власне ми розглядаємо відмову одного контакту між поверхнею міді та кулькою припою [1]. Основним режимом відмов таких контактів є зародкоутворення млинцеподібних пор на поверхні розділу мідь/олово та їх латеральний ріст до досягнення певної частки поверхні розділу. Перша спроба дослідження розмірного ефекту для такого типу відмови була здійснена у [8]. Однак, основним критерієм відмови там вважалося 100% заповнення контакту фазою пустоти. Такий критерій є некоректним у випадку дискретних схем чисельного розв'язку. Крім того, статистика відмов у роботі [8] була недостатньою. У даній роботі ми моделюємо розмірно-залежний розподіл часу до відмови а також наступні його характеристики – середнє значення, девіацію, коефіцієнти асиметрії та ексцесу.

2. Загальні закономірності

Ми розглядаємо двовимірний $L \times L$ контакт (L є лінійним розміром) з двовимірними порами. Як і у класичному КЖМА підході, ми вводимо два параметри швидкості – частота зародження на одиницю площі $\nu \left[\frac{1}{c \cdot m^2} \right]$ і швидкість латерального росту пори $V \left[\frac{m}{c} \right]$, які ми приймаємо постійними. Таким чином, ми маємо задачу з трьома розмірними параметрами ν , V , L . Комбінація перших двох параметрів ν та V дає характеристичну довжину $l = \left(\frac{V}{\nu} \right)^{1/3}$ як у [9], яка описує середній розмір зерен нової фази (пор у нашому випадку), що досягається, поки не відбувається перекриття. Очевидно, безрозмірний розмір системи λ та безрозмірна швидкість латерального росту G ,

$$\lambda \equiv \frac{L}{l} = \left(\frac{\nu L^3}{V} \right)^{1/3}, \quad G = \frac{V}{\nu L^3} = \frac{1}{\lambda^3}, \quad (4)$$

повинні визначати розмірну залежність розподілу часів до відмови. Два граничні випадки – макровипадок, $\lambda \gg 1$ ($G \ll 1$), та мікровипадок, $\lambda \ll 1$ ($G \gg 1$), мають аналітичні описи (див. нижче). Комбінація трьох параметрів дає три пов'язані характеристичні часи:

$$t_0 = \frac{1}{\nu L^2}, \quad t_1 = \left(\frac{1}{\nu V^2} \right)^{1/3}, \quad t_2 = \frac{L}{V}, \quad t_1 = (t_0 t_2)^{1/3}. \quad (5)$$

Тут, t_0 є середнім часом між успішними спробами зародження на повній площі контакту, t_1 – це характерний час заповнення основного простору зародженням та ростом пор, t_2 – це час повного заповнення системи однією порою, що росте у випадку одиничного зародження на всьому контакті (чи перетворення всієї системи до єдиного зерна – єдиної пори шляхом росту одного зародку). Зазначимо, що відношення характеристичних часів $\frac{t_0}{t_2} = G = \frac{1}{\lambda^3}$, та $\frac{t_0}{t_1} = G^{2/3} = \frac{1}{\lambda^2}$ виражається через безрозмірний розмір або безрозмірну швидкість. Ми будемо використовувати безрозмірний час $\tau = \frac{t}{t_0} = t \nu L^2$ та розмірний і безрозмірний середні часи до відмови $\langle t \rangle$, $\langle \tau \rangle$, розмірну

та безрозмірну девіації $\sqrt{\langle (t - \langle t \rangle)^2 \rangle}$, $\sqrt{\langle (\tau - \langle \tau \rangle)^2 \rangle}$. Ми також визначимо типи розподілів часів до відмови для граничних випадків:

1. Макроконтакт («великий» розмір L та/чи «мала» швидкість V , та/чи «висока» частота зародження ν) $G \ll 1$ ($\lambda \gg 1$) $\leftrightarrow t_0 \ll t_1 \ll t_2$. У цьому випадку зародження відбувається набагато швидше, ніж ріст, тому відмова відбувається після численних подій зародження та після незначного у порівнянні з розмірами контакту збільшення розмірів зародків. В результаті, макроскопічні контакти заповнюються внаслідок однорідних випадкових подій зародження. Середній час до відмови $\langle t \rangle$ не залежить від розміру контакту L . Відповідно, безрозмірний середній час до відмови $\langle \tau \rangle$ пропорційний квадрату розміру контакту L : $\langle \tau \rangle = \langle t \rangle \nu L^2 \propto L^2 \propto \lambda^2 \propto G^{-2/3}$, тобто логарифм безрозмірного середнього часу до відмови при $G \rightarrow 0$ ($\ln G \rightarrow -\infty$) є лінійною функцією від G із нахилом $(-2/3)$.

Навпаки, девіація часу до відмови у граничному випадку макроконтракту має бути розмірно-залежною. Можна оцінити M – кількість зароджених пор у двовимірному випадку – як:

$$M \approx \left(\frac{L}{l} \right)^2 = \lambda^2 = G^{-2/3}. \quad (6)$$

Час до відмови для великих систем є постійним, тому він є інтенсивним параметром. Відповідно до загальних закономірностей теорії флуктуацій, девіація часу до відмови (як і для інших інтенсивних величин) для великих систем пропорційна до $\frac{1}{\sqrt{M}} : \sqrt{\langle (t - \langle t \rangle)^2 \rangle} \propto \frac{1}{\sqrt{M}} \propto G^{1/3} \propto \frac{1}{L}$. Тому девіація безрозмірного часу до відмови:

$$\sqrt{\langle (\tau - \langle \tau \rangle)^2 \rangle} = \frac{\sqrt{\langle (t - \langle t \rangle)^2 \rangle}}{t_0} \propto \nu L^2 \frac{1}{\sqrt{M}} \propto G^{-2/3} G^{1/3} = G^{-1/3}. \quad (7)$$

2. Мікроконтакт («малий» розмір L чи/та «велика» швидкість V , чи/та «низька» частота зародкоутворення ν) $G \gg 1 \leftrightarrow t_0 \gg t_1 \gg t_2$. Випадок $G \gg 1$ відображає рідкі події випадкового зародження з наступним швидким ростом та заповненням контакту однією порою. Час покриття залежить від розміру та після інкубаційного часу зародження пори, ріст буде швидким, тому контакт буде найбільш ймовірно заповнений єдиною порою, а не численними зародженими порами. Статистика відмов у цьому випадку співпадає із статистикою зародження та є Пуассонівського типу (тобто ймовірність існування системи без зародження впродовж часу $t \in p_0(t) = \exp(-t/t_0)$, ймовірність зародження впродовж нескінченно малого проміжку часу $dt \ll t_0$ є $p_1(dt) = dt/t_0$. Це означає, що середнє значення часу до відмови у цьому граничному випадку співпадає із середнім значенням часу очікування першого зародкоутворення, $\langle t \rangle = t_0 = \frac{1}{\nu L^2}$ у розмірних одиницях, та $\langle \tau \rangle = t_0 \nu L^2 = 1$ для безрозмірного середнього часу до відмови. Девіація розподілу Пуассона співпадає з середнім значенням: $dev(t) = t_0 = \frac{1}{\nu L^2}$ та $dev(\tau) = 1$. Таким чином, теоретичне передбачення для $G \gg 1$ є: $\langle \tau \rangle \rightarrow 1, \sqrt{\langle (\tau - \langle \tau \rangle)^2 \rangle} \rightarrow 1 (\langle t \rangle \rightarrow \frac{1}{\nu L^2}, \sqrt{\langle (t - \langle t \rangle)^2 \rangle} \rightarrow \frac{1}{\nu L^2})$.

3. Чисельна модель

Для вивчення поведінки системи у просторі параметрів між зазначеними граничними випадками ми використали просту двовимірну модель, яка включає в себе безрозмірні параметри: безрозмірний час $\tau = t/t_0 = t\nu L^2$ та безрозмірні координати $0 < \chi = x/L < 1, 0 < \gamma = y/L < 1$.

Алгоритм:

1. Ми розігруємо події на квадратному зразку одиничних безрозмірних розмірів 1×1 , що містить N^2 комірок, розбиваючи як горизонтальні, так і вертикальні сторони квадрата на N відрізків: $d\chi = d\gamma = 1/N$.

2. Кожна комірка безрозмірної площі може бути у двох станах – старому та новому. На початку всі знаходяться у старому стані.

3. На кожному часовому кроці $d\tau$ ми а) випадковим чином вибираємо частину комірок і випробовуємо ймовірність зародження за Пуассонівським розподілом та б) одночасно здійснюємо зростання вже існуючих зерен нової фази.

3а. Ми знаходимо ймовірність утворитися n зернам нової фази – $p(n)$, зі всіх N^2 комірок, протягом часового інтервалу $d\tau$ формально як біноміальний розподіл,

$$p(n, d\tau) = \frac{(N^2)!}{(n)!(N^2 - n)!} (d\tau)^n (1 - d\tau)^{N^2 - n}, \text{ але фактично як Пуассонівський розподіл,}$$

$$p(n, d\tau) = \frac{(d\tau)^n}{(n)!} \exp(-d\tau), \text{ оскільки тільки випадки } n \ll N^2, \text{ забезпечують реально}$$

ненульові ймовірності. Потім ми випадково обираємо дійсне число подій зародження (створюючи випадкове число на інтервалі $(0,1)$ та розділяючи цей інтервал на підінтервали $p(n, dt)$). Тоді ми випадково вибираємо n комірок з повного зразка $N \times N$. Серед них ми залишаємо ті комірки, які ще не були перетвореними та перетворюємо їх відмічаючи положення «центру нового зерна» та час зародження.

3б. У випадку вдалого зародкоутворення комірка (i, j) , в деякий час $\tau(i, j)$, стає центром кола перетворення, що розповсюджується зі швидкістю G , так, що в будь-який момент часу $\tau > \tau(i, j)$ будь-яка комірка всередині кола радіусу $G \cdot (\tau - \tau(i, j))$ із центром у комірці (i, j) є у новому стані.

4. Ми вибираємо критерій відмови, як деяку частку X_t перетвореної площі. У даному дослідженні наведений критерій $X_t = 0.5$ (також були випробувані та порівняні X_t від 0.1 до 0.9).

5. Момент часу, в який частка перетвореної площі досягає X_t , записується як $TTF(k, G)$, де k – номер запуску. Після запуску однакової програми M разів ($M = 100000$), ми отримали масив часів до відмови, який оброблявся для визначення густини розподілу ймовірності, розподілу ймовірності, середнього часу до відмови, девіації, асиметрії.

Часовий крок має забезпечувати вимогу: $dt \ll \frac{1}{vL^2} \Rightarrow d\tau \ll 1$. З іншого боку, особливо для випадку макроконтакту, часовий крок має бути набагато менше, ніж час перекриття: $dt \ll t_1 = \left(\frac{1}{vV^2}\right)^{1/3}$, $d\tau \ll \frac{t_1}{t_0} = \left(\frac{1}{G}\right)^{2/3}$. Ці вимоги виконані у нашому моделюванні.

4. Результати та обговорення

Всі отримані гістограми часу до відмови апроксимовані нормальним, логнормальним розподілами, двопараметричним та трипараметричним розподілами Вейбулла, Пуассонівським та змінним (зміненим) Пуассонівським розподілами (Рис. 1). До того ж ми знайшли власний кумулятивний розподіл, що, здається, добре працює (краще ніж логнормальний розподіл чи розподіл Вейбулла). Підібраний нами авторський розподіл (тобто інтеграл від густини імовірності від мінімального значення випадкової величини до якогось значення між максимумом і мінімумом), що змінюється від 0 до 1, наступний:

$$F(\tau, \alpha, \beta) = p\left(\frac{e^\alpha}{\tau^2} + e^\beta + 1, \tau\right), \quad (8)$$

де:

$$p(k, \tau) = \frac{\gamma(k, \tau)}{\Gamma(k)}, \quad \Gamma(k) = \gamma(k, +\infty), \quad \gamma(k, \tau) = \int_0^{\tau} x^{k-1} e^{-x} dx. \quad (9)$$

Ми отримали цей розподіл напівінтуїтивно, тут ми не намагаємося вивести його, поки що це лише наближення. Окрім цієї нової апроксимації, використовувалися наступні залежності для апроксимації «звичайних» розподілів (тут верхній регістр символу означає кумулятивну функцію розподілу F , нижній регістр f – густину імовірності, $f = \frac{dF}{dt}$):

Логнормальний розподіл:

$$f(\tau, m, \sigma) = \frac{1}{x \cdot \sigma \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{(\ln(\tau) - m)^2}{2 \cdot \sigma^2}\right). \quad (10)$$

Трипараметричний розподіл Вейбулла:

$$F(\tau, \eta, \beta, \gamma) = \begin{cases} 1 - \exp\left(-\left(\frac{\tau - |\gamma|}{|\eta|}\right)^{|\beta|}\right), & \tau > |\gamma| \\ 0, & \tau \leq |\gamma| \end{cases} \quad (11)$$

Двопараметричний розподіл Вейбулла:

$$F(\tau, \eta, \beta) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{\tau}{|\eta|}\right)^{|\beta|}\right). \quad (12)$$

Модифікований розподіл Пуассона:

$$F(\tau, \alpha, \beta) = \begin{cases} 1 - \exp(-|\alpha| \cdot (\tau - |\beta|)), & \tau > |\beta| \\ 0, & \tau \leq |\beta| \end{cases} \quad (13)$$

Розподіл Пуассона:

$$F(\tau, \alpha) = 1 - \exp(-|\alpha| \cdot \tau). \quad (14)$$

Характеристики нормального розподілу, яким апроксимовано результати комп'ютерного експерименту, приведено на Рис. 2 та Рис. 3. Залежність $\ln(<\tau>)$ від $\ln(G)$ на Рис. 2 апроксимована гіперболою:

$$\ln(<\tau>) = \sqrt{(0.32 \ln(G) + 0.004)^2 + 0.366^2} - 0.32 \ln(G) - 0.004. \quad (15)$$

Залежність $\ln(\text{dev}(\tau))$ від $\ln(G)$ на Рис. 3 апроксимована гіперболою:

$$\ln(\text{dev}(\tau)) = \sqrt{(0.142 \ln(G) + 0.241)^2 + 0.09^2} - 0.142 \ln(G) - 0.241. \quad (16)$$

При великих значеннях безрозмірної швидкості (мікроконтакт), кривизна розподілу максимальна (Рис. 4), а при малих значеннях безрозмірної швидкості (макроконтакт), вона прямує до 0, оскільки розподіл наближається до нормального розподілу. У процесі апроксимації результатів комп'ютерного експерименту нами були оптимізовані параметри розподілів (8-14). Приклад залежності параметрів логнормального розподілу від безрозмірної швидкості наведений на Рис. 5. Для аналізу результатів апроксимації ми використали критерій середньоквадратичного відхилення розподілів (8-14) від результатів комп'ютерного експерименту (Рис. 6). Видно, що запропонований нами авторський розподіл (крива 2 на Рис. 6) найкраще апроксимує результати із усіх розглянутих нами розподілів.

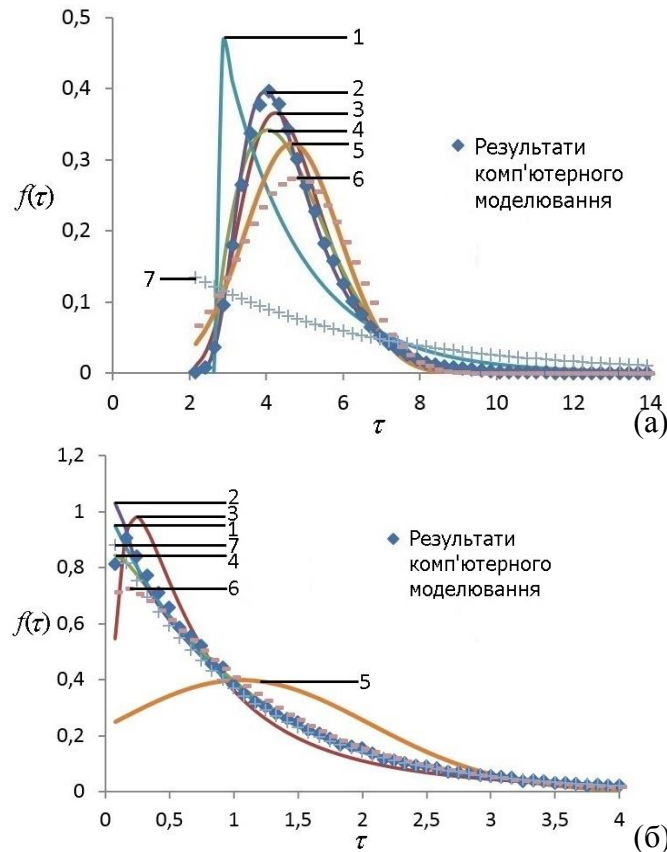


Рис. 1. Типовий розподіл безрозмірних часів до відмови (часу перетворення) для (а) макровипадку $G = 0.1$ та (б) мікрровипадку $G = 10$, при пороговому значенні $X = 0.5$. В обох випадках наведені гістограми, апроксимовані: 1 – модифікованим розподілом Пуассона, 2 – авторським розподілом, 3 – логнормальним розподілом, 4 – трипараметричним розподілом Вейбулла, 5 – розподілом Гауса, 6 – двопараметричним розподілом Вейбулла, 7 – розподілом Пуассона.

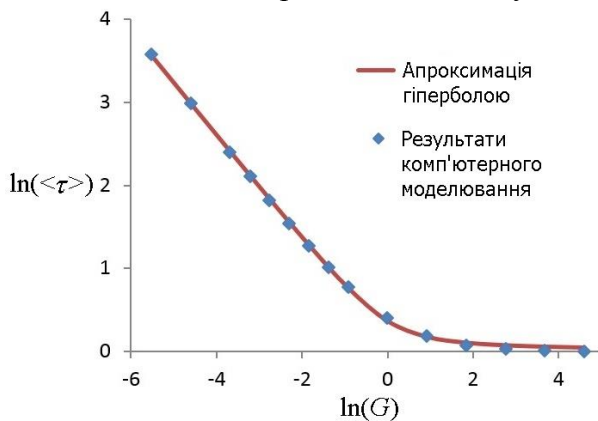


Рис. 2. Залежність логарифма середнього значення безрозмірного часу до відмови від логарифма безрозмірної швидкості G . Ліва частина може бути апроксимована прямою з нахилом $(-2/3)$. Права частина – асимптотично прямує до нуля.

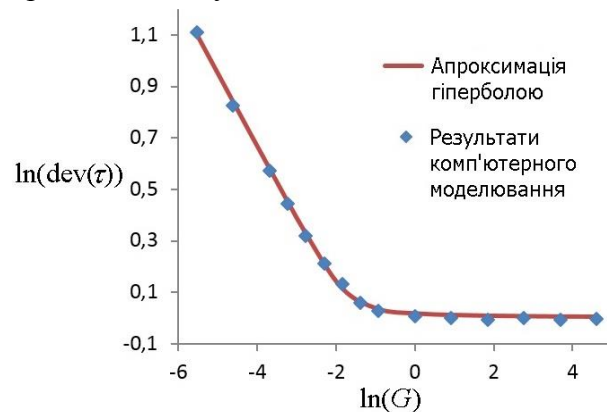


Рис. 3. Залежність логарифма девіації (середньоквадратичного відхилення) безрозмірних часів до відмови від логарифма безрозмірної швидкості G . Ліва частина може бути апроксимована прямою з нахилом $(-1/3)$. Права частина асимптотично прямує до нуля.

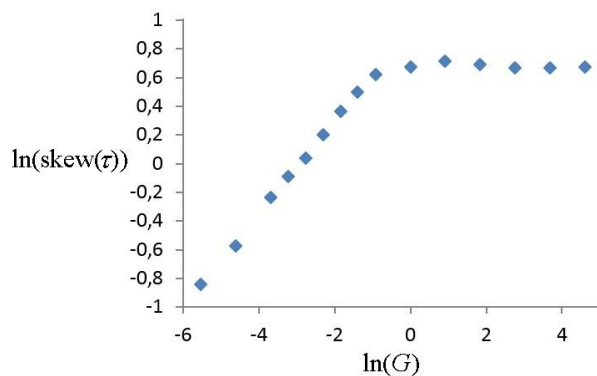


Рис. 4. Залежність логарифма асиметрії (кривизни) розподілу часу до відмови від логарифма безрозмірної швидкості G . Права частина асимптотично прямує до $\ln(2)$.

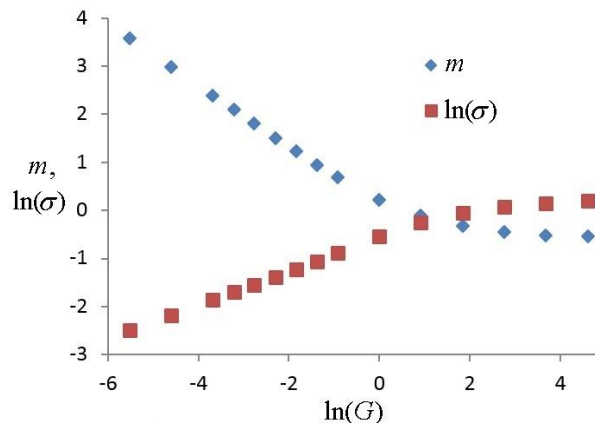


Рис. 5. Залежності параметрів апроксимації результатів комп'ютерного експерименту логнормальним розподілом від логарифма безрозмірної швидкості G .

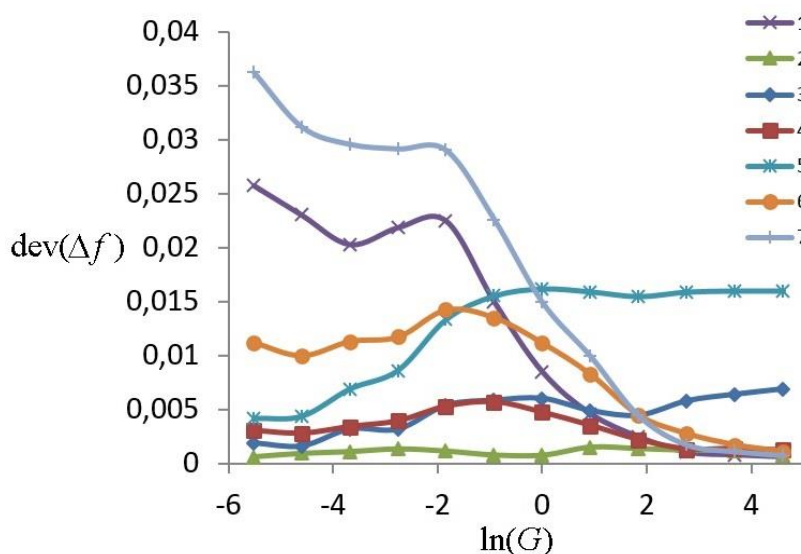


Рис. 6. Залежності середньоквадратичних відхилень оптимально апроксимованих функцій по даним комп'ютерного експерименту від логарифма безрозмірної швидкості G . Види апроксимацій: 1 – модифікований розподіл Пуассона, 2 – авторський розподіл, 3 – логнормальний розподіл, 4 – трипараметричний розподіл Вейбулла, 5 – розподіл Гауса, 6 – двопараметричний розподіл Вейбулла, 7 – розподіл Пуассона. При цьому великі за модулем від'ємні значення $\ln(G)$ відповідають макроконтакту, а великі додатні – мікроконтакту.

6. Висновки

Ми проаналізували розмірну залежність розподілу часу до відмови та його основні властивості на прикладі найпростішої кінетики КЈМА у обмеженій двовимірній області. Граничні випадки розмірів системи описані аналітично. Основними результатами є:

1. Тип розподілу часу до відмови (або часу перетворення) у випадку гомогенного зародкоутворення пор і з постійною швидкістю їх росту контролюється безрозмірним розміром $\lambda \equiv L/l = (\nu L^3/V)^{1/3}$ або безрозмірною швидкістю латерального росту $G = V/\nu L^3 = 1/\lambda^3$.

2. Розподіл часів до відмови (або часів перетворення), зі зменшенням розміру поступово перетворюється від симетричного нормального розподілу до сильно несиметричного розподілу Пуассона через логнормальний розподіл та розподіл Вейбулла.

3. Середній безрозмірний час до відмови залежить від безрозмірного розміру системи як λ^2 при $\lambda \gg 1$ та прямує до 1 при $\lambda \ll 1$.

4. Девіація безрозмірного часу до відмови пропорційна безрозмірному розміру системи λ при $\lambda \gg 1$ та прямує до 1 при $\lambda \ll 1$.

5. Параметр асиметрії (skew) розподілу безрозмірного часу до відмови прямує до нуля при $\lambda \gg 1$ та прямує до 2 при $\lambda \ll 1$.

6. Апроксимація середнього значення та девіації безрозмірного часу до відмови описуються рівняннями (15-16).

7. Порогове значення частки площі контакту заповненої порами для відмови (за виключенням 100%) не суттєве для всіх вищезазначених властивостей.

Звичайно, представлена модель є дуже спрощеною, вона не враховує тривимірний ріст пор, зміну густини струму та, відповідно, зміну швидкості росту пор, тощо. Більш загальний аналіз буде представлений в інших роботах.

Подяки

Робота виконана за підтримки 7-ї Рамкової Програми Європейської Комісії FP7-PEOPLE-2013-IRSES – Marie Curie International Research Staff Exchange Scheme Fellowship within the 7th Framework Programme of European Commission (Grant Agreement: PIRSEGA-2013-612552) та Міністерства освіти і науки України (0115U000638 та 0117U000577).

Список використаної літератури:

1. Tu K.-N. Electronic thin-film reliability / K.-N. Tu. – New York: Cambridge University Press, 2010. – 394 p.
2. Tu K.-N. Solder joint technology / K.-N. Tu. – New York: Springer, 2007. – 368 p.
3. Tu K.-N. Kinetics in nanoscale materials / K.-N. Tu, A. M. Gusak. - New Jersey: John Wiley & Sons, 2014. – 312 p.
4. Колмогоров А. Н. К статистической теории кристаллизации металлов / А. Н. Колмогоров // Изв. АН СССР. Сер. матем. – 1937. – Т. 1, № 3. – С. 355-359.
5. Avrami M. Kinetics of phase change. I General theory / M. Avrami // The Journal of Chemical Physics. – 1939. – V. 7, № 12. – P. 1103-1112.
6. Johnson W. A. Reaction Kinetics in Processes of Nucleation and Growth / W. A. Johnson, R. F. Mehl // Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers. – 1939. – V. 135. – P. 416-442.
7. Vairagar A. V. In situ observation of electromigration-induced void migration in dual-damascene Cu interconnect structures / A. V. Vairagar, S. G. Mhaisalkar, A. Krishnamoorthy, K. N. Tu, A. M. Gusak, M. A. Meyer, E. Zschech // Applied Physics Letters. – 2004. – V. 85, № 13. – P. 2502-2504.
8. Tian T. A new physical model for life time prediction of Pb-free solder joints in electromigration tests / T. Tian, A. M. Gusak, O. Y. Liashenko, J. K. Han, D. Choi, K. N. Tu // Electronic Components and Technology Conference (ECTC), 2012 IEEE 62nd. – P. 741-746.

9. Delcourt O. Size effect in a nucleation and growth transformation / O. Delcourt, M. Descamps, H. J. Hilhorst // *Ferroelectrics*. – 1991. – V. 124, № 1. – P. 109-114.
10. Berg B. A. Finite Volume Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami Theory / B. A. Berg, S. Dubey // *Physical Review Letters*. – 2008. – V. 100, № 16. – P. 165702.
11. Alekseechkin N. V. On the kinetics of phase transformation of small particles in Kolmogorov's model / N. V. Alekseechkin // *Condens Matter Physics*. – 2008. – V. 11, № 4(56). – P. 597-613.

References

1. Tu K.-N. (2010). *Electronic thin-film reliability*. New York: Cambridge University Press.
2. Tu K.-N. (2007). *Solder joint technology*. New York: Springer.
3. Tu K.-N., Gusak A. M. (2014). *Kinetics in nanoscale materials*. New Jersey: John Wiley & Sons.
4. Kolmogorov A. N. (1937). On the Statistical Theory of the Crystallization of Metals. *Izv. AN SSSR. Ser. matem. (Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR, Mathematics Series)*, 1(3), 355-359.
5. Avrami M. (1939). Kinetics of phase change. I General theory. *The Journal of Chemical Physics*, 7(12), 1103-1112.
6. Johnson W. A., Mehl R. F. (1939). Reaction Kinetics in Processes of Nucleation and Growth. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*, 135, 416-442.
7. Vairagar A. V., Mhaisalkar S. G., Krishnamoorthy A., Tu K. N., Gusak A. M., Meyer M. A., Zschech E. (2004). In situ observation of electromigration-induced void migration in dual-damascene Cu interconnect structures. *Applied Physics Letters*, 85(13), 2502-2504.
8. Tian T., Gusak A. M., Liashenko O. Y., Han J. K., Choi D., Tu K. N. (2012). A new physical model for life time prediction of Pb-free solder joints in electromigration tests. *Electronic Components and Technology Conference (ECTC), 2012 IEEE 62nd*, 741-746.
9. Delcourt O., Descamps M., Hilhorst H. J. (1991). Size effect in a nucleation and growth transformation. *Ferroelectrics*, 124(1), 109-114.
10. Berg B. A., Dubey S. (2008). Finite Volume Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami Theory. *Physical Review Letters*, 100(16), 165702.
11. Alekseechkin N. V. (2008). On the kinetics of phase transformation of small particles in Kolmogorov's model. *Condens Matter Physics*, 11(4(56)), 597-613.

Summary. O.A. Bobrov, M.O. Pasichnyy, O.Yu. Liashenko, A.M. Gusak. **Size effect on Distributions of the Times To Failure and Times To Transformation.** Failure of finite size 2D solder contact is equivalent to phase transformation in a finite 2D system. First-order phase transformations proceed due to multiple nucleation and consequent growth of new phase grains inside the old phase matrix. The nucleation and growth of the pancake voids due to the electromigration along the tin/copper interface are considered. This problem is essential due to the flip-chip technology and the miniaturization of the solder bump size. Kinetics of this process is usually described by KJMA equations (Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami). Size dependencies of Times To Failure (TTF) and Times To Transformation (TTT) distributions and their main characteristics are modeled. The danger of early failures due to the broadening of TTF distribution makes the size effect study an important issue in microelectronics. Broadening of TTT distribution is essential for phase transformations in the ensembles of micro- and nanoparticles. With decreasing size the TTF and TTT distributions steadily transform from the normal distribution to Poisson one via lognormal or Weibull

(with changing optimized parameters). Histograms of the computer experiments were fitted by various distributions. The best approximations were obtained by our own distribution, by lognormal distribution and by 3-parametric Weibull distribution. Analytical approximations for transient regimes are suggested.

Keywords: size effect, times to failure, 2D phase transformation, probability distribution, Kolmogorov-Avrami kinetics, flip-chip technology.

Одержано редакцією 25.11.2017

Прийнято до друку 24.12.2017

УДК 621.762:669.715.29

PACS 66.30.-h.; 81.05.bx.; 68.35.fx,
64.70.kd, 82.40.ck, 66.30.Ny

**В. М. Тютенко, В. В. Морозович, В. А. Дідук,
С. О. Колінько, Ю. О. Ляшенко**

ВПЛИВ SMAT ОБРОБКИ НА СТРУКТУРУ ЕЛЕКТРООСАДЖЕНИХ В СТАЦІОНАРНОМУ, РЕВЕРСНОМУ ТА СТОХАСТИЧНОМУ РЕЖИМАХ ПРОШАРКІВ МІДІ

Досліджено застосування низькочастотної поверхневої механічної обробки тертям за технологією SMAT до поверхонь електроосадженої в стаціонарному, реверсному імпульсному та стохастичному режимах міді на мідні підкладки. Методами рентгенівського дифракційного аналізу досліджено вплив SMAT обробки на мікроструктуру поверхневих прошарків міді, встановлено зміну текстури зразків. Аналіз уширення дифракційних ліній вказує не лише на подрібнення зерен, а і на наявність мікронапруг. Отримано зони дифузійної взаємодії між різного типу мідними поверхневими прошарками, в тому числі після їх SMAT обробки, та оловом. Встановлено особливості фазоутворення в цих контактних зонах засобами оптичної мікроскопії.

Ключові слова: наноструктуровані матеріали, інтенсивна пластична деформація, поверхнева механічна обробка тертям (SMAT), електролітично осаджені прошарки міді, твердофазні реакції міді і олова, рентгеноструктурний аналіз.

1. Вступ

Нові технологічні властивості наноструктурованих матеріалів детально досліджуються протягом останніх десятиріч. Порівняно з полікристалічними матеріалами наноструктуровані матеріали характеризуються особливим структурно-фазовим складом, термодинамічними та механічними властивостями [1]. Як правило, наноструктуровані матеріали отримують впливом інтенсивних пластичних деформацій

на об'ємні зразки або їх поверхневі прошарки [2, 3]. Одним із способів отримання наноструктурованих поверхневих прошарків є застосування поверхневої механічної обробки тертям (технології SMAT – Surface Mechanical Attrition Treatment) [4-7]. SMAT технологія обробки поверхні матеріалів полягає у швидкісному бомбардуванні поверхні металів або сплавів металічними кульками більш твердими за матеріал, що обробляється. Така обробка призводить до подрібнення приповерхневих зерен до нанорозмірів, що істотно впливає на властивості поверхневого прошарку матеріалу та спричинює зміни його структурного та фазового складу.

Властивості поверхневих прошарків міді суттєвим чином впливають на якість з'єднання електронних компонентів шляхом спаювання контактів. Тут важливим є структурний стан саме мідних контактів, що визначається як розмірами та взаємною орієнтацією зерен, технологією їх отримання, так і особливостями дефектного стану полікристалічної міді. Дефектність мідних контактів визначається, в основному, густиною та розподілом точкових дефектів (вакансій) та протяжних дефектів (дислокацій та їх консолідацій, меж зерен та їх структури). Різноманітний вплив описаних факторів призводить до відмінностей в процесі фазоутворення в контактній зоні між олов'яним припоєм та міддю, що потребує більш детального дослідження.

Як правило, мідні контакти отримують шляхом електролітичного осадження. Тому, важливою є розробка технології отримання прошарків міді з однорідною та бездефектною структурою. Теорія та технологія стаціонарного режиму електроосадження з застосуванням постійної напруги, що прикладається до електродів електрохімічної комірки, розроблено в науковій літературі найбільш детально [8]. Проте стаціонарний режим електроосадження має ряд недоліків, як, наприклад, нерівномірність товщини електроосаджених плівок. Це пов'язано з нестійкістю стаціонарного режиму електроосадження, коли флуктуаційно утворені виступи на електродах призводять до зменшення відстані між ними і, відповідно, до зростання потоку електроосадження на цих ділянках та прискореного росту сформованих виступів. Особливо актуальною є вказана проблема в процесах виготовлення електронних плат з відкритими та глухими отворами, які потребують мідної металізації. Для боротьби з таким явищем застосовуються різного типу неоднорідні в часі режими електроосадження [9-13], такі як імпульсний, коливальний, реверсивний (інверсний) режими електроосадження. Найбільш досконалі поверхневі покриття отримуються в режимі реверсного електроосадження [10], коли катод і анод періодично міняють місцями шляхом зміни полярності струму. При цьому енергетична ефективність процесу електроосадження знижується, так як певний проміжок часу нанесений прошарок міді найбільше стравлюється в місцях сформованих виступів.

В роботі [14] описано розроблену технологію стохастичного режиму електроосадження міді на мідні підкладки без застосування інверсних струмів. Описано застосування моделі генератора нелінійних коливань Чуа для побудови часового ряду стохастичних коливань напруги в околі двох стаціонарних значень, що розраховуються з поляризаційної кривої, що отримана відповідно до застосованих умов електролізу. Проведено аналіз впливу стаціонарного та стохастичного режимів електролітичного осадження на структуру отриманих прошарків міді на мідних підкладках. В ході виконання роботи створено апаратно-програмний комплекс для контролю процесу електролітичного осадження, проведено електроосадження міді на поверхню мідних пластинок за прикладення постійної або стохастичної напруги до електродів електрохімічної комірки, досліджено особливості кристалічної будови отриманих прошарків електроосадженої міді методами рентгенодифракційного аналізу та електронної растрової мікроскопії.

В роботі [15] описано технологію низькочастотної поверхневої механічної обробки тертям (SMAT – технології) та конструктивні особливості створеного пристрою для її здійснення на експериментальних зразках. В роботі проведено експериментальне дослідження засобами рентгенівського дифракційного аналізу деяких типів електролітично осаджених прошарків міді на мідних підкладках із аналізом структурного стану, що оброблені за технологією SMAT. Проведено вимірювання мікротвердості поверхневих прошарків, що характеризують вплив SMAT обробки на стан мідних полікристалічних прокатаних мідних пластин та електроосаджених прошарків.

Метою даної роботи є систематизоване застосування низькочастотної поверхневої механічної обробки тертям за технологією SMAT до поверхонь електроосадженої в стаціонарному, реверсному імпульсному та стохастичному режимах міді. Досліджено вплив низькочастотної SMAT обробки на мікроструктуру цих поверхневих прошарків міді методами рентгенівського дифракційного аналізу. Однією із задач роботи є відпрацювання технологічних прийомів отримання зони дифузійної взаємодії між різного типу мідними поверхневими прошарками, в тому числі після їх SMAT обробки, та оловом, встановлення особливостей фазоутворення в цих контактних зонах засобами оптичної мікроскопії.

2. Експериментальні методи отримання прошарків електроосадженої міді та їх пластичної деформації за SMAT технологією

2.1 Опис обладнання

Підготовка та дослідження зразків, а саме: шліфування та полірування пластинок полікристалічної міді, електролітичне осадження міді, термічний відпал зразків, аналіз зразків проводилось на штатному обладнанні, в тому числі застосовувались: модифікований рентгенівський дифрактометр ДРОН, оптичний мікроскоп Полам Р-312. В роботі вдосконалено та використано пристрій для керованого електролітичного осадження міді на мідні підкладки, принципова схема якого зображена на Рис.1. та експериментальну установку для механічної обробки зразків (SMAT – технології).

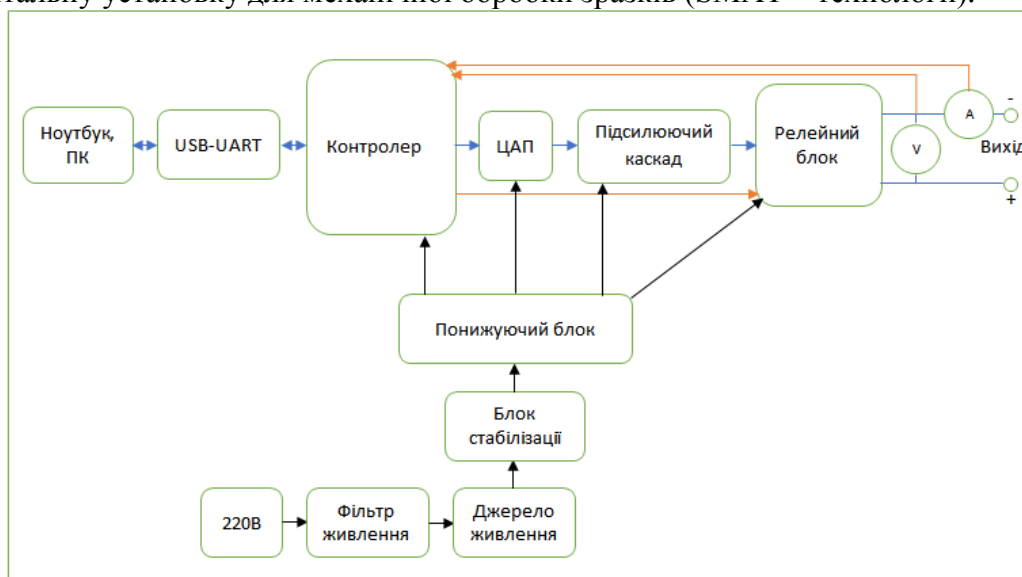


Рис. 1. Принципова блок-схема установки для керованого електролітичного осадження.

Для управління процесом електролітичного осадження розроблено апаратно-програмний комплекс. Приладом можна керувати безпосередньо з комп'ютера, задаючи потрібний режим електроосадження в розробленому програмному середовищі. Спочатку розраховується часова залежність напруги. Отримані значення напруги через задані проміжки часу надсилаються через перетворювач USB-UART в розроблений контролер [14]. Далі сигнал перетворюється в аналоговий тип за допомогою ЦАП та йде на підсилюючий каскад. Після цього отримана напруга прикладається до електродів електролітичної комірки. В пристрої реалізовано процедуру вимірювання напруги та сили струму в електролітичній комірці з використанням зворотного зв'язку контролера з ПК. Завдяки цій функції відбувається фіксація реальних значень напруги та сили струму [14].

В низькочастотному SMAT пристрої роль генератора коливань виконує електромеханічний коливальний механізм потужністю 10 Вт, який було підключено до генератора звукових коливань через підсилювач потужності з низьким вхідним опором. Частота коливань становила 25Гц, В центрі діафрагми закріплено поршень діаметром 24 мм. Камера, в якій відбувається коливання поршня та рух кульок, виконана з тонкостінної трубки. В пристрої для SMAT обробки в ролі робочого тіла використовуються кульки з нержавіючої, немагнітної сталі, з гладкою поверхнею AISI 304L діаметром 3.175 мм. Камера, зразок, магніт під час обробки нерухомі, лише котушка разом з закріпленою на ній площадкою коливаються вздовж вертикальної осі. Пристрій для SMAT обробки має невеликі розміри, що дозволяє розміщувати його під ковпаком вакуумного посту для проведення обробки у вакуумі, аргоні тощо [15].

2.2 Підготовка та виготовлення зразків

Перед електролітичним осадженням міді мідні пластинки, розмірами 10*10 мм, пройшли процес шліфування та полірування. Поверхню зразків необхідно підготовлювати для активації процесу електролітичного осадження [16] - для цього було приготовлено хімічний розчин, склад якого описано в [15].

Для проведення електролітичного осадження міді на мідні пластинки було підготовлено електроліт наступного складу $0,36\text{MCuSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O} + 1,22\text{MH}_2\text{SO}_4$ [17]. В якості катоду використовувалась мідна пластина, на аноді був закріплений необхідний зразок. Відстань між катодом і анодом була фіксована – 5 см. Електроліт використовувався за температури 20°C [18], час осадження – 60 хв. Під час електролітичного осадження використовувались такі параметри електричного джерела: діапазон електричної напруги: 0,5-0,85 В, діапазон сили струму: 0,055-0,095 А/см² (див. Таб. 1).

Для проведення експерименту було виготовлено десять типів зразків (див. Табл. 1). Електролітичне осадження міді на мідні пластинки проводилося в 2 стаціонарних режимах, що відповідають точкам 1 і 2 на рис. 2, в реверсному імпульсному та стохастичному режимах (Рис.3). Товщина нанесеного прошарку становила 40 – 50 мкм.

Таблиця 1

Характеристика виготовлених зразків

Назва	Режим електролітичного осадження та обробки	Параметри SMAT обробки	Параметри електролітичного осадження
Зразок 1	Без електролітичного осадження		
Зразок 2	Без електролітичного осадження, SMAT	60 хв	

Продовження таблиці 1			
Зразок 3	Стаціонарний режим (точка 1, Рис. 2)		$U=0,5B$; $j=0,07A/cm^2$
Зразок 4	Стаціонарний режим (точка 1, Рис. 2), SMAT	60 хв	$U=0,5B$; $j=0,07A/cm^2$
Зразок 5	Стаціонарний режим (точка 2, Рис. 2)		$U=0,85B$; $j=0,08A/cm^2$
Зразок 6	Стаціонарний режим (точка 2, Рис. 2), SMAT	60 хв	$U=0,85B$; $j=0,08A/cm^2$
Зразок 7	Реверсний імпульсний режим		$U=-0,5 - 0,35B$; $j= 0,065-0,095 A/cm^2$ Скважність 0,4 Період імпульсів: 3с
Зразок 8	Реверсний імпульсний режим, SMAT	60 хв	$U=-0,5 - 0,35B$; $j= 0,065-0,095 A/cm^2$; Скважність 0,4 Період імпульсів: 3с
Зразок 9	Стохастичний режим		$U= 0,25-0,65B$; $j= 0,055-0,085A/cm^2$
Зразок 10	Стохастичний режим, SMAT	60 хв	$U= 0,25-0,65B$; $j= 0,055-0,085A/cm^2$

Відповідна до заданих умов електролізу, розмірів зразків (10*10 мм) та відстані між катодом та анодом (5 см) поляризаційна крива зображена на Рис. 2.

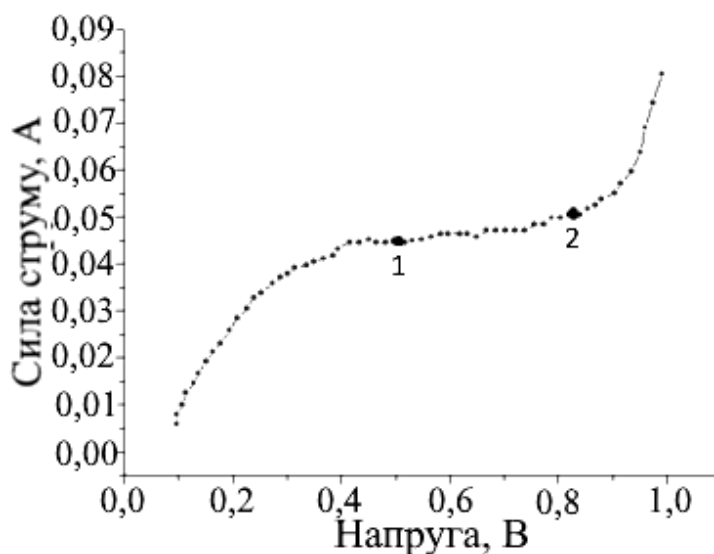


Рис. 2. Поляризаційна крива електролітичного осадження міді.

На Рис. 3 зображено часові залежності зміни напруги в електролітичній комірці в випадку нестаціонарних режимів електроосадження.

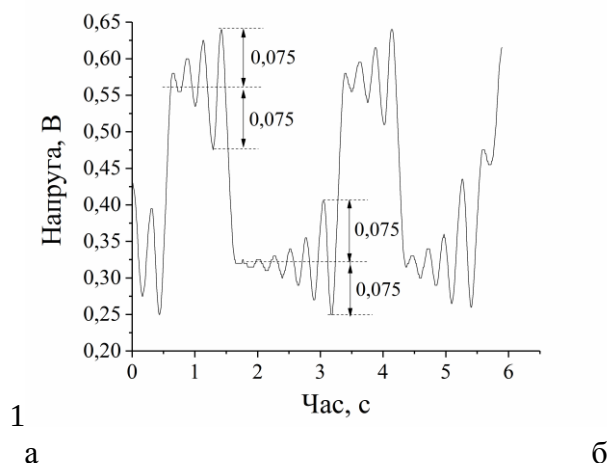


Рис. 3. Залежність напруги на електродах від часу: а) реверсний імпульсний режим [10]; б) стохастичний режим [14].

В якості джерела напруги для електролітичного осадження використовувався апаратно-програмний комплекс, будову та принцип роботи якого описано в роботі [14].

В режимі стохастичних коливань (генератор Чуа) мінімальне значення напруги становило 0,25 В, максимальне 0,65В. Значення напруги в часі змінювалася випадковим чином між двома стаціонарними точками. Біля нижньої (0,33 В) та верхньої (0,56 В) стаціонарних точок відхилення напруги становила 0,075 В.

Після виготовлення зразків їх було занурено в рідке олово (250°C), поверхні зразків і олов'яного розплаву були заздалегідь оброблені комерційним каніфольним м'яко-активованим (КМА) флюсом (Weld Team Decapant Liquid, Lincoln Electric Group) [17]. Потім зразки були поміщені в кварцову трубку з атмосферою Ar і термічно відпалені в муфельній печі за температури 210°C протягом 96 годин. Зразки охолоджувалися на повітрі до кімнатної температури.

3. Дослідження виготовлених зразків

Отримані зразки були досліджені методом рентгеноструктурного аналізу на рентгенодифрактометрі ДРОН у монохроматичному FeK_α -випромінюванні. Аналізуючи уширення піків на дифрактограмах можна визначити наявність мікронапруг та дрібнодисперсність зразків [див. Додаток 1]. Для аналізу зразків в якості еталона Cu бралася дифрактограма відпаленого порошку міді (див. Рис. 4а).

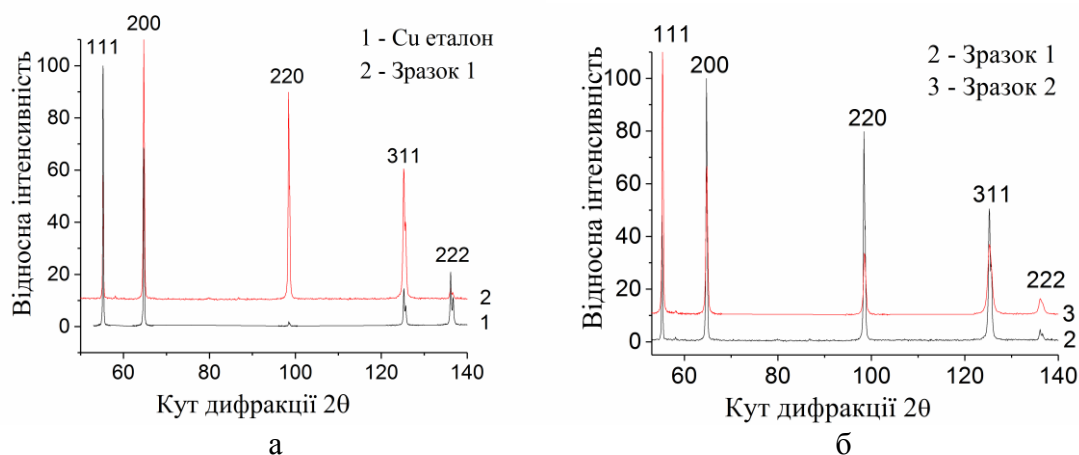


Рис. 4. Дифрактограми зразків міді: а) відпалений порошок міді (лінія 1) та Зразок 1 (лінія 2); б) Зразок 1 (лінія 2) та Зразок 2 (лінія 3).

Спочатку було проаналізовано дифрактограми Зразків 1 і 2 (див. Рис. 4б) на наявність мікронапруг та встановлення рівня мікродисперсності. Для кращого сприйняття лінії дифрактограм зразків на рисунках були віднормовані в межах 100 одиниць та рознесені відповідно на 10 одиниць відносних інтенсивностей.

В результаті аналізу отриманих дифрактограм було встановлено, що у відпаленого порошку міді (лінія 1) переважає орієнтація площин (111). В Зразку 1 переважають зерна з орієнтацією площин (200) та (220), про що свідчить висота відповідних піків. Аналіз дифрактограм Зразка 1 та відпаленого порошку міді показав, що в прокатаній міді присутня характерна аксіальна текстура (220), на відміну від еталонного зразка Cu (див. Рис. 4а). Порівняння дифрактограм Зразків 1 і 2 (див. Рис. 4б) показало, що після SMAT обробки піки уширюються, що спричинено наявністю мікронапруг та зменшенням розмірів зерен.

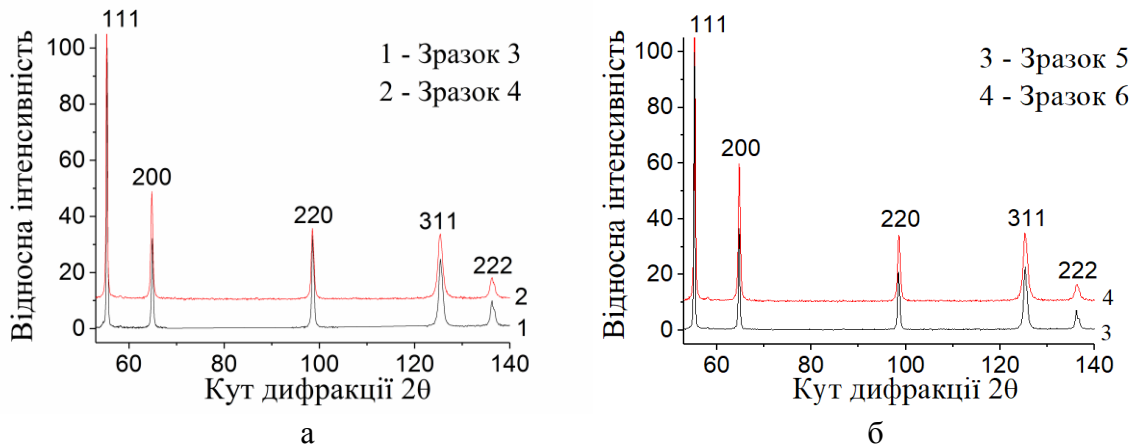


Рис. 5. Дифрактограми зразків міді: а) Зразок 3 (лінія 1) та Зразок 4 (лінія 2); б) Зразок 5 (лінія 3) та Зразок 6 (лінія 4).

Після електролітичного осадження міді на мідні підкладки в стаціонарних режимах 1 та 2 також було проведено рентгеноструктурний аналіз зразків (див. Рис. 5а). Аналіз дифрактограм вказує на те, що в Зразку 3 розмір зерен менший, порівняно з вихідним зразком міді [див. Табл. 2]. В Зразку 4, що отриманий після SMAT обробки Зразка 3 (див. Рис. 5а), піки уширилися за рахунок зменшення розмірів зерен та появи мікронапруг. На Рис. 5б приведено порівняння дифрактограм Зразка 5 (лінія 3) та Зразка 6 (лінія 4). Видно, що після SMAT обробки Зразка 5 піки уширюються. Це уширення спричинене зменшенням розміру зерен та виникненням мікронапруг в зразку. Після електролітичного осадження в стаціонарному режимі (точка 1, Рис. 2) утворюється текстурована поверхня міді з переважною орієнтацією площин (200), (220) та (311). У випадку електролітичного осадження в стаціонарному режимі (точка 2, Рис. 2) спостерігається переважна орієнтація площин (111). Механічна обробка Зразка 3 за SMAT технологією призводить до зменшення кількості зерен з орієнтацією площин (200) та (220). Тобто, після механічної обробки Зразка 3 відновлюється структура з переважною орієнтацією площин (111).

Інші типи зразків (Рис. 6) були виготовлені з застосуванням процесу електролітичного осадження міді в нестационарних режимах.

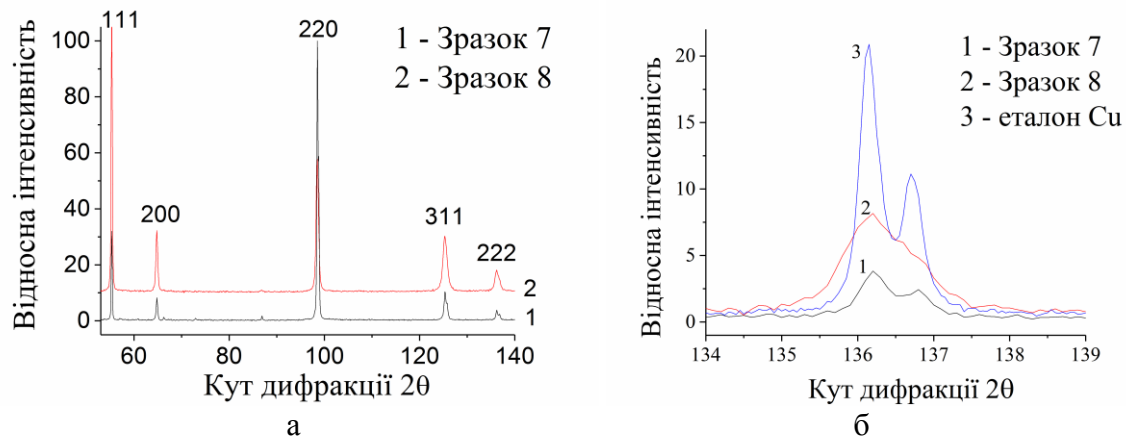


Рис. 6. Дифрактограми зразків міді електроосаджених в реверсному імпульсному режимі: а) Зразок 7 (лінія 1) та Зразок 8 (лінія 2); б) Зразок 7 (лінія 1), Зразок 8 (лінія 2) та еталону Cu (лінія 3) за кутів дифракції 52° - 58° .

На Рис. 6 приведено дифрактограми зразків, що були електроосаджені в реверсному імпульсному режимі. В результаті аналізу отриманих дифрактограм було встановлено, що в Зразку 7 переважає орієнтація площин (220). Після механічної обробки кількість зерен з орієнтацією (220) зменшується, а кількість зерен з орієнтацією площин (111) збільшується (Рис 6а).

Також встановлено, що після SMAT обробки в Зразку 7 зникає дублетність в лінії від площин (222) (лінія 2, Рис. 6б). Це відбувається внаслідок уширення піків, що спричинено виникненням мікронапруг та зменшенням розмірів зерен.

Проведений аналіз дифрактограм Зразка 9 та Зразка 10 показав, що після електролітичного осадження в стохастичному режимі в зразках переважає орієнтація площин (111), (200) та (220). Після SMAT обробки переважною орієнтацією площин стала (111) (див. Рис. 7а, лінія 2), що є подібним до дифрактограми вихідного зразка. Для Зразка 10 також притаманне уширення піків, що спричинене зменшенням розмірів зерен та наявністю мікронапруг (Рис. 7б).

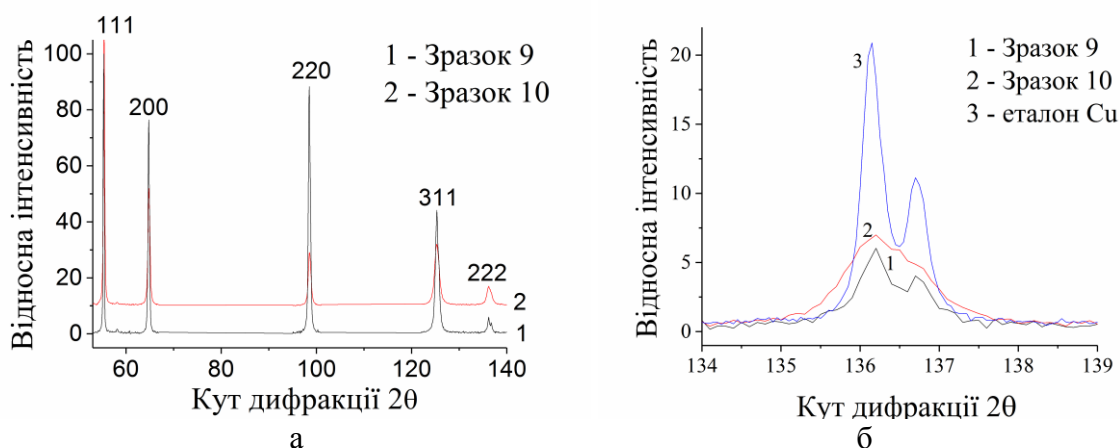


Рис. 7. Дифрактограми зразків міді електроосаджених в стохастичному режимі: а) Зразок 9 (лінія 1) та Зразок 10 (лінія 2); б) Зразок 9 (лінія 1), Зразок 10 (лінія 2) та еталону Cu (лінія 3) за кутів дифракції 52° - 58° .

В Табл. 2 подано інформацію про розраховані мікроструктурні характеристики зразків.

Таблиця 2

Мікроструктурні характеристики зразків

Назва	Кути дифракційних піків 2θ , град.	Напівширин α B	Фізичне уширення β	Розмір ОКР D_{HKL} , Å	Відносна деформація $\Delta d/d$, %
Еталон Cu	55,2; 136,15	0,160; 0,311			
Зразок 1	55,179; 136,097	0,162; 0,360	0,01; 0,0909	205,3	0,9
Зразок 2: Зразок 1+ SMAT	55,242; 136,151	0,205; 0,657	0,0705; 0,4114	109,2	4,3
Зразок 3	55,357; 136,223	0,221; 0,581	0,0886; 0,3330	45,36	1,5
Зразок 4: Зразок 3+ SMAT	55,262; 136,172	0,265; 0,801	0,1359; 0,5582	19,23	2,5
Зразок 5	55,241; 136,135	0,194; 0,425	0,0340; 0,114	87,57	0,7
Зразок 6: Зразок 5+ SMAT	55,316; 136,136	0,290; 0,770	0,1621; 0,5267	17,35	3,0
Зразок 7	55,275; 136,209	0,180; 0,411	0,0400; 0,1514	102,6	1,2
Зразок 8: Зразок 7+ SMAT	55,392; 136,123	0,264; 0,709	0,1348; 0,3980	15,94	4
Зразок 9	55,261; 136,169	0,181; 0,370	0,0413; 0,0590	89,69	0,6
Зразок 10: Зразок 9+ SMAT	55,334; 136,131	0,269; 0,778	0,1401; 0,5349	30,0	4,1

На Рис. 8 приведено гістограми мікроструктурних характеристик Зразків 1-10, а саме областей когерентного розсіювання (ОКР) та відносної деформації.

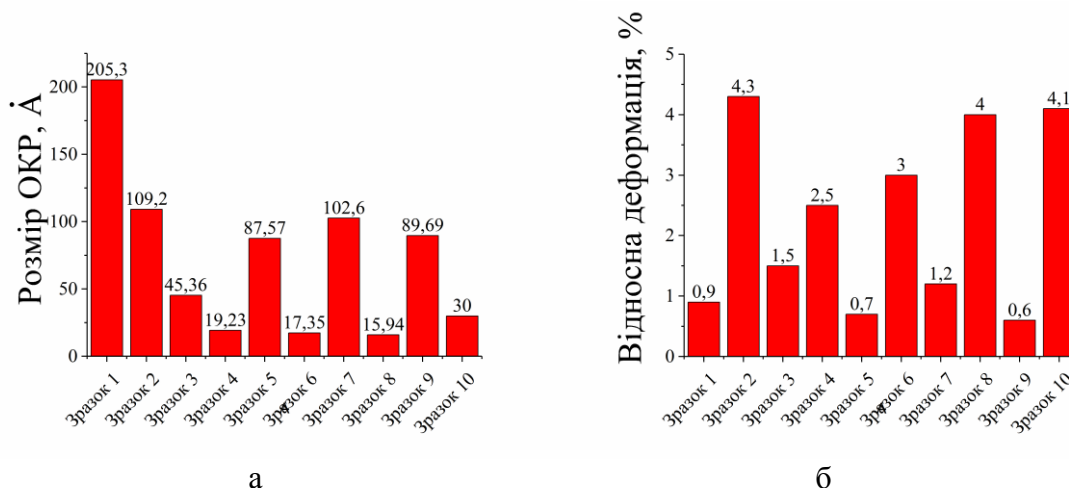


Рис. 8. Гістограми мікроструктурних характеристик Зразків 1-10: а) розмір ОКР; б) відносна деформація.

З гістограм видно, що SMAT обробка зразків призводить до зменшення розмірів зерен (Рис. 8а) та збільшення відносної деформації (Рис. 8б). Також було встановлено,

що після електролітичного осадження міді розмір зерен зменшується, порівняно з розмірами зерен в полікристалічній мідній підкладці.

Після термічного відпалу Зразків 1-10, попередньо занурених в олово, в муфельній печі за температури 210°C протягом 96 годин в атмосфері Ar, їх було досліджено на оптичному мікроскопі Полам Р-312. Видно, що на інтерфейсі формуються дві інтерметалічні фази Cu_3Sn та Cu_6Sn_5 (Рис. 9).

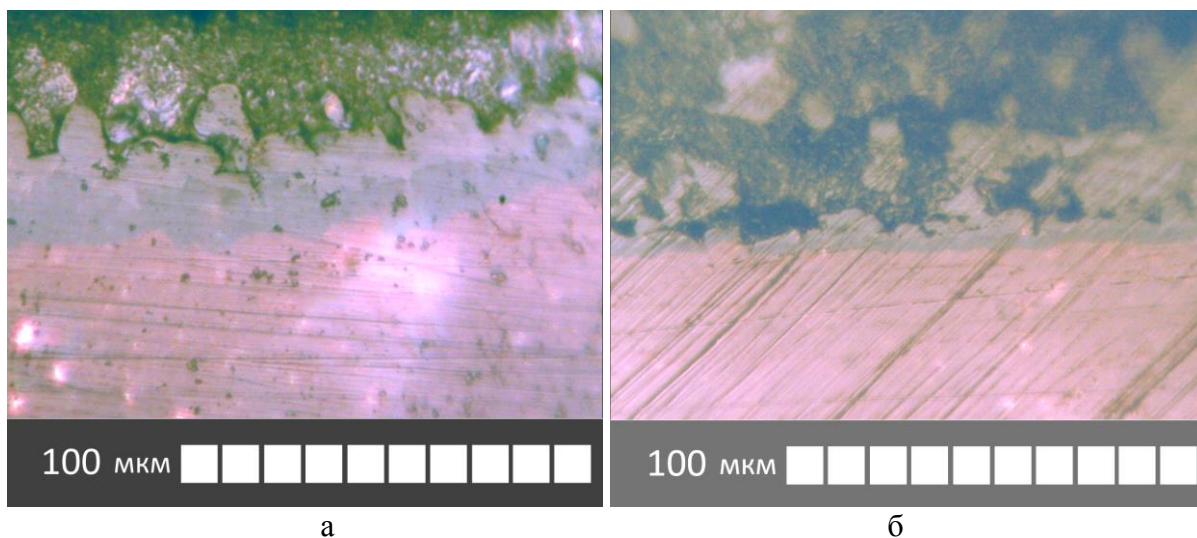


Рис. 9. Оптичний знімок поверхні зразків: а) Зразок 1; б) Зразок 2.

В результаті аналізу оптичних зображень засобами графічного редактора, було розраховано середню товщину фази Cu_3Sn в досліджуваних зразках. Для цього засобами графічного редактора було виділено область фази Cu_3Sn (Рис. 10), потім визначалась площа виділеної області в пікселях. Шляхом ділення отриманої площі фази на її довжину було розраховано середню товщину прошарку фази Cu_3Sn .

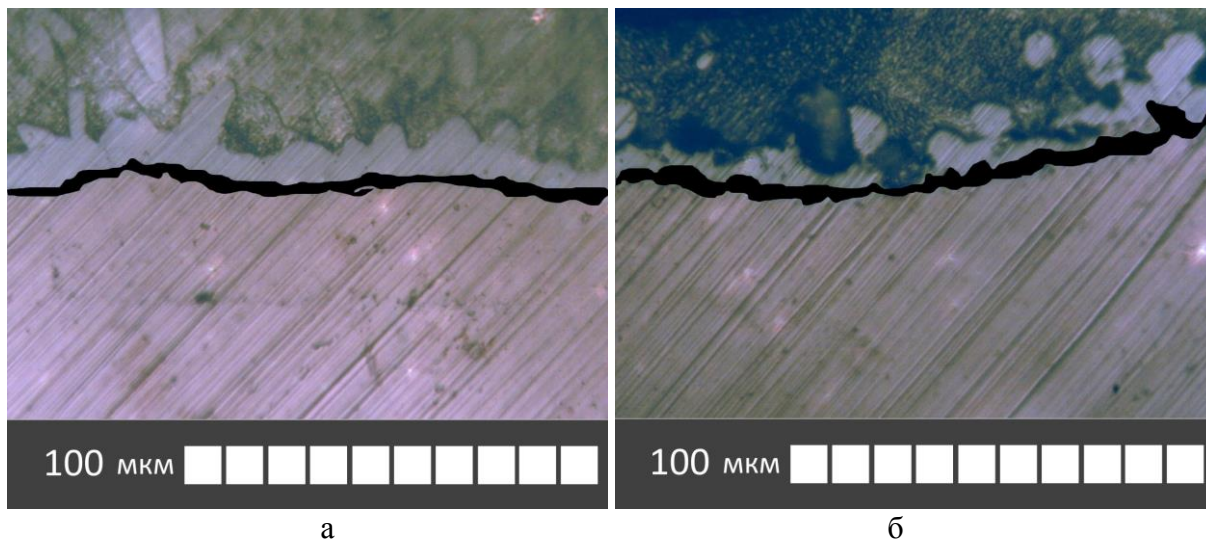


Рис. 10. Оптичний знімок поверхні зразків: а) Зразок 9; б) Зразок 10.

Аналіз зображення отриманих зразків показав, що максимальні розміри середньої товщини прошарку фази Cu_3Sn - 13,6 мкм, а мінімальні – 3,1 мкм (див. Рис. 11).

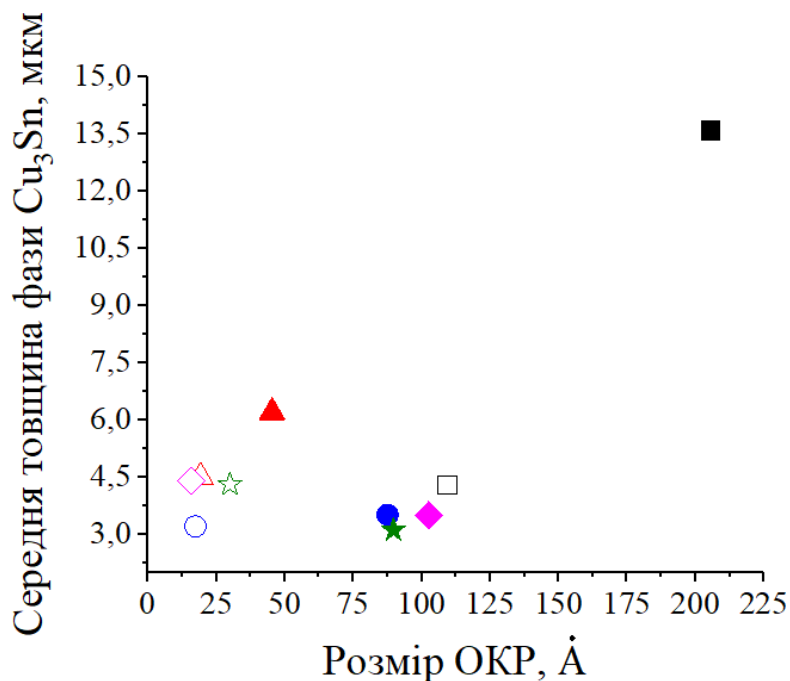


Рис. 11. Залежність середньої товщини фази Cu_3Sn від розміру ОКР: Зразок 1(■), Зразок 2(□), Зразок 3(▲), Зразок 4(Δ), Зразок 5(●), Зразок 6(○), Зразок 7(◆), Зразок 8(◇), Зразок 9(★), Зразок 10(☆).

Згідно з Рис. 11 в зразках, що оброблені за SMAT технологією, середня товщина фази Cu_3Sn , що виросла після дифузійного відпалу є приблизно однаковою (~4мкм). Найбільше значення середньої товщини прошарку фази Cu_3Sn спостерігається у Зразку 1 (полірована вихідна пластинка Cu). Було також встановлено, що електролітичне осадження міді призводить до зменшення середньої товщини фази Cu_3Sn .

4. Висновки

В роботі відпрацьовано технологію отримання прошарків електроосадженої в стаціонарному, реверсному імпульсному та стохастичному режимах міді на мідні підкладки. Для контролю процесу електроосадження використано розроблений автоматизований програмно-апаратний комплекс. За допомогою розробленого пристрою для низькочастотної поверхневої механічної обробки тертям (SMAT обробки) здійснено модифікацію поверхневих прошарків зразків міді, що отримані після електроосадження на мідні підкладки.

Методами рентгенівського дифракційного аналізу досліджено вплив SMAT обробки на мікроструктуру поверхневих прошарків міді. Проведені розрахунки показали, що уширення дифракційних ліній від зразків, що отримані після електролітичного осадження міді на мідні пластинки, зв'язано зі зменшенням розмірів зерен. Після обробки зразків за SMAT технологією також спостерігається уширення дифракційних піків. Однак, на відміну від зразків з електролітично осадженими прошарками міді, в цих зразках уширення піків вказує не лише на подрібнення зерен, а й на наявність мікронапруг. Було встановлено, що після обробки зразків за SMAT технологією розмір ОКР зменшиться приблизно вдвічі в усіх розглянутих зразках.

Отримані результати рентгеноструктурного аналізу дозволяють зробити такі висновки: після електролітичного осадження утворюється текстурована поверхня міді з

орієнтацією площин (200) та (220). Після механічної обробки за SMAT технологією відновлюється структура з переважною орієнтацією площин (111).

Електролітичне осадження міді приводить, також, до зменшення середньої товщини фази Cu_3Sn , що дифузійно виростає в контактній зоні після термічного відпалу. Встановлено, що в оброблених за SMAT технологією зразках середня товщина фази Cu_3Sn менша, ніж в необроблених за цією технологією зразках, що потребує подальшого і більш детального дослідження.

Подяки

Автори висловлюють подяку доц. Королю Я.Д. за змістовні дискусії та допомогу у виконанні дослідження. Робота виконана в рамках прикладної держбюджетної теми МОН України (номер державної реєстрації 0117U000577).

Список використаної літератури:

1. Glaiter H. Nanostructured materials: basic concepts and microstructure / H. Glaiter // *Acta Materialia*, – 2000. – Vol. 48. – P. 1-29.
2. Мазилкин А. А. Структурные изменения в алюминиевых сплавах при интенсивной пластической деформации / А. А. Мазилкин, Б. Б. Страумал, С. Г. Протасова // *ФТТ*, – 2007. – Т. 49. – С. 824-829.
3. Wang J. T. Heterogeneity and anisotropy in properties of copper processed by equal channel angular pressing / J. T. Wang, Z. Z. Du, F. Kang, G. Chen // *Materials Science Forum*, – 2006. – Vol. 503-504. – P. 663-668.
4. Lu K. Surface nanocrystallization (SNC) of metallic materials-presentation of the concept behind a new approach / K. Lu, J. J. Lu // *Mater. Sci. Technol*, – 1999. – Vol. 15, № 3. – P. 193-197.
5. Lu K. Nanostructured surface layer on metallic materials induced by surface mechanical attrition treatment / K. Lu, J. Lu // *Materials Science and Engineering: A*, – 2004. – Vol. 375-377. – P. 38-45.
6. Zhang Y. S. Friction and wear behaviors of nanocrystalline surface layer of pure copper / Y. S. Zhang, Z. Han, K. Wang, K. Lu // *Wear*, – 2006. – Vol. 260 – P. 942-948.
7. Chan H. Development of surface mechanical attrition treatment (SMAT) and electrodeposition process for generating nanostructured materials and study of their tensile properties / H. Chan // *The Hong Kong Polytechnic University*, – 2010. – 21. – p. 190.
8. Бельский М. А. Электроосаждение металлических покрытий: Справочник / М. А. Бельский, А. Ф. Иванов // М.: Металлургия, – 1985. 292 с.
9. Попов К. I. Morphology of electrochemically and chemically deposited metals / K. I. Popov, S. S. Djokic, N. D. Nikolic, V. D. Jovic // *Switzerland: Springer*, – 2016. 379 p.
10. Медведев А. Импульсная металлизация печатных плат / А. Медведев, П. Семенов // *Технологии в электронной промышленности*, – 2005. – № 3. – С. 68-70.
11. Sheshadri B. S. The effect of alternating current on the morphology of electrodeposited copper electrodeposition and surface treatment / B. S. Sheshadri, H. V. Setty // *Electrodeposition and Surface Treatment*. – 1973. – Vol. 2, № 74. – P. 223-231.

12. Килимник А. Б. Электрохимические процессы на постоянном и переменном токе / А. Б. Килимник // Вестник ТГТУ. – 2008. – Т. 14, № 4. – С. 903-916.
13. Стевич З. Управление импульсным режимом в гальванотехнике / З. Стевич, М. Райчич-Вуясинович, З. Стоилькович // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2003. – № 5. – С. 51-52.
14. Ніколенко Ю. В. Розробка та застосування апаратно-програмного комплексу у правлінні процесом електролітичного осадження міді в режимі стохастичних коливань / Ю. В. Ніколенко, В. А. Дідук, Я. Д. Король, Ю. О. Ляшенко // Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки». – 2016. №1. – С. 27-29.
15. Дерев'янюк С. І. Дослідження впливу поверхневої механічної обробки тертям за технологією SMAT на властивості електроосаджених прошарків міді / С. І. Дерев'янюк, В. М. Тютенко, Я. Д. Король, Ю. О. Ляшенко // Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки». – 2016. №1. – С. 44-45.
16. Капица М. Гальваническая металлизация в производстве печатных плат / М. Капица // Технологии в электронной промышленности. – 2006. №2. – С. 20-24.
17. Yin L. On the root cause of Kirkendall voiding in Cu_3Sn /L. Yin, P. Borgesen // Journal of Materials Research. – 2011. – Vol. 26, №3ю – 455-466.
18. Ушаповський Д. Ю. Спосіб керування морфологією катодного осаду на основі визначення електрохімічного опору процесу електроосадження міді / Д. Ю. Ушаповський, О. В. Лінючева, М. І. Донченко, М. В. Бик, А. С. Цимбалюк // Наукові вісті НТУУ «КПІ». – 2016. №2. – С. 114-121.
19. Русаков А. А. Рентгенография металлов / А. А. Русаков // Московская типография №4, – 1976. 475 с.
20. Штольц А. К. Рентгеновский анализ микронапряжений и размера областей когерентного рассеяния в поликристаллических материалах // А. К. Штольц, А. И. Медведев, Л. В. Курбатов // Екатеринбург: ГОУ-ВПО-УГТУ-УПИ, 2005. – С. 16-17.

References

1. Glaiter H. (2000). Nanostructured materials: basic concepts and microstructure. *Acta Materialia*, 48, 1-29.
2. Mazilkin A. A., Straumal B. B., Protasova S. G. (2007). Structural changes in aluminum alloys with intensive plastic deformation. *FTT (FTT)*, 49(5), 824-829.
3. Wang J. T., Du Z. Z., Kang F., Chen G. (2006). Heterogeneity and anisotropy in properties of copper processed by equal channel angular pressing. *Materials Science Forum*, 503-504, 663-668.
4. Lu K., Lu J. (1999). Surface nanocrystallization (SNC) of metallic materials-presentation of the concept behind a new approach. *J Mater Sci Technol*, 15, 193.
5. Lu K., Lu J. (2004). Nanostructured surface layer on metallic materials induced by surface mechanical attrition treatment. *Materials Science and Engineering: A*, 375-377, 38-45.
6. Zhang Y. S., Han Z., Wang K., Lu K. (2006). Friction and wear behaviors of nanocrystalline surface layer of pure copper. *Wear*, 260, 942-948.

7. Chan H. (2010). Development of SMAT and electrodeposition process for generating nanostructured materials and study of their tensile properties. *The Hong Kong Polytechnic University*, 21, 190.
8. Belenkyi M. A., Ivanov A. F. (1985). Electrodeposition of metal coatings: Handbook. Moscow: Metallurgy (in Rus).
9. Popov K. I. Djokic S. S., Nikolic N. D., Jovic V. D. (2016). Morphology of electrochemically and chemically deposited metals. Switzerland: Springer.
10. Medvedev A. A., Semenov S. (2005). Pulsed metallization of printed circuit boards. *Tekhnolohyy V Elektronnoi Promyshlennosti (Technology in the Electronic Industry)*, 3, 68-70.
11. Sheshadri B. S., Setty H. V. (1973). The effect of alternating current on the morphology of electrodeposited copper electrodeposition and surface treatment. *Electrodeposition and Surface Treatment*, 2(74), 223-231.
12. Kilimnik A. B. (2008). Electrochemical processes on direct and alternating current. *Vestnik TGTU (Bulletin of TSTU)*, 14(4), 903-916.
13. Stevich Z., Raychich-Vuyasinovich M., Stoilkovich Z. (2003). Control of impulse mode in electroplating. *Tekhnologiya i konstruirovaniye v elektronnoy apparature (Technology and design in electronic equipment)*, 5, 51-52.
14. Nikolenko Yu. V., Diduk V. A., Korol Ya. K., Lyashenko Yi. O. (2016). Development and application of the hardware and software complex in the board by the process of electrolytic deposition of copper in the mode of stochastic oscillations. *Visnyk Cherkaskoho Universytetu. Seriya «Fizyko-Matematychni Nauky» (Bulletin of Cherkasy University. Series "Physics and Mathematics")*, 1, 27-29.
15. Derev'yanko S. I., Tiutenko V. M., Korol Ya. D., Lyashenko Yi. O. (2016). Investigation of the influence of surface mechanical treatment of friction on the technology of SMAT on the properties of electrically deposited layers of copper. *Visnyk Cherkaskoho Universytetu. Seriya «Fizyko-Matematychni Nauky» (Bulletin of Cherkasy University. Series "Physics and Mathematics")*, 1, 44-45.
16. Kapica M. (2006). Galvanic metallization in the production of printed circuit boards. *Tekhnologii v elektronnoy promyshlennosti (Technologies in the electronics industry)*, 2, 20-24.
17. Yin L., Borgesen P. (2011). On the root cause of Kirkendall voiding in Cu₃Sn. *Journal of Materials Research*, 26(3), 455-466.
18. Ushchapovs'kiy D. Yu., Linyucheva O. V., Donchenko M. I., Bik M. V, Tsimbalyu A. S. (2016). Manual of management of the morphology of cathode sediment on the basis of determination of electrochemical resistance of the process of electrodeposition of copper. *Naukovi Visti NTUU «KPI» (Scientific reports of NTUU "KPI")*, 2, 114-121.
19. Rusakov A. A. (1971). X-ray of metals. Moscow: Moscow printing house (in Rus).
20. Shtol'ts A. K., Medvedev A. I., Kurbatov L. V. (2005). X-ray analysis of microstresses and the size of the regions of coherent scattering in polycrystalline materials. *Yekaterinburg: GOU-VPO-UTTU-UPI (Yekaterinburg: GO-WEI USTU)*, 16-17.

Додаток 1. Процедура розрахунку факторів уширення піків дифрактограм.

Аналізуючи піки дифрактограм можна встановити наступне:

1. Істинне фізичне уширення β інтерференційної лінії може бути знайдена методом апроксимації гладкими функціями (розподіл Гаусса, Коші та проміжного розподілу) [19]:

$$\beta_1 = B - b \text{ (розподіл Коші)}$$

$$\beta_2 = (1/2)(B - b + \sqrt{B(B - b)}) \text{ (проміжний розподіл)}$$

$$\beta_3 = \sqrt{B^2 - b^2} \text{ (розподіл Гаусса).}$$

2. Експериментальна загальна ширина ліній досліджуваного зразка B , виправлена на дублетність, є пов'язана з істинним фізичним уширенням цієї лінії β та експериментальною загальною шириною лінії еталона, виправленої на дублетність. Вона обчислюється за виразом [20]:

$$B = \frac{\beta \cdot b}{\int g(\theta - \theta_0) \cdot f(\theta - \theta_0)} \quad (1)$$

3. Аналогічно, β – істинне фізичне уширення лінії досліджуваного зразка, пов'язане з уширенням лінії досліджуваного зразка, що викликано мікронапругами решітки m та уширеннями лінії із-за дисперсності блоків n , виразом:

$$\beta = \frac{m \cdot n}{\int N(\theta - \theta_0) \cdot M(\theta - \theta_0)} \quad (2)$$

Якщо з умов експерименту можна встановити, що істинне фізичне уширення лінії викликане вийняткові мікронапругами або зменшенням розміру кристалів до величини меншої 0,1 мікрона, то величина відносної мікродеформації решітки ($\Delta d/d$) та розмір кристалів (D_{HKL}) можуть бути обраховані за виразами:

$$\frac{\Delta d}{d} = \frac{\beta}{4 \cdot \operatorname{tg} \theta_{HKL}}, \quad (3)$$

$$D_{HKL} = \frac{0,94\lambda}{\beta \cdot \cos \theta_{HKL}}. \quad (4)$$

В цьому випадку, перед тим як обраховувати рівень мікронапруги та розмір областей когерентного розсіювання (ОКР), необхідно встановити, яка доля участі обох факторів в фізичному уширенні кожної лінії. Тобто, необхідно окремо розрахувати параметри m (величина мікронапруги) та n (дисперсність блоків) з співвідношень:

$$\frac{\Delta d}{d} = \frac{m}{4 \cdot \operatorname{tg} \theta_{HKL}}, \quad (5)$$

$$D_{HKL} = \frac{0,94\lambda}{n \cdot \cos \theta_{HKL}}. \quad (6)$$

В цьому випадку, перед тим, як обраховувати мікронапруги та розмір областей когерентного розсіювання (ОКР) в зразку, необхідно встановити, яка доля участі обох факторів в фізичному уширенні кожної лінії, тобто потрібно окремо знайти параметри

m (величина мікронапруги) та n (дисперсність блоків). Величини m та n можна знайти з наступних співвідношень:

$$\frac{m_2}{m_1} = \frac{\operatorname{tg} \theta_2}{\operatorname{tg} \theta_1}, \quad (7)$$

$$\frac{n_1}{\beta_1} = \frac{1}{2} \left(1 - 4 \frac{m_1}{\beta_1} + \sqrt{8 \frac{m_1}{\beta_1} + 1} \right), \quad (8)$$

$$\frac{\beta_2}{\beta_1} = \frac{\left[\frac{1}{2} \cdot \frac{\cos \theta_1}{\cos \theta_2} \left(1 - 4 \frac{m_1}{\beta_1} + \sqrt{8 \frac{m_1}{\beta_1} + 1} \right) + 2 \frac{m_1}{\beta_1} \cdot \frac{\operatorname{tg} \theta_2}{\operatorname{tg} \theta_1} \right]^2}{\frac{1}{2} \cdot \frac{\cos \theta_1}{\cos \theta_2} \left(1 - 4 \frac{m_1}{\beta_1} + \sqrt{8 \frac{m_1}{\beta_1} + 1} \right) + 4 \frac{m_1}{\beta_1} \cdot \frac{\operatorname{tg} \theta_2}{\operatorname{tg} \theta_1}}. \quad (9)$$

Отже, порівнюючи дифрактограми досліджуваних зразків з дифрактограмою еталону і використовуючи формули (3) - (6), можна визначити мікроструктурні характеристики цих зразків: m (величину мікронапруги) та n (дисперсність блоків).

Summary. Tiutenko V. M., Morozovych V. V., Diduk V. A., Kolinko S. O., Lyashenko Yu. O. The influence of SMAT processing on microstructure of copper films electroplated in steady-state, reversed impulse and stochastic regimes.

In the paper we investigate the application of low-frequency mechanical processing by friction (SMAT technology) of copper films to polished polycrystalline copper in steady-state, reversed impulse and stochastic regimes. X-ray diffraction methods were used in order to reveal the influence SMAT processing on microstructure of surface layers of electroplated copper. We found broadening of diffraction peaks measured for electroplated copper, which indicates the grain refinement. The same effect is observed after SMAT processing of surfaces. But in later case this broadening is also due to appearing of microstresses inside the processed surface layers. Obtained results of x-ray analysis allow us to make following conclusions: the textured surface of copper with preferential (220) orientation appears after electroplating. The grains become misoriented again after SMAT processing of the electroplated layer. The binary Cu/Sn diffusion couples were prepared on the basis of various (electroplated and/or SMAT processed) copper substrates. It was found that the average thickness of Cu₃Sn reaction layer formed at the reaction interface is much lower for the case of SMAT processing of the involved copper substrate.

Keywords: Nanocrystalline materials, intensive plastic deformation, Surface mechanical attrition treatment (SMAT), electroplated copper, copper/tin solid state reactions, X-ray diffraction analysis.

M.G. Pantelyat

APPLICATION OF THE FINITE ELEMENT METHOD TO COMPUTER SIMULATION OF ELECTROMAGNETIC AND THERMAL PROCESSES IN INDUCTION COOKERS AND HEATED DISHES

In-house computer code EleFAnT2D developed at the Institute for Fundamentals and Theory in Electrical Engineering (IGTE) of the Graz University of Technology, Austria is used to compute by the Finite Element Method distributions of electromagnetic and thermal fields of household induction cookers. The code EleFAnT2D and developed numerical models are used during the Bachelor and Master students training at the Department for Electrical Apparatus, National Technical University “Kharkiv Polytechnic Institute”, Kharkiv, Ukraine. In the paper there are presented the developed mathematical and computer models, solved equations, initial and boundary conditions. Obtained numerical results are described and analyzed in detail. Numerical analysis carried out by students helped them to propose designs of various inductors of induction cookers as well as to develop in their Bachelor and Master Theses conceptual designs of induction cookers in whole. Illustrative examples are presented.

Key words: computer simulation, electromagnetic field, Finite Element Method, heated dishes, induction cooker, thermal field.

1. Introduction

The Department for Electrical Apparatus, National Technical University “Kharkiv Polytechnic Institute”, Kharkiv, Ukraine [1] is the only Department in Ukraine and, probably, in Europe which trains Bachelor and Master students in the field of study “Electrical Household Appliance”. Graduates of the Department are Electrical Engineers working in the area of investigation, analysis, design and operation of various household devices for heating, conditioning, cooking, etc.

To increase professional skill of its graduates the Department intensifies teaching in the field of Computational Electromagnetics. In cooperation with the Institute for Fundamentals and Theory in Electrical Engineering (IGTE) of the Graz University of Technology (TU Graz), Austria, the Department uses widely the EleFAnT2D computer code [2] developed at the IGTE to build relatively simple finite element models and simulate electromagnetic and thermal field distributions of induction cookers as examples of modern electrical household appliances. This helps students to understand principles of computational electromagnetics and make initial steps in practical numerical analysis.

2. Problem definition

Induction cookers represent a relatively new class of modern electrical household appliances – electrical kitchen stoves which heat metal dishes by eddy currents generated by electromagnetic field with frequency of 20-100 kHz. The main structural part of the induction cooker is inductor – a one-turn or multi-turn coil, the alternating current flow in which generates an electromagnetic field which in its turn induces eddy currents in heated dishes with meal.

The typical designs of one-ring and two-ring induction cookers as well as their inductor are presented in Fig. 1, 2, respectively. To investigate operation modes of household devices under consideration (power, frequency and their temporal variation, duration of heating, etc.) it is necessary to consider multiphysics phenomena taking place during their operation.



Fig. 1. Design of induction cookers: a – one-ring cooker; b – two-ring cooker.

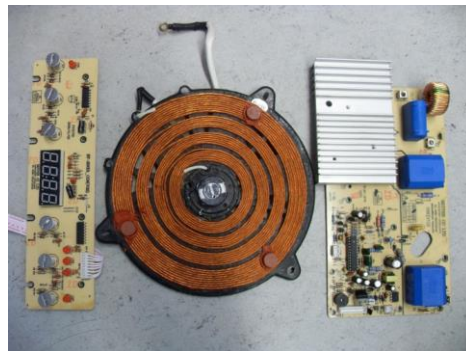


Fig. 2. Inductor of the induction cooker.

Generally, the computer simulation represents a nonlinear multiply coupled problem including electromagnetic and thermal fields. In our cases the electromagnetic field can be solved independently of the temperature distribution without respecting the dependence of electrical conductivity and magnetic permeability on temperature. This simplification is acceptable practically without any negative influence on the results because of rather lower temperature rise – till 240-280 °C (higher temperatures are unacceptable due to the possible mechanical deformations of dishes as well as loss of nutritional quality of meal).

There are publications [3-6] devoted to induction cookers' electromagnetic and thermal fields computations using various formulations and approaches. The goal of the paper is to present international collaborative academic activities of the Department for Electrical Apparatus, National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", Kharkiv, Ukraine and the Institute for Fundamentals and Theory in Electrical Engineering (IGTE) TU Graz, Austria to intensify Ukrainian students training in the field of Computational Electromagnetics using induction cookers as examples of devices under consideration. The paper describes examples of computational models developed by Ukrainian students using in-house computer code EleFAnT2D [2] during their stay at the IGTE under the guidance of their Austrian tutors as well as obtained numerical results and their utilization to develop students' conceptual designs of induction cookers.

3. Computational models of induction cookers

To facilitate students' understanding of the basic principles of Computational Electromagnetics, the finite element analysis of induction cookers' electromagnetic and thermal fields is carried out in 2D formulation. Figures 3, 4 show examples of axisymmetrical computational models built using in-house computer code EleFAnT2D [2] developed at the IGTE. The first (the simplest) model includes (see Fig. 3) a copper two-turn inductor, a pan made from soft ferromagnetic steel, a ferrite core, and dielectric subdomains. In Fig. 4 the improved model of the induction cooker is presented. We consider a modern pan

designed specifically for induction cookers: an aluminum pan with a thin bottom ferromagnetic layer which is needed to obtain proper distributions of the electromagnetic field and eddy currents in the bottom of the pan. In addition, a ferrite magnetic core of the induction cooker is designed in such a way that can significantly improve its shielding capacity, thus reducing the scattering of electromagnetic field of the inductor in the surrounding area in order to increase the efficiency of the induction cooker.

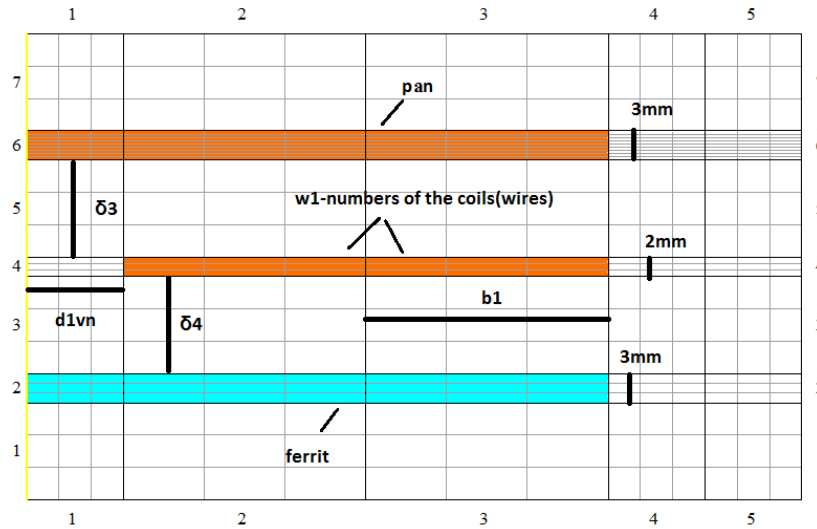


Fig. 3. The first computational model of induction cooker.

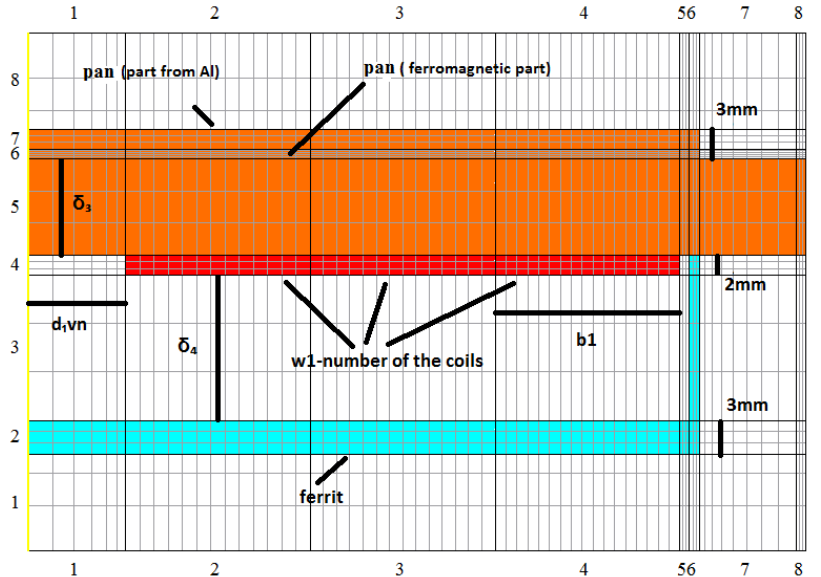


Fig. 4. The second computational model of induction cooker.

So, the second (more complicated) model includes (see Fig. 4) a copper three-turn inductor, heated dishes (an aluminum pan with a ferromagnetic layer), an improved ferrite core, and dielectric subdomains. The goal of students' investigations is to understand the influence of power, frequency, geometrical parameters of the models (see Fig. 3, 4), duration of heating, etc. on the electromagnetic and thermal field distributions.

The time dependent distribution of electromagnetic field is described by [7]:

$$\operatorname{curl}\left(\frac{1}{\mu} \operatorname{curl} \mathbf{A}\right)+\gamma \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}=\mathbf{J}_{\text {ext }}, \quad (1)$$

where $\mathbf{A}$ denotes the magnetic vector potential, μ the magnetic permeability, γ the electric conductivity and $\mathbf{J}_{\text {ext }}$ the harmonic current density applied to the inductor. Parameter γ is

generally a function of the temperature T whereas μ is a function of the temperature T and magnetic flux density B . As said above, however, in case of a relatively small temperature rise, the temperature dependencies are disregarded.

The eddy currents produced in electrically conductive bodies given by the second term on the left-hand side in equation (1) give rise to the specific Joule losses w_J :

$$w_J = \gamma \left(\frac{\partial \underline{A}}{\partial t} \right)^2 \quad (2)$$

whose magnitude decreases roughly exponentially with the distance from the surface of the heated body.

In fact, the complete solution of the parabolic equation (1) is unfeasible due to relatively long time of the heating process. That is why we simplified the model by considering harmonic magnetic field. Now equation (1) can be rewritten in terms of the phasor $\underline{A}$ of the magnetic vector potential $\mathbf{A}$ [7]:

$$\text{curl} \frac{1}{\mu} \text{curl} \underline{\mathbf{A}} + j\omega\gamma \underline{\mathbf{A}} = \underline{\mathbf{J}}_{\text{ext}}. \quad (3)$$

The computations are carried out iteratively, and at each step the permeability μ in each element containing ferromagnetic material is adjusted to the real value of the magnetic flux density. The specific Joule losses are then expressed as:

$$w_J = \gamma \omega^2 |\underline{\mathbf{A}}|^2. \quad (4)$$

The temperature field is described by [8]:

$$\text{div}(\lambda \text{grad} T) = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} - w_J, \quad (5)$$

where λ is the thermal conductivity, ρ the mass density and c the specific heat. All these parameters are generally temperature-dependent functions. The boundary conditions are respected by convection while the thermal radiation is neglected because of the relatively low temperatures.

Equations (3), (5) are solved in the axisymmetrical formulation by the Finite Element Method [9, 10] using in-house computer code EleFAnT2D [2].

4. Obtained numerical results

The distributions of electromagnetic and thermal fields are modelled by students using EleFAnT2D computer code. Examples of obtained distributions are presented in Fig. 5. Figure 5,a shows flux density distribution in the model with geometrical parameters (see Fig. 4) $d_{1\text{vn}} = 10$ mm, $b_1 = 16$ mm, $\delta_3 = 10$ mm, $\delta_4 = 2$ mm and frequency of current in the inductor of 20 kHz. In its turn, Fig. 6,b shows steady-state temperature field distribution of the heated aluminum pan with thin ferromagnetic layer.

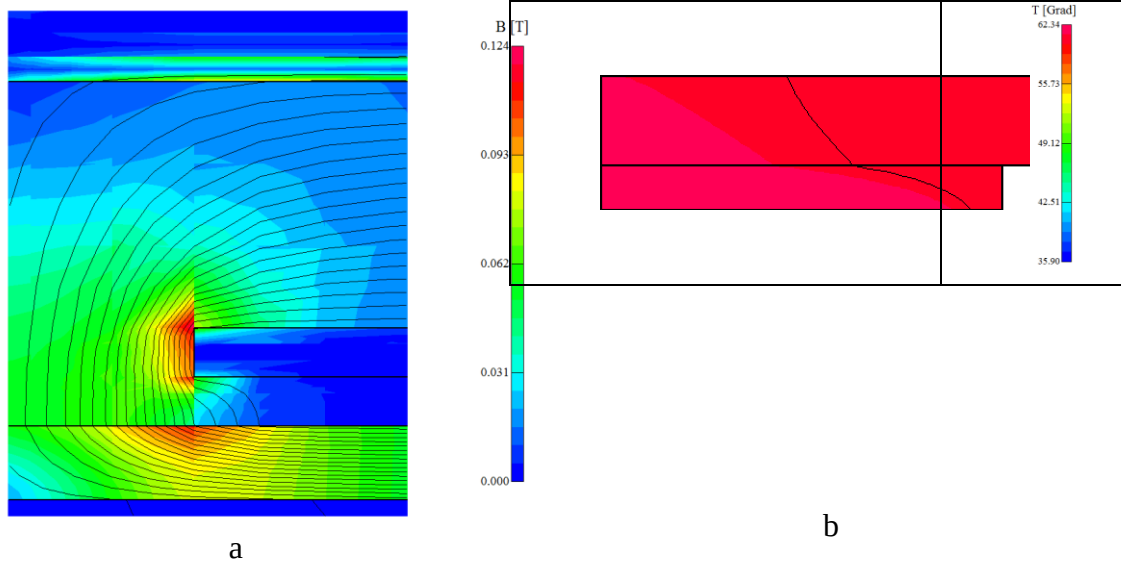


Fig. 5. Examples of obtained numerical results: a – electromagnetic field distribution; b – temperature field of the heated pan.

Numerical analysis carried out by students helps them to propose designs of various inductors of induction cookers as well as to develop in their Bachelor and Master Theses conceptual designs of induction cookers in whole. Illustrative examples are presented in Fig. 6, 7.

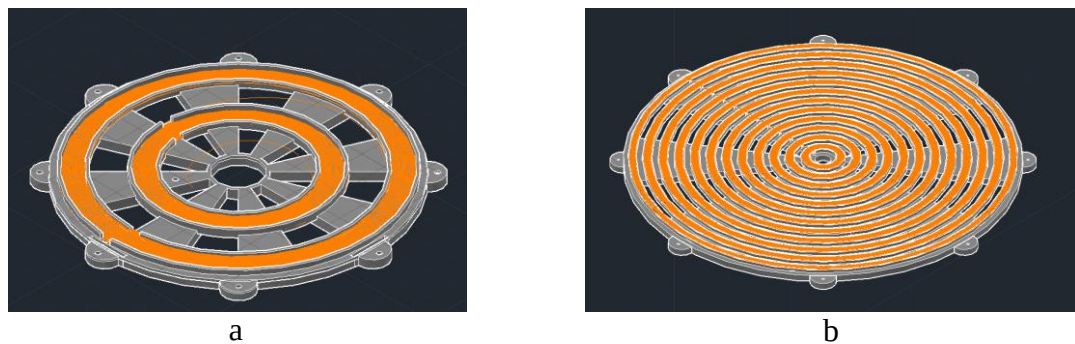


Fig. 6. Designs of induction cookers' inductors: a – 2-turn inductor; b – 12-turn inductor.

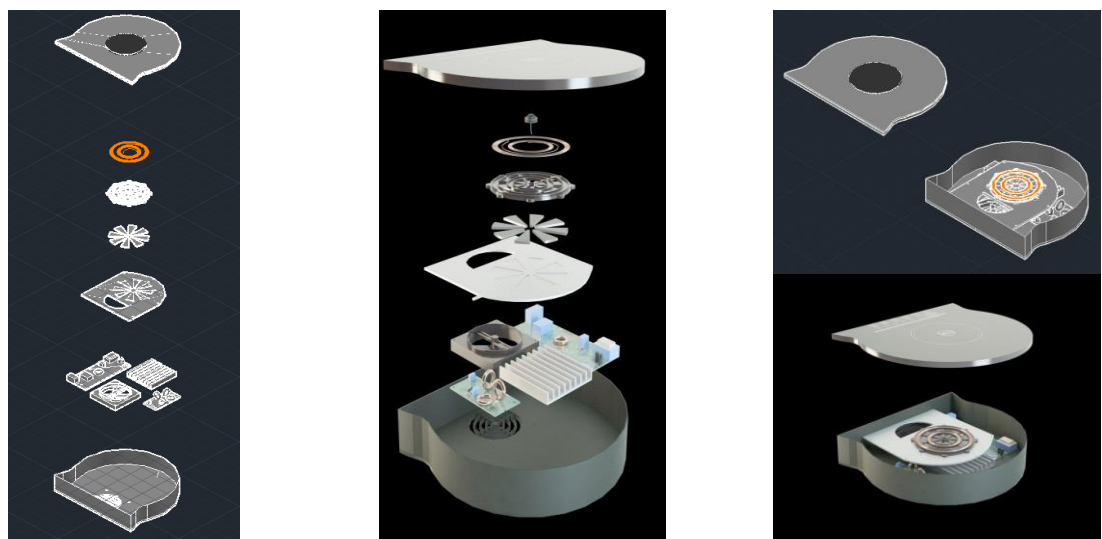


Fig. 7. Conceptual design of induction cooker with 2-turn inductor.

5. Conclusions

The Department of Electrical Apparatus, National Technical University “Kharkiv Polytechnic Institute”, Kharkiv, Ukraine uses widely the EleFAnT2D computer code developed at the IGTE to intensify teaching in the field of Computational Electromagnetics. The finite element analysis of electromagnetic and thermal fields distributions of modern electrical household appliances – induction cookers is carried out. Training computational models of induction cookers are developed and investigated by Ukrainian students under the guidance of their Austrian tutors. Obtained numerical results and their analysis are used during preparation of Bachelor and Master Theses.

References (in language original)

1. <http://web.kpi.kharkov.ua/ea/about-the-department/>
2. <http://www.igte.tugraz.at/de/elefant/elefant.html>
3. Carretero C. Passive network equivalent of an induction system for domestic cookers application based on FEA tool simulation / C. Carretero, O. Lucia, J. Acero, J.M. Bordio, R. Alonso R. // Proc. 26th Annual IEEE Applied Power Electronics Conf. and Exposition (APEC). – 6-11 March 2011, Fort Worth, Texas, USA. – P.1753-1758.
4. Carretero C. Computational modeling of two partly coupled coils supplied by a double half-bridge resonant inverter for induction heating appliances / C. Carretero, O. Lucia, J. Acero, J.M. Bordio // IEEE Transactions on Industrial Electronics. – 2013. – Vol. 60. – P. 3092-3105.
5. Meng L.C. Heating performance improvement and field study of the induction cooker / L.C. Meng, K.W.E. Cheng, K.W. Chan // Proc. of the 3rd Int. Conf. on Power Electronics Systems and Applications (PESA). – 20-22 May 2009, Hong Kong. – P. 313-317.
6. Meng L.C. Field analysis of an induction cooker with square 9-coil system by applying diverse exciting pattern / L.C. Meng, K.W.E. Cheng, P.C.K. Luk // Proc. 6th IET Int. Conf. on Power Electronics, Machines and Drives (PEMD 2012). – 27-29 March 2012, Bristol, United Kingdom. – P. 1-5.
7. Chari M.V.K. Numerical methods in electromagnetism / M.V.K. Chari, S.J. Salon. – New York: Academic, 2000. – 767 p.
8. Holman J.P. Heat transfer / J.P. Holman. – New York: McGraw-Hill, 2002. – 665 p.
9. Rao S. The finite element method in engineering / S. Rao. – Amsterdam: Elsevier, 2017. – 782 p.
10. Silvester P.P. Finite elements for electrical engineers / P.P. Silvester, R.L. Ferrari. – Cambridge: Cambridge University Press, 1996. – 494 p.

References

1. <http://web.kpi.kharkov.ua/ea/about-the-department/>
2. <http://www.igte.tugraz.at/de/elefant/elefant.html>
3. Carretero C., Lucia O., Acero J., Bordio J.M., Alonso R. (2011). Passive network equivalent of an induction system for domestic cookers application based on FEA tool simulation. *Proc. 26th Annual IEEE Applied Power Electronics Conf. and Exposition (APEC), 6-11 March 2011, Fort Worth, Texas, USA*, 1753-1758.
4. Carretero C., Lucia O., Acero J., Bordio J.M. (2013). Computational modeling of two partly coupled coils supplied by a double half-bridge resonant inverter for induction heating appliances. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 60, 3092-3105.
5. Meng L.C., Cheng K.W.E., Chan K.W. (2009). Heating performance improvement and field study of the induction cooker. *Proc. of the 3rd Int. Conf. on Power Electronics Systems and Applications (PESA), 20-22 May 2009, Hong Kong*, 313-317.
6. Meng L.C., Cheng K.W.E., Luk P.C.K. (2012). Field analysis of an induction cooker with square 9-coil system by applying diverse exciting pattern. *Proc. 6th IET Int. Conf.*

on Power Electronics, Machines and Drives (PEMD 2012), 27-29 March 2012, Bristol, United Kingdom, 1-5.

7. Chari M.V.K, Salon S.J. (2000). *Numerical methods in electromagnetism*. New York: Academic.

8. Holman J.P. (2002). *Heat transfer*. New York: McGraw-Hill.

9. Rao S. (2017). *The finite element method in engineering*. Amsterdam: Elsevier.

10. Silvester P.P., Ferrari R.L. (1996). *Finite elements for electrical engineers*. Cambridge: Cambridge University Press.

Анотація. *Пантелеят М. Г. Застосування методу скінчених елементів для комп'ютерного моделювання електромагнітних і теплових процесів у індукційних кухонних плитах і посуді, що нагрівається.* Індукційні плити являють собою відносно новий клас сучасної електропобутової техніки – кухонні електричні плити, які розігрівають металевий посуд вихровими струмами, які створюються електромагнітним полем частотою 20-100 кГц. Останнім часом такі плити отримують все більш широке використання. Комп'ютерне моделювання електромагнітних і теплових процесів у індукційних кухонних плитах і посуді, що нагрівається, представляє значний інтерес як з наукової точки зору, так і з метою підвищення рівня підготовки студентів відповідних спеціальностей. Метод скінчених елементів є найбільш поширеним чисельним методом розв'язання задач зазначеного класу. Як приклад його реалізації, для розрахунку методом скінчених елементів розподілу електромагнітного та теплового полів побутових індукційних плит у двовимірній постановці використовується власне програмне забезпечення EleFAnT2D, розроблене в Інституті основ і теорії електротехніки (IGTE) Технічного університету м. Грац, Австрія. Програма EleFAnT2D і розроблені розрахункові моделі використовуються під час підготовки бакалаврів та магістрів на кафедрі «Електричні апарати» Національного технічного університету «Харківський політехнічний інститут», Харків, Україна. У статті наведено розроблені математичні та комп'ютерні моделі, рівняння, що розв'язуються, початкові та граничні умови. Описуються та детально аналізуються отримані чисельні результати. Чисельний аналіз, проведений студентами, допоміг їм запропонувати конструкції різноманітних індукторів індукційних кухонних плит, а також розробити у бакалаврських і магістерських роботах проекти індукційних плит у цілому. Наведено ілюстративні приклади.

Ключові слова: комп'ютерне моделювання, електромагнітне поле, метод скінчених елементів, нагрітий посуд, індукційна кухонна плита, теплове поле.

Одержано редакцією 13.08.2017

Прийнято до друку 25.09.2017

І. В. Замрій

СПОСІБ ЗАДАННЯ ФУНКЦІЙ, ВИЗНАЧЕНИХ У ТЕРМІНАХ Q_3 -ЗОБРАЖЕННЯ ДІЙСНИХ ЧИСЕЛ ТА ІНВАНТАМИ У ЇХ ЗОБРАЖЕННІ

У роботі розглядається ефективний спосіб означення неперервних функцій f , визначених у термінах Q_3 -зображення дробової частини дійсного числа (яке визначається ймовірнісним вектором (q_0, q_1, q_2) з додатними координатами і є узагальненням класичного трійкового зображення, оскільки співпадає з ним при $q_0 = q_1 = q_2 = \frac{1}{3}$). А саме: функцій виду

$$f(\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n}^{Q_3}) = \Delta_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n}^{Q_3}, \text{ де } \alpha_n, \gamma_n \in A_3,$$

$$\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n}^{Q_3} \equiv \beta_{\alpha_1(x)} + \sum_{k=2}^{\infty} \left[\beta_{\alpha_k(x)} \prod_{j=1}^{k-1} q_{\alpha_j(x)} \right]$$

і при цьому $\gamma_n = \gamma_n(\alpha_1(x), \alpha_2(x), \dots, \alpha_n(x))$, але $\gamma_n = 1$ тоді і тільки тоді, коли $\alpha_n = 1$.

Для нетривіального прикладу функції f знайдено еквівалентне означення.

Знайдено спосіб означити довільну функцію f , встановлено критерій існування нескінченних рівнів функції. Доведено, що при $q_0 \neq q_2$ всі неперервні функції з цього класу є кусково-сингулярними.

Ключові слова: неперервна функція, кусково-сингулярна функція, Q_3 -зображення дійсних чисел, множина рівня функції, еквівалентне означення (спосіб задання), системи рівнянь.

1. Вступ

В останній час у конструктивній теорії неперервних функцій зі складними локальними властивостями широко використовуються різні системи зображення дійсних чисел як зі скінченим [1, 2], так і з нескінченим алфавітом [3]. Для їх теоретичного аналізу застосовуються як класичні (традиційні) засоби так і засоби метричної та ймовірнісної теорії чисел, ергодичної теорії, а також теорії фракталів (фрактальної геометрії та фрактального аналізу) [4, 5]. При цьому плідними є ідеї самоподібності, самоафінності, автомодельності [1, 6, 7, 8] тощо.

У даній роботі ми розглядаємо неперервні функції, визначені за допомогою самоподібного Q_3 -зображення (кодування) чисел відрізка $[0;1]$ і «зберігають цифру 1» [9], інтерес до яких виник на основі загального інтересу до функцій зі «складною» локальною структурою та неоднорідною поведінкою, зокрема сингулярних функцій [4, 10] (неперервних функцій, похідна яких майже скрізь у розумінні міри Лебега дорівнює нулю).

Існує чимало робіт пов'язаних з сингулярними функціями [1-4, 6, 8, 10] і не існує загального способу їх задання. Для кожної функції та системи кодування це індивідуально. Як у XX ст. [4, 10] так і у XXI ст. [3, 6, 8, 11] дослідники прагнули знайти максимально ефективне означення, використовуючи при цьому описовий метод, функціональні рівняння, системи рівнянь та інше. При дослідженні неперервних функцій, які визначені за допомогою інваріанта (цифри 1) у Q_3 -зображенні чисел, ми також стикнулися з проблемою: як достатньо просто означити функції з цієї множини,

не описуючи кожну цифру значення функції? Тому дана робота присвячена вирішенню цієї проблеми.

2. Основні поняття

Нехай $A_3 = \{0, 1, 2\}$ — алфавіт, $L = A_3 \times A_3 \times A_3 \times \dots$ — простір послідовностей елементів алфавіту, $Q_3 = \{q_0, q_1, q_2\}$ — фіксована множина додатних дійсних чисел, причому $q_0 + q_1 + q_2 = 1$.

Відомо [1], що для довільного $x \in [0, 1]$ існує послідовність $(\alpha_n) \in L$, така, що

$$x = \beta_{\alpha_1} + \sum_{k=2}^{\infty} \left[\beta_{\alpha_k} \prod_{j=1}^{k-1} q_{\alpha_j} \right] \equiv \Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}, \quad (1)$$

де $\beta_0 = 0$, $\beta_1 = q_0$, $\beta_2 = q_0 + q_1$.

Ряд $\beta_{\alpha_1} + \sum_{k=2}^{\infty} \left[\beta_{\alpha_k} \prod_{j=1}^{k-1} q_{\alpha_j} \right]$ називається Q_3 -представленням числа x , а скорочений запис $x = \Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}$ — його Q_3 -зображенням. Період у Q_3 -зображенні числа (якщо він існує) позначають у круглих дужках. Існують числа, які мають два Q_3 -зображення. Це числа з періодом (0) або (2), причому $\Delta_{c_1 \dots c_{m-1} c_m}^{Q_3(0)} = \Delta_{c_1 \dots c_{m-1} [c_m - 1]^{(2)}}^{Q_3}$. Вони називаються Q_3 -раціональними, їх множина є зліченною. Решту чисел називають Q_3 -ірраціональними.

Зазначимо, що при $q_0 = q_1 = q_2 = \frac{1}{3}$ Q_3 -зображення є класичним трійковим.

Означення 1. Нехай $(c_1, c_2, \dots, c_k)$ — фіксований впорядкований набір чисел з $\{0, 1, 2\}$. Циліндром рангу k з основою $c_1 c_2 \dots c_k$ називається множина $\Delta_{c_1 c_2 \dots c_k}^{Q_3}$ всіх чисел $x \in [0, 1]$, які мають наступне Q_3 -зображення

$$x = \Delta_{c_1 c_2 \dots c_k \alpha_{k+1} \dots \alpha_{k+m} \dots}^{Q_3}, \alpha_{k+i} \in A.$$

Безпосередньо з даного означення випливають наступні властивості циліндрів:

$$1) \Delta_{c_1 c_2 \dots c_m}^{Q_3} = \bigcup_{i \in A_3} \Delta_{c_1 c_2 \dots c_m i}^{Q_3};$$

$$2) [0; 1] = \Delta = \bigcup_{i_1 \in A_3} \bigcup_{i_2 \in A_3} \dots \bigcup_{i_n \in A_3} \Delta_{i_1 i_2 \dots i_n}^{Q_3} \text{ для довільного } n;$$

$$3) \Delta_{c_1 c_2 \dots c_m}^{Q_3} = [a, b], \text{ де } a = \Delta_{c_1 c_2 \dots c_m}^{Q_3(0)} = \beta_{c_1} + \sum_{k=2}^m \left(\beta_{c_k} \prod_{j=1}^{k-1} q_{c_j} \right), b = \Delta_{c_1 c_2 \dots c_m}^{Q_3(2)} = a + \prod_{i=1}^m q_{c_i};$$

$$4) |\Delta_{c_1 c_2 \dots c_m}^{Q_3}| = \prod_{i=1}^m q_{c_i}.$$

Внутрішність циліндра позначають $\nabla_{c_1 c_2 \dots c_k}^{Q_3}$.

Розглядаються неперервні на відрізку $[0; 1]$ функції f , визначені рівністю

$$y = f(x) = f(\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}) = \Delta_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n \dots}^{Q_3},$$

де цифра γ_n Q_3 -зображення числа y задовольняє умови:

$$1) \gamma_n = 1 \Leftrightarrow \alpha_n = 1;$$

2) якщо цифра γ_n відмінна від 1, то вона залежить від перших n цифр Q_3 -зображення аргумента x , тобто

$$\gamma_n = \gamma_n(x) = \phi_n(\alpha_1(x), \dots, \alpha_n(x)), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Означення 2. Якщо у Q_3 -зображенні аргумента $x = \Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}$ і Q_3 -зображенні значення функції

$$y = f(x) = f(\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}) = \Delta_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n \dots}^{Q_3} \quad (2)$$

цифра 1 знаходиться на тих самих місцях, тобто $\gamma_n = 1$ тоді і тільки тоді, коли $\alpha_n = 1$, то казатимемо, що функція f зберігає цифру 1 у Q_3 -зображенні чисел відрізка $[0;1]$.

Позначимо через P_c — множину всіх неперервних функцій f , що зберігають цифру 1 у Q_3 -зображенні чисел відрізка $[0;1]$.

Спочатку розглянемо нетривіальний приклад функції $f \in P_c$ та як для нього можна вирішити проблему компактного задання.

3. Еквівалентне означення нетривіальної функції f з одним нескінченним рівнем

Розглянемо функцію $y = f_1(\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}) = \Delta_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n \dots}^{Q_3}$.

Покладемо $\gamma_1 = 0$ при $\alpha_1 \neq 1$ і $f_1(\Delta_{(0)}^{Q_3}) = f_1(\Delta_{(2)}^{Q_3}) = \Delta_{(02)}^{Q_3} = \frac{q_0(1-q_2)}{1-q_0q_2}$.

Уточнимо довизначення решти цифр $\gamma_n = \phi_n(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ числа $y = f_1(x)$.

1. Якщо зображення числа починається цифрою 1, то для всіх $n > m$, де $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_m = 1$, але $\alpha_{m+1} \neq 1$, $\gamma_n = \begin{cases} \alpha_n & , \text{якщо } \alpha_{m+1} = 0, \\ 2 - \alpha_n & , \text{якщо } \alpha_{m+1} = 2, n \in \mathbb{N}. \end{cases}$

2. Якщо зображення числа починається цифрою 0 і $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_m = 0$, але $\alpha_{m+1} \neq 0$, то при $\alpha_{m+1} = 2$ та всіх $j \in \mathbb{N}$

$$\gamma_{m+j} = \begin{cases} \alpha_{m+j} & , \text{коли } t - \text{нечетне,} \\ 2 - \alpha_{m+j} & , \text{коли } t - \text{парне,} \end{cases} \quad \text{та} \quad \begin{cases} \gamma_1 = \gamma_3 = \dots = \gamma_{2k-1} = 0, \\ \gamma_2 = \gamma_4 = \dots = \gamma_{2k-2} = 2, \end{cases}$$

де $2k-1 \leq m < 2k+1$.

Якщо ж $\alpha_{m+1} = 1 = \alpha_{m+2} = \dots = \alpha_{m+r}$, але $\alpha_{m+r+1} \neq 1$, то

$$\gamma_{m+r+j} = \begin{cases} \alpha_{m+r+j} & \Leftrightarrow \begin{cases} \alpha_{m+r+1} = 0 \text{ і } m = 2k, \\ \alpha_{m+r+1} = 2 \text{ і } m = 2k+1, \end{cases} \\ 2 - \alpha_{m+r+j} & \Leftrightarrow \begin{cases} \alpha_{m+r+1} = 0 \text{ і } m = 2k+1, \\ \alpha_{m+r+1} = 2 \text{ і } m = 2k. \end{cases} \end{cases}$$

3. Якщо зображення числа починається цифрою 2 і $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_m = 2$, але $\alpha_{m+1} \neq 2$, то при $\alpha_{m+1} = 0$ та всіх $j \in \mathbb{N}$ маємо $\gamma_{m+j} = \begin{cases} \alpha_{m+j} & , \text{коли } t - \text{парне,} \\ 2 - \alpha_{m+j} & , \text{коли } t - \text{нечетне.} \end{cases}$

Якщо ж $\alpha_{m+1} = 1 = \alpha_{m+2} = \dots = \alpha_{m+r}$, але $\alpha_{m+r+1} \neq 1$, то

$$\gamma_{m+r+j} = \begin{cases} \alpha_{m+r+j} & \Leftrightarrow \begin{cases} \alpha_{m+r+1} = 0 \text{ i } m = 2k, \\ \alpha_{m+r+1} = 2 \text{ i } m = 2k+1, \end{cases} \\ 2-\alpha_{m+r+j} & \Leftrightarrow \begin{cases} \alpha_{m+r+1} = 0 \text{ i } m = 2k+1, \\ \alpha_{m+r+1} = 2 \text{ i } m = 2k. \end{cases} \end{cases}$$

Очевидно, що умова $\gamma_n = 1 \Leftrightarrow \alpha_n = 1$ виконується, тому f_1 є функцією, яка зберігає цифру 1 у Q_3 -зображенні чисел.

Теорема 1. Функціональне рівняння

$$f(x) = f(I(x)), x \in [0; 1],$$

де $I(x) = I(\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n}^{Q_3}) = \Delta_{[2-\alpha_1][2-\alpha_2] \dots [2-\alpha_n]}^{Q_3}$ — інверсор цифр [8], у класі функцій P_c має безліч розв'язків.

Доведення. Нехай k — довільне натуральне число, тоді функція

$$f(x) = \begin{cases} \sigma_1(x), & \text{якщо } x \in \left[0; \Delta_{0 \dots 0(1)}^{Q_3}\right], \\ x, & \text{якщо } x \in \left[\Delta_{0 \dots 0(1)}^{Q_3}; \Delta_{(1)}^{Q_3}\right], \\ I(x), & \text{якщо } x \in \left[\Delta_{(1)}^{Q_3}; \Delta_{2 \dots 2(1)}^{Q_3}\right], \\ \sigma_2(x), & \text{якщо } x \in \left[\Delta_{2 \dots 2(1)}^{Q_3}; 1\right], \end{cases}$$

де $\sigma_1(\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k \alpha_{k+1}}^{Q_3}) = \Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k [2-\alpha_{k+1}] \dots [2-\alpha_{k+t}]}^{Q_3}$, $\sigma_2(\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k \alpha_{k+1}}^{Q_3}) = \Delta_{[2-\alpha_1][2-\alpha_2] \dots [2-\alpha_k] \alpha_{k+1} \dots \alpha_{k+t}}^{Q_3}$.

Нехай x належить першому проміжку, тоді $x = \Delta_{0 \dots 0 \alpha_{k+1} \dots \alpha_{k+t}}^{Q_3}$.

$$f(I(\Delta_{0 \dots 0 \alpha_{k+1} \dots \alpha_{k+t}}^{Q_3})) = f(\Delta_{2 \dots 2 [2-\alpha_{k+1}] \dots [2-\alpha_{k+t}]}^{Q_3}) = \sigma_2(\Delta_{2 \dots 2 [2-\alpha_{k+1}] \dots [2-\alpha_{k+t}]}^{Q_3}) = \Delta_{0 \dots 0 [2-\alpha_{k+1}] \dots [2-\alpha_{k+t}]}^{Q_3},$$

$$f(\Delta_{0 \dots 0 \alpha_{k+1} \dots \alpha_{k+t}}^{Q_3}) = \sigma_1(\Delta_{0 \dots 0 \alpha_{k+1} \dots \alpha_{k+t}}^{Q_3}) = \Delta_{0 \dots 0 [2-\alpha_{k+1}] \dots [2-\alpha_{k+t}]}^{Q_3}.$$

Якщо $x \in [\Delta_{0 \dots 0(1)}^{Q_3}; \Delta_{(1)}^{Q_3}]$, то $x = \Delta_{0 \dots 0 \alpha_{l+1} \dots \alpha_{l+t}}^{Q_3}$, де $l < k$ або $x = \Delta_{1 \dots 10 \alpha_{p+1} \dots \alpha_{p+t}}^{Q_3}$ і

$$f(x) = x, \text{ а } f(I(x)) = f(\Delta_{2 \dots 2 [2-\alpha_{l+1}] \dots [2-\alpha_{l+t}]}^{Q_3}) = I(\Delta_{2 \dots 2 [2-\alpha_{l+1}] \dots [2-\alpha_{l+t}]}^{Q_3}) = \Delta_{0 \dots 0 \alpha_{l+1} \dots \alpha_{l+t}}^{Q_3} = x,$$

$$f(I(x)) = f(\Delta_{1 \dots 12 [2-\alpha_{p+1}] \dots [2-\alpha_{p+t}]}^{Q_3}) = I(\Delta_{1 \dots 12 [2-\alpha_{p+1}] \dots [2-\alpha_{p+t}]}^{Q_3}) = \Delta_{1 \dots 10 \alpha_{p+1} \dots \alpha_{p+t}}^{Q_3} = x.$$

Нехай $x \in [\Delta_{(1)}^{Q_3}; \Delta_{2 \dots 2(1)}^{Q_3}]$, тоді $x = \Delta_{2 \dots 2 \alpha_{l+1} \dots \alpha_{l+t}}^{Q_3}$, де $l < k$ або $x = \Delta_{1 \dots 12 \alpha_{p+2} \dots \alpha_{p+t}}^{Q_3}$ і

$f(x) = I(x)$. З іншого боку

$$f(I(\Delta_{2 \dots 2 \alpha_{l+1} \dots \alpha_{l+t}}^{Q_3})) = f(\Delta_{0 \dots 0 [2-\alpha_{l+1}] \dots [2-\alpha_{l+t}]}^{Q_3}) = \Delta_{0 \dots 0 [2-\alpha_{l+1}] \dots [2-\alpha_{l+t}]}^{Q_3} = I(x),$$

$$f(I(\Delta_{1 \dots 12 \alpha_{p+2} \dots \alpha_{p+t}}^{Q_3})) = f(\Delta_{1 \dots 10 [2-\alpha_{p+2}] \dots [2-\alpha_{p+t}]}^{Q_3}) = \Delta_{1 \dots 10 [2-\alpha_{p+2}] \dots [2-\alpha_{p+t}]}^{Q_3} = I(x).$$

Для $x \in [\Delta_{2 \dots 2(1)}^{Q_3}; 1]$, очевидно, що $x = \Delta_{2 \dots 2 \alpha_{k+1} \dots \alpha_{k+t}}^{Q_3}$ і відповідно

$$f(\Delta_{2\dots 2\alpha_{k+1}\dots\alpha_{k+t}\dots}^{Q_3}) = \sigma_2(\Delta_{2\dots 2\alpha_{k+1}\dots\alpha_{k+t}\dots}^{Q_3}) = \Delta_{0\dots 0\alpha_{k+1}\dots\alpha_{k+t}\dots}^{Q_3},$$

$$f(I(\Delta_{2\dots 2\alpha_{k+1}\dots\alpha_{k+t}\dots}^{Q_3})) = f(\Delta_{0\dots 0[2-\alpha_{k+1}]\dots[2-\alpha_{k+t}]\dots}^{Q_3}) = \sigma_1(\Delta_{0\dots 0[2-\alpha_{k+1}]\dots[2-\alpha_{k+t}]\dots}^{Q_3}) = \Delta_{0\dots 0\alpha_{k+1}\dots\alpha_{k+t}\dots}^{Q_3}.$$

Отже, f є розв'язком функціонального рівняння $f(x) = f(I(x))$.

Оскільки k – довільне натуральне число, то очевидно, що дане функціональне рівняння має безліч розв'язків. $\square$

Зауваження 1. Функція σ_1 має аналітичний вираз $\sigma_1(x) = q_0^k I\left(\frac{x}{q_0^k}\right)$.

Зауваження 2. Функція σ_2 є лінійною на циліндрах k -го рангу, причому

$$\sigma_2(x) = \frac{D}{D_0}(x - B) + A,$$

$$\text{де} \quad D = \prod_{j=1}^k q_{[2-\alpha_j]}, \quad D_0 = \prod_{j=1}^k q_{\alpha_j}, \quad B = \beta_{\alpha_1} + \beta_{\alpha_2} q_{\alpha_1} + \dots + \beta_{\alpha_k} \prod_{j=1}^{k-1} q_{\alpha_j},$$

$$A = \beta_{[2-\alpha_1]} + \dots + \beta_{[2-\alpha_k]} \prod_{j=1}^{k-1} q_{[2-\alpha_j]}.$$

Теорема 2. У класі P_c функціональне рівняння

$$f(x) = f(I(x)), x \in [0; 1], \quad (3)$$

при умові

$$f(\Delta_{(0)}^{Q_3}) = \Delta_{(02)}^{Q_3} \quad (4)$$

має єдиний розв'язок — функцію f .

Доведення. Графік кожної функції, яка зберігає цифру 1 у Q_3 -зображенні чисел, проходить через точку $M_0(\Delta_{(1)}^{Q_3}; \Delta_{(1)}^{Q_3})$. Якщо $f \in P_c$ і виконується умова (4), то

$$f(\Delta_{0\dots 0(1)}^{Q_3}) = \begin{cases} \Delta_{\overbrace{02\dots 02}^k(1)}^{Q_3} & \text{при } k = 2m, \\ \Delta_{\overbrace{02\dots 20}^k(1)}^{Q_3} & \text{при } k = 2m + 1. \end{cases}$$

В силу рівності (3) достатньо показати, що функція f , яка задовольняє умови теореми, однозначно визначена на відрізку $[0; \Delta_{(1)}^{Q_3}]$. Для цього покажемо, що функція

f однозначно визначається на кожному з відрізків виду $[\Delta_{0\dots 0(1)}^{Q_3}; \Delta_{0\dots 0(1)}^{Q_3}]$, $k \in N$. Більше того, вона є лінійною, коли k — непарне, і $f(x) = q_0^{\frac{k}{2}} q_2^{\frac{k-2}{2}} I\left(\frac{x}{q_0^{\frac{k-1}{2}}}\right) + \Delta_{\overbrace{02\dots 02}^k(0)}^{Q_3}$, коли k — парне.

Нехай $k = 1$. Оскільки (4), то $\phi_1(0) = 0$. Тоді $f(\Delta_{(1)}^{Q_3}) = \Delta_{(01)}^{Q_3}$.

Із-за неперервності функції $\phi_2(0, 2) = 2$ і $\phi_2(1, 0) = 0$. Тому очевидно, що $f(\Delta_{02(1)}^{Q_3}) = \Delta_{02(1)}^{Q_3}$ і $f(\Delta_{10(1)}^{Q_3}) = \Delta_{10(1)}^{Q_3}$.

Враховуючи неперервність функції, маємо $\phi_3(0, 2, 0) = 0$, $\phi_3(0, 2, 2) = 2$ і тому $f(\Delta_{020(1)}^{Q_3}) = \Delta_{020(1)}^{Q_3}$, $f(\Delta_{022(1)}^{Q_3}) = \Delta_{022(1)}^{Q_3}$. Крім того $\phi_3(1, 0, 0) = 0$, $\phi_3(1, 0, 2) = 2$ і $f(\Delta_{100(1)}^{Q_3}) = \Delta_{100(1)}^{Q_3}$, $f(\Delta_{102(1)}^{Q_3}) = \Delta_{102(1)}^{Q_3}$ і т.д.

Із-за неперервності функції і того, що вона зберігає цифру 1 у Q_3 -зображенні чисел, кожна з точок $\Delta_{10c_3 \dots c_n(1)}^{Q_3}$, $\Delta_{02c_3 \dots c_n(1)}^{Q_3}$, $\Delta_{01 \dots 12c_{t+3} \dots c_{t+n}(1)}^{Q_3}$, $\Delta_{1 \dots 10c_{t+2} \dots c_{t+n}(1)}^{Q_3}$ є інваріантними при довільних $n, t \in N$, $j \in \{1, 2\}$, $c_i \in A_3$. Оскільки ж множина таких точок є всюди щільною, то $f(x) = x$ при $x \in [\Delta_{0(1)}^{Q_3}; \Delta_{1(1)}^{Q_3}]$.

Нехай $k = 2$. З умови (4) випливає, що $f(\Delta_{00(1)}^{Q_3}) = \Delta_{02(1)}^{Q_3}$ і цифри $\phi_3(0, 0, 2) = 0$, $\phi_3(0, 1, 0) = 2$ однозначно визначаються, за рахунок неперервності, тоді: $f(\Delta_{002(1)}^{Q_3}) = \Delta_{020(1)}^{Q_3}$ і $f(\Delta_{010(1)}^{Q_3}) = \Delta_{012(1)}^{Q_3}$.

Оскільки $f \in P_c$, то має місце

$$f(\Delta_{002\alpha_4 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}) = \Delta_{020[2-\alpha_4] \dots [2-\alpha_n] \dots}^{Q_3}, \quad f(\Delta_{010\alpha_4 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}) = \Delta_{012[2-\alpha_4] \dots [2-\alpha_n] \dots}^{Q_3},$$

$$f(\Delta_{001 \dots 12\alpha_{k+4} \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}) = \Delta_{021 \dots 10[2-\alpha_{k+4}] \dots [2-\alpha_n] \dots}^{Q_3}, \quad f(\Delta_{01 \dots 10\alpha_{k+3} \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}) = \Delta_{01 \dots 12[2-\alpha_{k+3}] \dots [2-\alpha_n] \dots}^{Q_3}$$

для всіх $\alpha_i \in A_3$, $k, n \in N$.

Тобто, для $x \in [\Delta_{00(1)}^{Q_3}; \Delta_{0(1)}^{Q_3}]$

$$f(\Delta_{0\alpha_2\alpha_3 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}) = \Delta_{0[2-\alpha_2][2-\alpha_3] \dots [2-\alpha_n] \dots}^{Q_3} = \beta_0 + q_0 \Delta_{[2-\alpha_2][2-\alpha_3] \dots [2-\alpha_n] \dots}^{Q_3}.$$

З іншого боку $x = \Delta_{0\alpha_2\alpha_3 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3} = \beta_0 + q_0 \Delta_{\alpha_2\alpha_3 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}$, тобто $\Delta_{\alpha_2\alpha_3 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3} = \frac{x}{q_0}$. Тоді

$$I\left(\frac{x}{q_0}\right) = I(\Delta_{\alpha_2\alpha_3 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}) = \Delta_{[2-\alpha_2][2-\alpha_3] \dots [2-\alpha_n] \dots}^{Q_3}.$$

Таким чином $f(x) = q_0 I\left(\frac{x}{q_0}\right) + \Delta_{(0)}^{Q_3}$.

Припустимо, що наші міркування справедливі при $k = 2m$. Тобто, для всіх $x \in [\Delta_{0 \dots 0(1)}^{Q_3}; \Delta_{0 \dots 0(1)}^{Q_3}]$ функція f — лінійна, отже її можна подати у вигляді

$$f(\Delta_{0 \dots 0 \alpha_{2m-1} \dots \alpha_{2m+n} \dots}^{Q_3}) = a \Delta_{0 \dots 0 \alpha_{2m-1} \dots \alpha_{2m+n} \dots}^{Q_3} + b,$$

де $a > 0$, a, b — дійсні числа. А на відрізку $[\Delta_{0 \dots 0(1)}^{Q_3}; \Delta_{0 \dots 0(1)}^{Q_3}]$ має місце рівність

$$f(\Delta_{0 \dots 0 \alpha_{2m} \dots \alpha_{2m+n} \dots}^{Q_3}) = q_0^m q_2^{m-1} I\left(\frac{\Delta_{0 \dots 0 \alpha_{2m} \dots \alpha_{2m+n} \dots}^{Q_3}}{q_0^{2m-1}}\right) + \Delta_{02 \dots 02(0)}^{Q_3}.$$

Перевіримо, чи виконується вище сказане при $k = 2m+1$ та $k = 2m+2$.

Нехай $k = 2m+1$, тоді $f(\Delta_{0 \dots 0 \alpha_{2m+1} \dots \alpha_{2m+n+2} \dots}^{Q_3}) = \beta_0 + \beta_2 q_0 + q_0 q_2 f(\Delta_{0 \dots 0 \alpha_{2m-1} \dots \alpha_{2m+n} \dots}^{Q_3})$.

Застосувавши припущення, отримаємо

$$f(\Delta_{0 \dots 0 \alpha_{2m+1} \dots \alpha_{2m+n+2} \dots}^{Q_3}) = q_0 q_2 a \Delta_{0 \dots 0 \alpha_{2m-1} \dots \alpha_{2m+n} \dots}^{Q_3} + (b + q_0(q_0 + q_1)).$$

Не порушуючи загальності, виконаємо перетворення

$$f(\Delta_{0 \dots 0 \alpha_{2m+1} \dots \alpha_{2m+n+2} \dots}^{Q_3}) = \frac{a q_2}{q_0} (\beta_0 + \beta_2 q_0 + q_0^2 \Delta_{0 \dots 0 \alpha_{2m-1} \dots \alpha_{2m+n} \dots}^{Q_3}) + (b + q_0(q_0 + q_1)) =$$

$$= \frac{aq_2}{q_0} \Delta_{0\dots 0 \alpha_{2m+1} \dots \alpha_{2m+n+2} \dots}^{Q_3} + (b + q_0(q_0 + q_1)).$$

Тобто, $f(\Delta_{0\dots 0 \alpha_{2m+1} \dots \alpha_{2m+n+2} \dots}^{Q_3}) = a_* \Delta_{0\dots 0 \alpha_{2m+1} \dots \alpha_{2m+n+2} \dots}^{Q_3} + b_*$, де $a_* = \frac{aq_2}{q_0}$ і

$b_* = (b + q_0(q_0 + q_1))$ — дійсні числа, бо q_i — додатні дійсні.

Нехай

$k = 2m + 2$. Тоді

$f(\Delta_{0\dots 0 \alpha_{2m+2} \dots \alpha_{2m+n+2} \dots}^{Q_3}) = \beta_0 + \beta_2 q_0 + q_0 q_2 f(\Delta_{0\dots 0 \alpha_{2m} \dots \alpha_{2m+n} \dots}^{Q_3})$. Застосуємо припущення для

$k = 2m$, отримуємо

$$f(\Delta_{0\dots 0 \alpha_{2m+2} \dots \alpha_{2m+n+2} \dots}^{Q_3}) = \beta_0 + \beta_2 q_0 + q_0 q_2 q_0^m q_2^{m-1} I \left(\frac{\Delta_{0\dots 0 \alpha_{2m} \dots \alpha_{2m+n} \dots}^{Q_3}}{q_0^{2m-1}} \right) + \Delta_{02\dots 02(0)}^{Q_3} \cdot$$

$$\text{Тоді } f(\Delta_{0\dots 0 \alpha_{2m+2} \dots \alpha_{2m+n+2} \dots}^{Q_3}) = q_0^{m+1} q_2^m I \left(\frac{\beta_0 + \beta_2 q_0 + q_0^2 \Delta_{0\dots 0 \alpha_{2m} \dots \alpha_{2m+n} \dots}^{Q_3}}{q_0^{2m+1}} \right) + \Delta_{02\dots 02(0)}^{Q_3},$$

$$f(\Delta_{0\dots 0 \alpha_{2m+2} \dots \alpha_{2m+n+2} \dots}^{Q_3}) = q_0^{m+1} q_2^m I \left(\frac{\Delta_{0\dots 0 \alpha_{2m} \dots \alpha_{2m+n} \dots}^{Q_3}}{q_0^{2m+1}} \right) + \Delta_{02\dots 02(0)}^{Q_3}.$$

Отже, рівності справедливі при $k = 2m + 1$ та $k = 2m + 2$.

Таким чином, використавши метод математичної індукції, ми довели, що функція, яка задовольняє умови теореми однозначно визначається на кожному з відрізків $[\Delta_{0\dots 0(1)}^{Q_3}; \Delta_{0\dots 0(1)}^{Q_3}]$, $k \in N$ та вказали проміжки зростання і спадання функції.

В силу однозначності визначення очевидно, що функціональне рівняння (3) для всіх $x \in [0; 1]$ при початковій умові (4) в класі P_c має єдиний розв'язок, причому це — функція f_1 . □

Наслідок 1. Умова $f(\Delta_{(0)}^{Q_3}) = \Delta_{(02)}^{Q_3}$ однозначно визначає, що функція f має один нескінченний рівень (множина $f^{-1}(y_0) = \{x : f(x) = y_0\}$ називається множиною рівня y_0 функції f), а саме, $y_0 = \Delta_{(02)}^{Q_3}$.

4. Спосіб означення неперервних функцій f , що зберігають цифру 1 у Q_3 -зображенні чисел

Очевидно, що не всі функції f , що зберігають цифру 1 у Q_3 -зображенні чисел, є розв'язками функціональних рівнянь чи їх графіки мають якісь симетрії, тому виникає проблема компактного та ефективного означення довільної функції з P_c .

Теорема 3. Кожна неперервна функція $f(\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k \dots}^{Q_3}) = \Delta_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_k \dots}^{Q_3}$, що зберігає цифру 1 (без примноження) у Q_3 -зображенні чисел відрізка $[0; 1]$, визначається системою

$$f(x) = \begin{cases} a_k \cdot I(\frac{x}{a'}) + b_k & \text{при } x \in \Delta_{c_1 c_2 \dots c_k}^{Q_3}, \\ c_k \cdot x + d_k & \text{при } x \in \Delta_{c'_1 c'_2 \dots c'_k}^{Q_3}, \end{cases}$$

де

$$\nabla_{c_1 c_2 \dots c_k}^{Q_3} \neq \nabla_{c'_1 c'_2 \dots c'_k}^{Q_3}, a'_k = \prod_{i=1}^k q_{\alpha_i}, a_k = \prod_{j=1}^k q_{\gamma_j}, b_k = \beta_{\gamma_1} + \sum_{t=2}^k (\beta_{\gamma_t} \prod_{j=1}^{t-1} q_{\gamma_j}), c_k = \frac{\prod_{j=1}^k q_{\gamma_j}}{\prod_{i=1}^k q_{\alpha_i}},$$

$$d_k = \beta_{\gamma_1} + \sum_{t=2}^k (\beta_{\gamma_t} \prod_{j=1}^{t-1} q_{\gamma_j}) - \frac{\prod_{j=1}^k q_{\gamma_j}}{\prod_{i=1}^k q_{\alpha_i}} (\beta_{\alpha_1} + \sum_{t=2}^k (\beta_{\alpha_t} \prod_{i=1}^{t-1} q_{\alpha_i})), k \in N.$$

Причому, якщо функція має один або два нескінченні рівні, то для неї має місце рівність

$$f(\Delta_{(i)}^{Q_3}) = \Delta_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n (i[2-i])}^{Q_3} \text{ при } i, \gamma_j \in \{0, 2\}.$$

Крім того, якщо $q_0 \neq q_2$, то функція f є сингулярною на відрізках, де вона визначається $f(x) = a_k \cdot I(\frac{x}{a'_k}) + b_k$.

Доведення. Перша цифра γ_1 функції $y = f(x)$ однозначно визначається рівностями:

$$\gamma_1 = \begin{cases} 0 & \text{при } \alpha_1 = 0, \\ 2 & \text{при } \alpha_1 = 2; \end{cases} \gamma_1 = \begin{cases} 2 & \text{при } \alpha_1 = 0, \\ 0 & \text{при } \alpha_1 = 2; \end{cases} \gamma_1 = \begin{cases} 0 & \text{при } \alpha_1 = 0, \\ 0 & \text{при } \alpha_1 = 2; \end{cases}$$

$$\gamma_1 = \begin{cases} 2 & \text{при } \alpha_1 = 0, \\ 2 & \text{при } \alpha_1 = 2. \end{cases}$$

Визначивши однозначно цифру γ_1 існує лише чотири можливості для однозначного до визначення цифри γ_2 . А це значення для двох пар $(\alpha_1, \alpha_2) = (0, 0)$ і $(\alpha_1, \alpha_2) = (2, 2)$, оскільки для решти пар однозначний вибір цифри γ_2 диктується неперервністю.

Здійснивши однозначний вибір цифри γ_2 , для однозначного визначення цифри γ_3 існує чотири варіанти. Вони дозволяють вільно вибрати значення для наборів $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (0, 0, 0)$ і $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (2, 2, 2)$, а для решти вони диктуються неперервністю і т.д.

Тобто, здійснивши однозначний вибір цифри γ_{k-1} неоднозначними залишаються набори $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) = (0, 0, \dots, 0)$ і $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) = (2, 2, \dots, 2)$, а це означає, що функція однозначно визначається на всіх циліндричних множинах k -го рангу, окрім циліндрів $\Delta_{0 \dots 0}^{Q_3}$ та $\Delta_{2 \dots 2}^{Q_3}$. В силу неперервності функції $y = f(x)$ очевидно, що на циліндричних

множинах $\Delta_{c_1 c_2 \dots c_k}^{Q_3}$ k -го рангу, де вона однозначно визначається, є або лінійною або інверсною (подібною до інверсора цифр Q_3 -зображення чисел). Тоді існують такі числа $a'_k, a_k, b_k, c_k, d_k \in R$, що на кожному з циліндрів функція буде визначатися або $a'_k \cdot I(\frac{x}{a'_k}) + b_k$ або $c_k \cdot x + d_k$, де зважаючи на вище сказане та перші k цифр аргументу

$x = \Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k}^{Q_3}$ й значення функції $f(x) = \Delta_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_k}^{Q_3}$, очевидно, що

$$a'_k = \prod_{i=1}^k q_{\alpha_i}, a_k = \prod_{j=1}^k q_{\gamma_j}, b_k = \beta_{\gamma_1} + \sum_{t=2}^k (\beta_{\gamma_t} \prod_{j=1}^{t-1} q_{\gamma_j}), c_k = \frac{\prod_{j=1}^k q_{\gamma_j}}{\prod_{i=1}^k q_{\alpha_i}},$$

$$d_k = \beta_{\gamma_1} + \sum_{t=2}^k (\beta_{\gamma_t} \prod_{j=1}^{t-1} q_{\gamma_j}) - \frac{\prod_{j=1}^k q_{\gamma_j}}{\prod_{i=1}^k q_{\alpha_i}} (\beta_{\alpha_1} + \sum_{t=2}^k (\beta_{\alpha_t} \prod_{i=1}^{t-1} q_{\alpha_i})).$$

Причому, якщо всі рівні функції $y = f(x)$ скінченні, то знайдеться таке k , що всі цифри функції однозначно визначаються і для наборів $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) = (0, 0, \dots, 0)$, $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) = (2, 2, \dots, 2)$.

Якщо ж функція має хоча б один нескінченний рівень, то для одного з наборів (якщо функція має один нескінченний рівень) або одночасно для двох (якщо функція має два нескінченні рівні) $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k, \dots) = (0, 0, \dots, 0, \dots)$ та $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k, \dots) = (2, 2, \dots, 2, \dots)$ починаючи з деякого k цифри $\gamma_k, \gamma_{k+1}, \dots, \gamma_{k+n}, \dots$ однозначно визначаються і в силу неперервності та означення функції, що зберігає цифру 1 у Q_3 -зображенні чисел, дорівнюватимуть $i, 2-i, i, 2-i, \dots, i, 2-i, \dots$, де $i \in \{0, 2\}$. Тобто,

$$f(\Delta_{(i)}^{Q_3}) = \Delta_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n (i(2-i))}^{Q_3} \text{ при } i, \gamma_j \in \{0, 2\}.$$

Доведемо останню частину теореми.

Якщо на деяких циліндричних множинах $\Delta_{c_1 c_2 \dots c_k}^{Q_3}$ функція визначається $a_k \cdot I(\frac{x}{a'_k}) + b_k$, де $I(x)$ — інверсор цифр Q_3 -зображення чисел відрізка $[0; 1]$, властивості якого досліджено у роботі [8], то очевидно, що і $a_k \cdot I(\frac{x}{a'_k}) + b_k$ володіє аналогічними властивостями. Оскільки функція $I(x)$ сингулярна при $q_0 \neq q_2$, то $a_k \cdot I(\frac{x}{a'_k}) + b_k$ також сингулярна при $q_0 \neq q_2$.

5. Висновки

Використовуючи теорему 3, кожену функцію з класу P_c можна означити системою рівнянь, яка значно спрощує їх дослідження. У роботі також доведено, що при $q_0 \neq q_2$ функції $f \in P_c$ є кусково-сингулярними та вказується критерій існування нескінченних рівнів.

Список використаної літератури:

1. Працьовитий М. В. Фрактальний підхід у дослідженнях сингулярних розподілів / М. В. Працьовитий. — Київ: НПУ імені М. П. Драгоманова, 1998. — 296 с.
2. Турбин А. Ф. Фрактальные множества, функции, распределения / А. Ф. Турбин, Н. В. Працевитый. — К.: Наукова думка, 1992. — 208 с.
3. Albeverio S. On one class of functions related to Ostrogradsky series and containing singular and nowhere monotonic functions / S. Albeverio, O. Baranovskyi, Yu. Kondratiev,

М. Pratsiovytyi // Науковий часопис НПУ імені М. П. Драгоманова. Серія 1. Фізико-математичні науки. – Київ: НПУ імені М. П. Драгоманова. – 2013. – № 15. – С. 35–55.

4. Billingsley P. The singular function on bold play / P. Billingsley. – Am. Sci. – 1983. – 71. – P. 392–397.

5. Peter R. Massopust. Fractal functions, fractal surfaces, and wavelets / by Peter R. Massopust. — Academic Press; 1 edition (January 18, 1995), 383 p.

6. Працьовитий М. В. Самоафінні сингулярні та ніде не монотонні функції, пов'язані з Q -зображенням дійсних чисел / М. В. Працьовитий, А. В. Калашніков // Укр. Мат. Жур. — 2013. — Т. 65, №3. — С. 405-417.

7. Pratsiovytyi M. Fractal properties of functions defined in terms of Q -representation / M. Pratsiovytyi, N. Vasylenko // Int. Journal of Math. Analysis, Vol.7, 2013. — №64. — P. 3155 - 3169.

8. Замрій І. В. Сингулярність інверсора цифр Q_3 -зображення дробової частини дійсного числа, його фрактальні та інтегральні властивості / І. В. Замрій, М. В. Працьовитий // *Нелінійні коливання (ISSN 1562-3076)*. — **18**, 1. — Інститут математики НАН України. — 2015 р. — С. 55-70.

9. Замрій І. В. Неперервні функції, які зберігають цифру 1 Q_3 -зображення числа / М. В. Працьовитий, І. В. Замрій // *Буковинський математичний журнал*. — **3**, 3-4. — Чернівці: Чернівецький національний університет, 2015. — С. 142-159.

10. Salem R. On some singular monotonic function which are strictly increasing / R. Salem // Trans. Amer. Math. Soc. — 1943. — Vol.53, no.3. — P. 427-439.

11. Осауленко Р. Ю. Група неперервних перетворень відрізка $[0;1]$, які зберігають частоти цифр Q_s -зображення числа / Р. Ю. Осауленко // Збірник праць Інституту математики НАН України. Т. 13, № 3. — Київ: Ін-т математики НАН України, 2016. — С. 191-204.

References

1. Pratsiovytyi M. V. (1998). *Fractal Approach in Studies of Singular Distributions*. Kyiv: View of the NPU named after M. P. Dragomanov (in ukrainian).

2. Turbin A. F., Pratsiovytyi M. V. (1992). *Fractal sets, functions, distributions*. K.: Naukova dumka (in russian).

3. Albeverio S., Baranovskyi O., Kondratiev Yu., Pratsiovytyi M. (2013). On one class of functions related to Ostrogradsky series and containing singular and nowhere monotonic functions. *Scientific journal NPU of N. P. Dragomanov. Series 1. Physics and mathematics*, № 15, 35-55.

4. Billingsley P. (1983). The singular function on bold play. *Am. Sci.*, 71., 392-397.

5. Peter R. Massopust. (1995). Fractal functions, fractal surfaces, and wavelets. *Academic Press; 1 edition*, 383.

6. Pratsiovytyi M. V., Kalashnikov A. V. (2013). Self-infinitive singular and nowhere monotonic functions associated with the image of real numbers. *Ukr. Mate. Journ*, 65(3), 405-417 (in ukrainian).

7. Pratsiovytyi M., Vasylenko N. (2013). Fractal properties of functions defined in terms of Q -representation. *Int. Journal of Math. Analysis*, 7(64), 3155-3169.

8. Zamrii I. V., Pratsiovytyi M. V. (2015). Singularity of invertor the digitizer Q_3 -representation of the fractional part of the real number, its fractal and integral. *Nonlinear oscillations (ISSN 1562-3076)*, **18**(1), 55-70 (in ukrainian).

9. Pratsiovytyi M. V., Zamrii I. V. (2015). Continuous functions preserving digit 1 in the Q_3 -representation of number. *Bukovinsky Mathematical Journal*, **3**(3-4), 142-159 (in ukrainian).

10. Salem R. (1943). On some singular monotonic function which are strictly increasing. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 53(3), 427-439.

11. Osaulenko R. Yu. (2016). A group of continuous transformations of a segment that preserves the frequency of digits -the image of a number. *Collected Works of the Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Ukraine*, 13(3), 191-204 (in ukrainian).

Summary. Zamrii I. V. A method for specifying functions defined in terms of the Q_3 -representation of real numbers and invariants in their representation. There are a number of problems associated with functions, one of which is the problem of effective ways of their assignment and research. Recently, for this purpose, different systems of representations of real numbers are used with both finite and infinite alphabets, one of which is Q -representation numbers, first introduced in 1986 by M. V. Pratsiovytyi. It was used to study singular, non-differentiable, non-monotonic distribution functions. We use Q -representation of numbers for the specification and study of non-monotonic piecewise singular functions defined by invariants in their representation.

In this paper, we consider continuous functions f that store the number 1 (without multiplication) in Q_3 -representation the real numbers of the segment $[0;1]$. The latter is determined by the probabilistic vector (q_0, q_1, q_2) with positive coordinates and is a generalization of the classical triple representation: $x = \sum_{k=1}^{\infty} 3^{-k} \alpha_k(x) \equiv \Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n \dots}^3$, where $\alpha_n(x) \in A_3 \equiv \{0, 1, 2\}$. In other words, we consider the functions of the form

$$f(\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3}) = \Delta_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n \dots}^{Q_3}, \text{ where } \alpha_n, \gamma_n \in A_3,$$

$$\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n \dots}^{Q_3} \equiv \beta_{\alpha_1(x)} + \sum_{k=2}^{\infty} \left[\beta_{\alpha_k(x)} \prod_{j=1}^{k-1} q_{\alpha_j(x)} \right]$$

and thus $\gamma_n = \gamma_n(\alpha_1(x), \alpha_2(x), \dots, \alpha_n(x))$, but $\gamma_n = 1$ if and only if $\alpha_n = 1$. And another problem is solved – an effective definition of such functions, both for the compactness of their task and for the convenience of the study.

For a non trivial example of continuous functions that stores a digit 1 in Q_3 -representation, and has one infinite level, an equivalent definition is found, namely, for the function f , which is solution to the system of equations in the class of continuous functions

$$\begin{cases} f(x) = f(I(x)), \\ f(\Delta_{(0)}^{Q_3}) = \Delta_{(02)}^{Q_3}. \end{cases}$$

It is proposed a method for identifying an arbitrary continuous function f , which stores a digit 1 (without multiplication) in Q_3 -representation.

It is proved that for $q_0 \neq q_2$ all continuous functions f are piecewise singular, that is, they are distinct from constant continuous functions of bounded variation, the derivative of which is almost zero (in the sense of Lebesgue measure).

Keywords: Q_3 -representation of real numbers, continuous function, lump-singular function, equivalent to the definition (method of assignment), set of function level, system of equations.

К. Г. Левчук

ПРОЦЕС РУЙНУВАННЯ НЕГОЛОНОМНИХ В'ЯЗЕЙ ПРИХОПЛЕНОЇ БУРИЛЬНОЇ КОЛОНИ МЕТОДОМ ПОПЕРЕЧНИХ ВІБРАЦІЙ

Запропоновано дискретно-континуальну математичну модель процесу звільнення прихопленої бурильної колони, що враховує динамічне збурення, пружну деформацію вільної частини компоновки бурильних труб, формування навантаження на прихоплену зону та динаміку прихопленої компоновки бурильних труб. Модель складено у випадку розміщення вібраційного механізму поблизу зони прихоплення бурової колони для збурення поперечних вібрацій. Задачу вивільнення бурильної колони розв'язано з урахуванням зовнішньої сили, згенерованої вібратором, і сил опору прихопленої труби, викликаних тиском на неї гірської породи. В основу запропонованого методу покладено рівняння поздовжніх і згинальних коливань пружного стрижня — диференціальні рівняння гіперболічного типу в частинних похідних з двома незалежними змінними, а також молекулярно-механічну теорію тертя. У процесі розв'язання систему диференціальних рівнянь зведено до задачі Штурма-Ліувілля з крайовими умовами I та II роду з наступним застосуванням методу Фур'є. Одержано формули для визначення тиску породи на бурильну трубу для різноманітних видів прихоплень. Сформульовано рекомендації щодо зменшення коефіцієнта тертя за рахунок використання вібропристроїв. У підсумку отримано залежності, які дозволяють, скориставшись результатами геофізичних досліджень у свердловині, оцінити ефективність застосування вібраційних пристроїв для ліквідації аварій при бурінні, не порушивши міцності труб. Проведено аналіз впливу низькочастотних коливань на коефіцієнт тертя бурильних труб об стінку свердловини при збуренні поперечних вібрацій. Надано рекомендації щодо підбору частоти й амплітуди збурювальної сили, що дозволить вивільнити прихоплену колону труб і запобігти їх руйнуванню.

Ключові слова: хвильове рівняння, ліквідація прихоплень, вібратор, сили прихоплення, згинальні коливання, свердловинний осцилятор.

1. Вступ

Не зважаючи на те, що вібраційні методи ліквідації прихоплень бурильного інструменту відносять до пріоритетних напрямів, вони залишаються маловивченими. Широке використання вібропристроїв зумовлено простотою конструкції та можливістю багаторазового і довготривалого використання. Однак процеси, що виникають у бурильній колоні (БК) та зоні прихоплення, надто складні, тому більшість наукових досліджень обмежуються експериментальними роботами і натурними випробуваннями. Численні випробування, проведені на бурових свердловинах [1] і сваях, занурених у ґрунт [2, 3], з метою вивчення впливу вібрацій на величину сил опору є важливим підґрунтям для створення теорії використання вібраційних методів для вивільнення прихопленої БК. Одним із методів теоретичного обґрунтування рекомендацій, спрямованих на ліквідацію прихоплень БК, залишається математичне моделювання.

З розвитком сучасної комп'ютерної техніки стає можливим створені складні математичні моделі підняти на якісно вищий рівень, що дозволяє достатньо точно описувати динамічні процеси, які відбуваються в нафтових і газових свердловинах [4]. Пружні сили, що виникають внаслідок деформації труб БК, тиск породи на бурильні труби та величина коефіцієнту опору є основними параметрами, що визначають сили, які необхідно подолати за допомогою віброприладу.

Задачами динаміки бурильної колони займалися наступні вчені: В. П. Балицький, П. В. Балицький, В. І. Векерик, Г. Вудс, С. В. Гошовський, І. Л. Гурєєв, Д. В. Дейрінг, Ф. Дейлі, А. Г. Калінін, З. Г. Керімов, В. Є. Копилов, М. А. Мислюк, В. М. Мойсишин, П. І. Огородніков, Р. Х. Санніков, Б. З. Султанов, Є. К. Юнін, В. Г. Ясов та інші [5].

Вібраційні пристрої нерідко використовують для інтенсифікації технологічних процесів у різних інженерних конструкціях. Експериментальні випробування резонансних явищ, проведені Р. Ш. Абієвим, Б. Г. Новіцьким, Р. А. Татевосяном, Я. Е. Українським і В. Н. Челомеем, показали, що низькочастотні коливання дозволяють швидко перетворити сухе тертя у в'язке [6]. Роботу вібраторів у бурильній колоні висвітлено у роботах Л. Б. Хузіної, А. Ф. Шайхутдинова [7]. Проблема виникнення і дослідження сил тертя між трубами та стінками свердловини займався М. М. Александров, який вважав, що взаємодія у вертикальних свердловинах відбувається по замкам, а у горизонтальних – по тілу труби. Дослідження, подані у роботах З. С. Луцького показали, що коефіцієнт тертя для різних видів порід і типу промивальної рідини знаходяться в межах 0,121–0,315. Д. Д. Баркан і Н. А. Преображенська показали, що використання віброзбурювачів при правильному виборі частоти й амплітуди вібратора сили тертя і опору, що діють на зовнішню поверхню бурильної труби, вдається зменшити в 10–15 разів [8]. Вивченням механізму виникнення сил тертя, що описуються системами нелінійних диференціальних рівнянь, займалися М. А. Галахов і П. П. Усов.

Не зважаючи на те, що велику увагу дослідників було спрямовано на з'ясування механізму, причин виникнення, попередження та ліквідації прихоплень БК, досі не розроблено цілісної динамічної моделі. У поданій роботі запропоновано таку математичну модель, що охоплює процес від динамічного збурення бурильної колони до вивільнення прихопленої зони. Механічна система містить талеву систему, вільну та прихоплену компоновку бурильних труб ділянки бурильної колони, вібратор.

У даній статті пропонується аналітично подати і обґрунтувати процес вивільнення бурильного інструменту за допомогою вібраційного методу, використавши хвильову теорію поздовжніх і згинальних коливань БК та теорію тертя.

2. Математична модель прихопленої бурильної колони з осцилятором

Поздовжні коливання бурильних труб

Розрахункову схему бурильної колони з вібратором для складання математичної моделі представляємо як дискретно-континуальну на рис. 1, а. Умовно розділимо її на три секції: першу загальною довжиною l_1 , м; другу — вільну частину обважнених бурильних труб (ОБТ), кінець якої є головою прихопленої частини обважнених бурильних труб довжиною l_2 , м; третю – прихоплену частину ОБТ довжиною l_3 , м. Позначаємо густину промивальної рідини $\rho_{\text{рід}}$, кг/м³; а матеріалу, з якого виготовлено труби, ρ , кг/м³; зовнішній та внутрішній діаметри бурильних труб першої секції й обважнених бурильних труб D_i , м і d_i , м ($i = 1-3$) відповідно; модуль пружності матеріалу труб E , Н/м².

Поздовжні коливання $u_i(x_i, t)$ першої та другої секцій бурильної колони як частин підвішеного стрижня описуємо хвильовими рівняннями другого порядку:

$$\ddot{u}_i(x_i, t) + 2h_i \dot{u}_i(x_i, t) - a_i^2 u_i''(x_i, t) = g, \quad i = 1, 2, \quad (1)$$

де $\ddot{u}_i(x_i, t) = \partial^2 u_i(x_i, t) / \partial t^2$; $\dot{u}_i(x_i, t) = \partial u_i(x_i, t) / \partial t$; $u_i''(x_i, t) = \partial^2 u_i(x_i, t) / \partial x_i^2$; $h_i = \alpha_i / 2l_i (\rho F_i + \rho_{\text{рід}} F_{\text{кані}})$ — зведений коефіцієнт в'язкого опору (α_i — коефіцієнт взаємодії промивальної рідини з бурильними трубами, с⁻¹; F_i , $F_{\text{кані}}$ — площа поперечного перерізу труби і внутрішнього каналу труби відповідно, м², зокрема для

циліндричної труби $F_i = \pi(D_i^2 - d_i^2)/4$, $F_{\text{кані}} = \pi d_i^2/4$; $a_i = \sqrt{EF_i/(\rho F_i + \rho_{\text{рід}} F_{\text{кані}})}$ — швидкість розповсюдження поздовжньої хвилі, м/с; g — прискорення вільного падіння, м/с², t — поточний час, с.

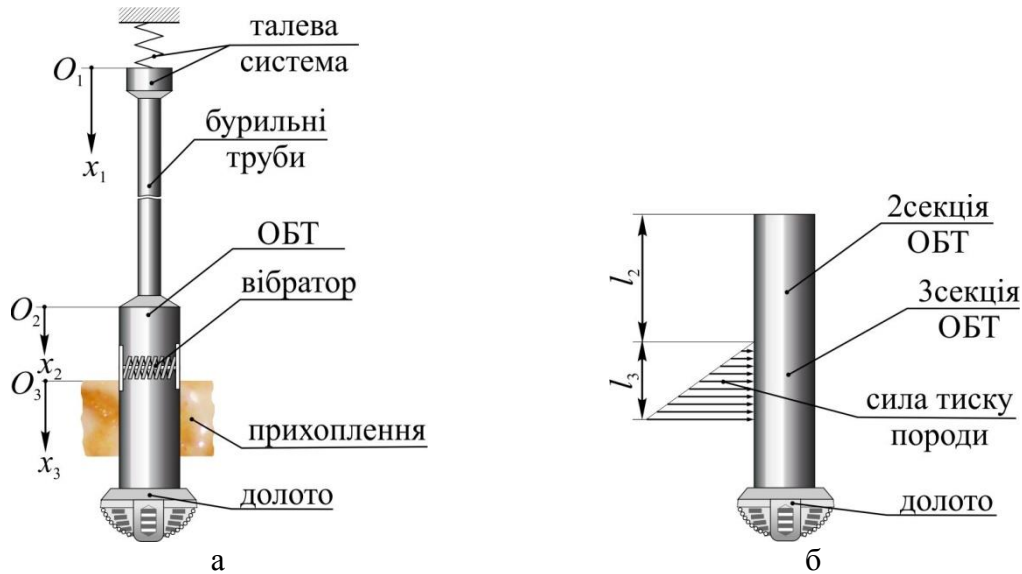


Рис. 1. Бурильна колона: а — розрахункова схема; б — прихоплена секція.
Fig. 1. Drill string: а — schematic diagram, б — sticking part.

Поздовжні коливання $u_3(x_3, t)$ прихопленої ділянки ОБТ описуємо хвильовим рівнянням з урахуванням сил тертя на боковій поверхні (рис. 1, б), що змодельовані за Фойгом з елементів Сен-Венана і Ньютона — модель Шведова–Бінгама:

$$\ddot{u}_3(x_3, t) + 2h_3\dot{u}_3(x_3, t) - a_2^2 u_3''(x_3, t) = g - f \mu_{\text{пор}} x_3^2 \text{sign}[\dot{u}_3(x_3, t)], \quad (2)$$

де f — коефіцієнт тертя; $\mu_{\text{пор}} = \mu_0 / (\rho F_2 + \rho_{\text{рід}} F_{\text{кан2}}) l_3$ — зведений коефіцієнт тертя труби об стінку свердловини, $\mu_0 = \rho L \tan^2(45^\circ - \beta/2) g/2$ (L — периметр прихопленої труби, м, зокрема для циліндричної $L = \pi D_2$; β — кут внутрішнього тертя породи).

До динамічних рівнянь руху (1), (2) бурильної колони в напрямі свердловини приєднуємо крайові умови [9]:

$$\begin{aligned} EF_1 u_1'(0, t) + m_0 g &= c_0 u_1(0, t) + m_0 \ddot{u}_1(0, t); & u_1(l_1, t) &= u_2(0, t); & u_2(l_2, t) &= u_3(0, t); \\ EF_1 u_1'(l_1, t) &= EF_2 u_2'(0, t) + q(F_2 - F_1) g l_1; & u_2'(l_2, t) &= u_3'(0, t), & u_3(l_3, t) &= -q F_2 g (l_1 + l_2 + l_3), \end{aligned} \quad (3)$$

де m_0 і c_0 — маса, кг і жорсткість, Н/м рухомих частин талевої системи; q — густина промивальної рідини, кг/м³.

Поперечні коливання бурильної колони

Динаміку поперечних коливань $w_i(x_i, t)$ секцій БК моделюємо також згідно теорії стиснуто-скручених стрижнів, що описуються хвильовими рівняннями гіперболічного типу четвертого порядку:

$$\begin{aligned} b_i^2 w_i^{IV}(x_i, t) - a_i^2 \partial(u_i'(x_i, t) w_i'(x_i, t)) / \partial x_i + \ddot{w}_i(x_i, t) &= 0, \quad i = 1, 2; \\ b_2^2 w_3^{IV}(x_3, t) - a_2^2 \partial(u_3'(x_3, t) w_3'(x_3, t)) / \partial x_3 + \ddot{w}_3(x_3, t) &= -\mu_{\text{пор}} x_3^2, \end{aligned} \quad (4)$$

де $b_i = \sqrt{EJ_i/(\rho F_i + \rho_{\text{рід}} F_{\text{кані}})}$, м²/с (J_i — осьовий момент інерції перерізів бурильної труби, м⁴, зокрема для циліндричної труби $J = \pi(D_2^4 - d_2^4)/64$; $w_i^{IV}(x_i, t) = \partial^4 w_i(x_i, t) / \partial x_i^4$; $u_i'(x_i, t) = \partial u_i(x_i, t) / \partial x_i$; $w_i'(x_i, t) = \partial w_i(x_i, t) / \partial x_i$; $\ddot{w}_i(x_i, t) = \partial^2 w_i(x_i, t) / \partial t^2$. Важливо зазначити, що пружні осьові деформації ОБТ $u_i(x_i, t)$

безпосередньо впливають на згинальні рухи обважнених бурильних труб.

Далі складаємо крайові умови для поперечних коливань (4) всіх секцій бурильної колони. Верхній кінець БК у поперечному напрямі нерухомий, тому поперечні переміщення і кут повороту [10] дорівнюють нулю: $w_1(0,t) = w'_1(0,t) = 0$. Разом з тим, на стику секцій БК переміщення, кути повороту, сили і моменти однакові:

$$w_1(l_1,t) = w_2(0,t), \quad w_2(l_2,t) = w_3(0,t), \quad w'_1(l_1,t) = w'_2(0,t), \quad w'_2(l_2,t) = w'_3(0,t), \\ J_1 w''_1(l_1,t) = J_2 w''_2(0,t), \quad w''_2(l_2,t) = w''_3(0,t), \quad J_1 w'''_1(l_1,t) = J_2 w'''_2(0,t). \quad (5)$$

Оскільки на верхньому кінці прихопленої частини ОБТ знаходиться осцилятор, а нижній кінець вільний, то:

$$w'''_3(l_3,t) = w'''_3(l_3,t) = 0, EJ_2 [w'''_3(0,t) - w'''_2(l_2,t)] = P(t), \quad (6)$$

де $P(t)$ — збурювальна сила, Н.

У положенні статичної рівноваги швидкості у поточних перерізах бурильної колони дорівнюють нулю: $\dot{u}_i(x_i,0) = \dot{w}_i(x_i,0) = 0$, $i = 1-3$, а початкові переміщення знаходимо зі статичних рівнянь рівноваги бурильної колони.

Оскільки динамічні рівняння руху (1), (2) і (4) та крайова умова (6) неоднорідні, то закони руху перерізів БК містять три складові — статичну (стаціонарний розв'язок), додаткову складову вимушених коливань і динамічну (вільні й вимушені коливання). Для знаходження нетривіального розв'язку системи однорідних рівнянь, що відповідають отриманій системі диференціальних рівнянь, скористаємось методом Фур'є. Відповідно закони руху перерізів БК подаємо у вигляді:

$$u_i(x_i,t) = X_i(x_i)T_1(t), \quad w_i(x_i,t) = Y_i(x_i)T_2(t), \quad i = 1-3. \quad (7)$$

де $X_i(x_i)$, $Y_i(x_i)$ — власні форми поздовжніх та поперечних коливань поточних перерізів бурильних труб, $T_1(t)$, $T_2(t)$ — функції часу. За допомогою рівностей (7) і однорідних крайових умов, які відповідають неоднорідним умовам (3), (5) і (6), отримуємо задачу Штурма-Ліувілля. Частотні рівняння бурильної колони визначають повний спектр p_{1k} власних поздовжніх коливань і p_{2k} власних поперечних коливань БК.

Поперечні коливання прихоплених бурильних труб

Закон поперечних рухів прихоплених бурильних труб відповідно до записаних крайових умов (5) і (6), стаціонарних розв'язків, початкових умов і власних частот набуває вигляду:

$$w_3(x_3,t) = a_{03} + a_{13}x_3 + a_{23}x_3^2 + a_{33}x_3^3 + a_{43}x_3^6 + \\ + (l_1 + l_2)[2(l_1^2 - 5l_1l_2 + l_2^2) + 3(l_1 + l_2)x_3]P(t)/6EJ_1 + \\ + \sum_{k=1}^{\infty} Y_{3k}(x_3)[B1_{3k} \sin p_{2k}^2 t + B2_{3k} \cos p_{2k}^2 t + C_{3k}(t)/(p_{2k}^4 - \omega^2)], \quad (8)$$

де $a_{03} = -\mu_0 l_3^3 / 72b_2^2 [\eta l_1(l_1(8l_1 + 12l_2 + 9l_3) + 6l_2(2l_1 + 4l_2 + 3l_3)) + l_2^2(8l_2 + 9l_3)]$,

$a_{13} = -\mu_0 l_3^3 / 12\eta b_2^2 (4l_1 + 2l_2 + 3l_3)$, $a_{23} = \mu_0 l_3^4 / 8b_2^2$, $a_{33} = -\mu_0 l_3^3 / 18b_2^2$, $a_{43} = -\mu_0 / 360b_2^2$,

$Y_{3k}(x_3) = \text{sh } \omega_{3k} x_3 + C1_{3k} \text{ch } \omega_{3k} x_3 + C2_{3k} \sin \omega_{3k} x_3 + C3_{3k} \cos \omega_{3k} x_3$, $\omega_{3k} = p_{2k} / \sqrt{b_2}$.

Коефіцієнти a_{03} , a_{13} , a_{23} , a_{33} і a_{43} відповідають рівнянням статичної рівноваги, а $C_{3k}(t)$ визначаємо за теоремою Стеклова [11] шляхом розкладання за власними функціями:

$$C_{3k}(t) = \int_0^{l_3} q_3(x_3,t) Y_{3k}(x_3) dx_3 / \int_0^{l_3} Y_{3k}^2(x_3) dx_3, \quad (9)$$

де $q_3(x_3,t) = -[l_3(l_1^2 + 2l_1l_2 + \eta l_2^2 + (l_1 + \eta l_2)x_3 + \eta x_3^2) + \eta x_3^3 / 3] \ddot{P}(t) / 2EJ_1$.

Аналогічно сталі інтегрування $B1_{3k}$, $B2_{3k}$ визначають з початкових умов:

$$T_{3k}(0) = \int_0^{l_3} w_3(x_3, 0) Y_{3k}(x_3) dx_3 \bigg/ \int_0^{l_3} Y_{3k}^2(x_3) dx_3, \quad \dot{T}_{3k}(0) = \int_0^{l_3} \dot{w}_3(x_3, 0) Y_{3k}(x_3) dx_3 \bigg/ \int_0^{l_3} Y_{3k}^2(x_3) dx_3 = 0. \quad (10)$$

З отриманого розв'язку (10) випливає, що на вільні поперечні коливання перерізів бурильних труб накладаються додаткові вимушені та високочастотні вимушені коливання, внаслідок чого збурювальна сила, прикладена до прихопленої частини труби, буде вібрувати і збурені навантаження будуть плавно зростати з ростом середньої швидкості деформованої труби.

Таким чином, поздовжні та поперечні коливання бурильної колони супроводжуються збільшенням потенціальної енергії частини БК, що знаходиться вище зони прихоплення. Із збільшенням вимушених коливань потенціальна енергія перетворюється у кінетичну, що витрачається на вивільнення прихопленої БК. Чергування хвильових процесів у радіальній площині БК зумовлює зміну потенціальної енергії вільної частини БК, що збільшує тиск на гірську породу.

Процес звільнення прихоплених бурильних труб від неголономних в'язей, що обмежують їх переміщення

Наявні методи вивільнення БК, зокрема, із застосуванням дебалансних віброзбурювачів, що базуються на радіальних переміщеннях бурильних труб за рахунок обертання дебаланса у свердловині та циклічної зміни збурювального зусилля. Поперечна вібрація бурильної колони визначає створення тиску на гірський масив (рис. 2). Як наслідок, відбувається ущільнення пластичних і незв'язних порід, а також контактне руйнування міцних і монолітних порід. Це призводить до утворення і збільшення щілини між трубами й гірськими породами, що визначає зменшення сил опору.

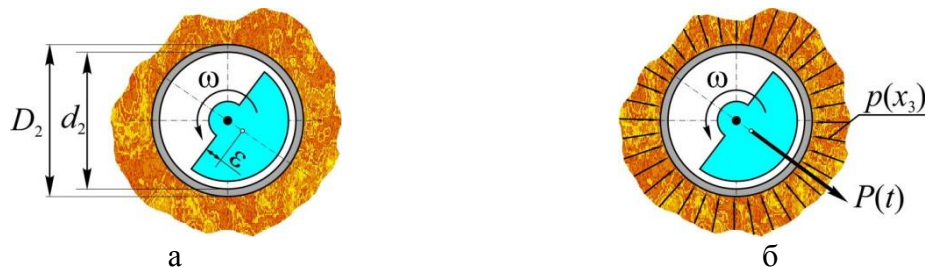


Рис. 2. Розрахункова схема дебалансного вібратора: а — кутова швидкість ω і ексцентриситет ε ; б — розподілена сила тиску породи $p(x_3)$ і збурювальна сила $P(t)$.

Fig. 2. Schematic diagram of the unbalanced vibrator: а — angular velocity ω and eccentricity ε ; б — the distributed pressure force of the $p(x_3)$ and the perturbing force $P(t)$.

Технічні характеристики електричних заглиблюваних дебалансних вібраторів, що здійснюють коливання з частотою 200 Гц, з вмонтованим електродвигуном та малими діаметрами наведено у табл. 1. Експериментальні роботи з вивчення ефективності дебалансного вібратора поперечної дії по вивільненню бурильних труб [12] показали, що у випадку його використання зусилля, яке необхідне для вивільнення БК, зменшується до 9,9 разів для суглинків, до 7,5 разів для щебеню та до 6,4 рази для супісків.

Таблиця 1

Параметри дебалансних вібраторів

Вібратор	Діаметр, мм	Довжина, мм	Ексцентриситет, мм	Маса, кг	Збурювальна сила, кН	Момент дебаланса, Н·м
ІВ-78	50	412	0,19	10	2,92	18,14
ІВ-102А	75	440	0,33	15	7,9	49,08
ІВ-95А	75	440	0,40	12,5	7,9	49,08

Для вивільнення бурильних труб необхідно зрівноважити розподілене навантаження $p(x_3)$ на всій ділянці прихоплення, щоб здолати сили, породжені тиском породи на БК. Згідно елементарної теорії опору матеріалів для лінійно-деформованої колони труб зусилля повинно досягти рівня навантаження, викликаного розподіленим тиском породи на стінки труб:

$$EJ_2 w'''(x_3, t) \geq \mu_0 x_3^2. \quad (11)$$

Зазначимо, що під дією вібраційних процесів змінюється також коефіцієнт тертя f між породою і стінкою металевої труби внаслідок виникнення фізико-механічних або фізико-хімічних процесів. Зі збільшенням амплітуди $A = m_{\text{деб}} \omega^2 \varepsilon$ вібрації ($m_{\text{деб}}$ — маса дебаланса) крива $f(A)$ стає більш пологою. Тобто, при невеликих середніх швидкостях середня сила опору поводить себе як в'язке тертя, пропорційне швидкості, а у випадку зростання амплітуди досягнута «в'язкість» спадає. Такий ефект називають вібраційним згладжуванням або зрідженням сухого тертя під дією високочастотних вібрацій. Поява внаслідок вібрації ефекту тиксотропії знижує тиск породи на прихоплену трубу:

$$p(x_3) = \begin{cases} \mu_0 x_3^2 \left(1 - \sqrt{3kt/2\mu\beta_0 x_3^2}\right), & t < \mu\beta_0 x_3^2/6; \\ 0,5\mu_0 x_3^2 e^{0,5-3kt/\mu\beta_0 x_3^2}, & t \geq \mu\beta_0 x_3^2/6. \end{cases} \quad (12)$$

де k — коефіцієнт проникності породи, м^2 ; μ — динамічний коефіцієнта в'язкості, $\text{Па}\cdot\text{с}$; β — коефіцієнт, що характеризує розструктурування породи, $(\text{Па})^{-1}$.

Обираючи параметри вібрації: амплітуду і частоту, варто пам'ятати, що руйнування БК пов'язано із дією геологічних і технічних чинників таких, як напруження й деформації. Якщо напруження перевищить допустиму величину в одному із перерізів труби, то вона здеформується і це може призвести до аварії.

3. Результати

За допомогою комп'ютерного моделювання було розраховано спектр частот поперечних коливань (табл. 2) для компоновки бурильної колони: $m_0 = 9855$ кг; $c_0 = 53$ МН/м; $E = 210$ ГПа; $D_1 = 127$ мм, $D_2 = 177,8$ мм, $d_1 = 107$ мм, $d_2 = 71,4$ мм; $\rho = 7800$ кг/м³; $l_1 = 1400$ м, $l_2 = 130$ м, $l_3 = 40$ м; $\alpha_1 = 48,4$ кг/с, $\alpha_2 = 380,4$ кг/с; $q = 1200$ кг/м³; $f = 0,3$.

Таблиця 2

Власні частоти поперечних коливань бурильної колони

Частота	p_{21}	p_{22}	p_{23}	p_{24}	p_{25}	p_{26}	p_{27}	p_{28}	p_{29}	p_{210}
Гц	0,0015	0,005	0,010	0,017	0,026	0,036	0,048	0,063	0,078	0,096

Чисельні розрахунки згідно отриманому закону руху (8) показали, що вільні поперечні коливання БК складаються із сукупності некротних гармонік (табл. 2). Дослідженнями було підтверджено, що такі коливання мають малу амплітуду і до того ж швидко згасають (рис. 3, а) із збільшенням глибини прихоплення. Натомість вимушені коливання гармонійні, а їхня амплітуда зростає по всій глибині прихоплення

(рис. 3, б).

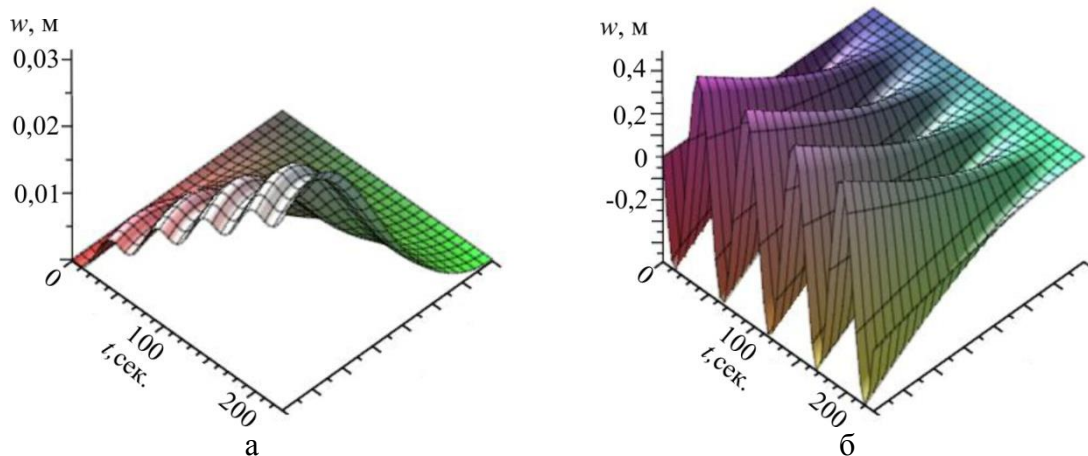


Рис. 3. Поперечні коливання в перерізах бурових труб: а — власні зі спектром частот p_{2k} ; б — вимушені (додаткова складова).

Fig. 3. Transverse oscillations in the sections of drill pipes: a — own with spectrum of frequencies p_{2k} ; б — forced (an additional component).

Змодельовані закони руху (8) вибраної компоновки БК показали, що збурювальна сила $P(t)$ збуджує низькочастотні гармонійні коливання по всій зоні прихоплення бурових труб (рис. 4), які підсилюються додатковою складовою (рис. 3, б).

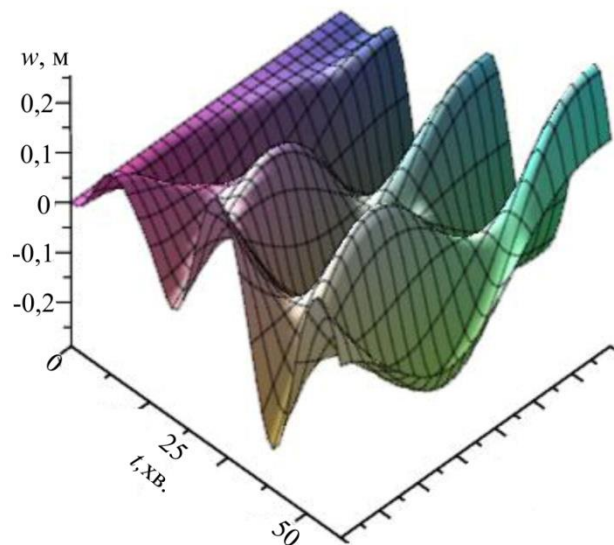


Рис. 4. Вібраційні сили в перерізах бурових металевих труб.

Fig. 4. Vibration forces in the sections of drill metal pipes.

4. Висновки

В основу запропонованого методу покладено хвильові рівняння гіперболічного типу другого і четвертого порядків. Складені системи диференціальних рівнянь розв'язано за допомогою методів Фур'є і Гальоркіна. Враховано вплив поперечних коливань БК на сили тиску гірської породи на стінки труб. У підсумку отримано динамічні умови для вивільнення прихоплених бурових труб. Обчислення запропоновано виконувати чисельними методами із застосуванням комп'ютерної техніки.

Практичні дослідження показали, якщо застосування осциляторів поздовжньої дії залишається досить ефективним при незначній довжині БК, то при глибокому бурінні

рекомендується використовувати осцилятори поперечної дії, які потрібно вмонтовувати в січеннях бурильної колони поблизу зони прихоплення бурильних труб, забезпечивши інтенсивну вібрацію.

Подяки

Автор статті висловлює щирі подяки д.т.н. Я. В. Кунцяку (ПрАТ «НДІКБ бурового інструменту», м. Київ), проф. В. І. Векерику і В. М. Мойсичину (Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу) за консультації з технічних питань буріння свердловин.

Список використаної літератури:

1. Васюк Б. Н. Усовершенствование технологии установки обсадных колонн в скважине / Б. Н. Васюк, С. В. Гошовский // Породоразрушающий и металлообрабатывающий инструмент – техника и технология его изготовления и применения. – 2011. – Вип. 14. – С. 93-97.
2. Рис В. В. Вплив вібрацій на сили прихоплення бурильних труб при ліквідації ускладнень / В. В. Рис // Прикарпат. вісн. НТШ. Сер. Число. – 2015. – Т. 29, № 1. – С. 263-274.
3. Савельев С. В. Исследование процесса вибрационного деформирования грунта / С. В. Савельев, Г. Г. Бурый // Вестник Иркутск. ГТУ. – 2013. – Т. 73, № 2. – С. 66-69.
4. Керимов З. Г. Динамические расчеты бурильной колонны / З. Г. Керимов. – М.: Недра, 1970. – 157 с.
5. Харченко Є. В. Експериментальні дослідження динаміки вивільнення прихопленої колони труб / Є. В. Харченко, А. В. Гутий, Я. В. Грень // Автоматизація виробничих процесів у машинобудуванні та приладобудуванні. – 2008. – Вип. 42. – С. 128-133.
6. Хамитов Р. Н. Электромеханические элементы в виброударозащите крупногабаритных объектов / Р. Н. Хамитов, Г. С. Аверьянов, А. А. Перчун // Омский научный вестник. Сер. Приборы, машины и технологии. – 2013. – Т. 107, № 3. – С. 170-175.
7. Хузина Л. Б. О результатах экспериментальных и теоретических исследований компоновки со скважинным осциллятором / Л. Б. Хузина, А. Ф. Шайхутдинова // Учёные записки Альметьевского госуд. нефтяного ин-та. – 2016. – Т. XV. – С. 14-19.
8. Bojana D. Mechanical Models of Friction That Exhibit Hysteresis, Stick-Slip, and the Stribeck Effect: Thesis of Dissert. for Dr. Phil.: spec. Aerospace Eng. / D. Bojana. – The University of Michigan, USA, 2012. – 183 p.
9. Moisysyn V. The Impact of Vibration Mechanism' Zone Installation on the Process of Retrieving Stuck Drill Pipes. / V. Moisysyn, K. Levchuk // Mining of Mineral Deposits. – 2016. – Vol. 10, Iss. 3. – P. 65-76.
10. Гайдайчук В. В. Неголономна динаміка коливань кружляння колон глибокого буріння. / В. В. Гайдайчук, Л. В. Шевчук // Опір матеріалів і теорія споруд. – 2014. – № 92. – С. 92-101.
11. Огородніков П. І. Вплив інтенсивності поперечних коливань на динамічний стан бурильної колони / П. І. Огородніков, В. М. Світлицький, О. О. Іванків, А. Я. Польовий // Нафтогазова галузь України. – 2016. – Т. 21, № 3. – С. 13-15.
12. Tang M. A new model for computing surge/swab pressure in horizontal wells and analysis of influencing factors / M. Tang, J. Xiong, S. He // J. Nat. Gas Sci. Eng. – 2014. – Iss. 19. – P. 337-343.

References

1. Vasyuk B. N., Hoshovsky S. V. (2011). Improvement of the technology of installing the casing in the well. *Porodorazrushayushchiy i metalloobrabatyvayushchiy instrument – tekhnika i tekhnologiya ego izgotovleniya i primeneniya (Rock Cutting and Metal Tool – Engineering and Technology its Manufacture and Use)*, 14, 93-97.
2. Rys V. V. (2015). The impact of vibration on the drill pipe forces freezing the liquidation of complications vibration breaker. *Prykarp. Visn. NTSh. Ser. Chyslo (Precarpathian Bulletin of the Shevchenko Sci. Soc.)*, 29(1), 263-274.
3. Savel'ev S. V. (2013). Studying soil vibration deformation. *Vestnik Irkutsk. GTU (Vestnik Irkutsk State Technical University)*, 73(2), 66-69.
4. Kerimov Z. G. (1970). *Dynamic calculations of a drill string*. Moscow: Nedra (in Rus.).
5. Harchenko Ye. V., Huty A. V., Hren' Ya. V. (2008). Experimental studies of the dynamics of the release sticking pipe string. *Avtomatyzatsiya vyrobnychkh protsesiv u mashynobuduvanni ta pryladobuduvanni (Automation of Production Processes in Mechan. Eng. and Instrument)*, 42, 128-133.
6. Hamitov R. N., Aver'yanov, Perchun A. A. (2013). Elektromekhanicheskie elementy v vibroudaro-zashchite krupnogabaritnykh ob'ektov. *Omskiy nauchnyi vestnik. Ser. Pribory, vashyny i tekhnologii (J. Omsk Scientific Bulletin. Ser. Devices, Machines and Technologies)*, 107(3), 170- 175.
7. Huzina L. B., Shayhutdinova A. F. (2016). On the results experimental and theoretical studies of bottom from the well oscillator. *Uchenye zapiski Al'met'evskogo gosud. neftyanogo instituta (Academic Notes Almetev State Oil Inst.)*, XV, 14-19.
8. Bojana D. (2012). *Mechanical Models of Friction That Exhibit Hysteresis, Stick-Slip, and the Stribeck Effect* (Thesis of PhD, The University of Michigan, USA).
9. Moisyshyn V., Levchuk K. (2016). The Impact of Vibration Mechanism' Zone Installation on the Process of Retrieving Stuck Drill Pipes. *Mining of Mineral Deposits*, 10(3), 65-76.
10. Haydaychuk V. V., Shevchuk L. V. (2014). Non-holonomic dynamics of whirling vibrations of deep drill columns. *Opir materialiv i teoriia sporud (Strength of Materials and Theory of Structures)*, 92, 92-101.
11. Ohorodnikov P. I., Svitlytskyi V. M., Ivankiv O. O., Poliovyi A. Ya. (2016). Influence of intensity of transverse vibrations on dynamic state of drill string. *Naftohazova haluz' Ukrayiny (Oil and Gas Industry of Ukraine)*, 21(3), 13-15.
12. Tang M., Xiong J., He S. (2014). A new model for computing surge/swab pressure in horizontal wells and analysis of influencing factors. *J. Nat. Gas Sci. Eng.*, (19), 337–343.

Summary. K. Levchuk. Destruction of Nonholonomic Constraints a Sticking Drill String by the Method of Transverse Vibrations. The proposed discrete-continuum mathematical model for releasing the trapped drill string takes into account the dynamic excitation, the elastic deformation of the free part drilling pipe assembly, and the formation of loads on the grabbed zone, as well as the dynamics of the adhered arrangement drill pipes. The model is designed for the case of the location of the vibration mechanism near the drill rig's grappling area for transverse vibration excitation. The task of releasing the drill string is solved with account of the external force generated by the vibrator and the resistance forces of the captured pipe caused by the pressure on them of the rock. The basis of the proposed method is the equations of longitudinal and bending oscillations of an elastic rod — the differential equations of hyperbolic type in partial derivatives with two independent variables, as well as the molecular-mechanical theory of friction. In the process of solving the system of differential equations was reduced to the Sturm-Lowville problem with boundary

conditions of the first and second kind with the subsequent application of the Fourier method. In the paper, formulas were obtained for determining the rock pressure per drill pipe for various types of stuck. Recommendations are formulated to reduce friction due to the use of vibration devices. As a result, dependencies were obtained, which allowed using the results of geophysical research in the well, to evaluate the effectiveness of the use of vibration devices for the elimination of accidents during drilling, without breaking the strength of the pipes. The author conducted an analysis of the influence of low frequency oscillations on the coefficient of friction of drill pipes on the wall of the well when disturbing transverse vibrations. The recommendations on the selection of frequency and amplitude of disturbing force that will free stuck pipe column and prevent their destruction.

Keywords: wave equation, elimination of stuck, vibrator, sticking forces, transverse oscillations, well oscillator.

Одержано редакцією 09.10.2017

Прийнято до друку 05.11.2017

УДК 539.219.3

PACS 66.30.-h6, 81.20.Ev

Я.Д. Король, Csaba Cserhati, Gergő Vecsei, В.М. Тютенко

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ВИВЧЕННЯ РОЗПАДУ СПЛАВІВ AL-ZN ПІД ВПЛИВОМ ТЕМПЕРАТУРНИХ РЕЖИМІВ І ДЕФОРМАЦІЇ

Методами рентгеноструктурного аналізу та електронної скануючої мікроскопії вивчено еволюцію фазового складу та морфології сплавів Al-Zn під дією пластичної деформації, тривалої витримки при кімнатній температурі та при охолодженні з різною швидкістю. Показано, що на певних стадіях природнього старіння та при певних швидкостях охолодження формується двофазний стан ГЦК-твердих розчинів на основі алюмінію, з різним вмістом цинку. Вивчено динаміку розпаду та результуючу морфологію сплавів Al-60(50)%Zn. Зафіксовано явище деформаційного розпаду цих сплавів при температурі 100С.

Ключові слова: сплав Al-Zn, твердий розчин, деформація, розпад, дифрактометрія, скануюча електронна мікроскопія.

1. Вступ

Постановка задач в даній роботі визначається як прикладними, так і фундаментальними чинниками.

З одного боку, сплави алюмінію з цинком, в тому числі леговані третім компонентом, широко використовуються у промисловості завдяки ряду технологічно цікавих особливостей, а при високих вмістах цинку проявляють здатність до

надпластичності. Параметри твердого розчину на основі алюмінію визначають фізичні, хімічні та технологічні властивості цих сплавів та присутність гетерогенних структурних складових [1,2]. Проте, не дивлячись на багаторічне вивчення системи Al-Zn, залишаються до кінця не з'ясованими порядок і механізми фазоутворення в області концентрацій цинку 40–70 мас.%. Оскільки сплави даної системи є основою для ряду литтєвих і деформаційних сплавів, становить інтерес вивчення залежності процесу розпаду від швидкості охолодження та вплив механічної деформації на розпад однорідного твердого розчину

З іншого боку, наявність аж трьох послідовних (по температурі) куполів розпаду (див. Рис.1) робить сплав Al-Zn з масовими концентраціями цинку в інтервалі 50–70 вагових процентів (і особливо поблизу вагової концентрації 60% цинку) цікавим модельним об'єктом для вивчення конкуренції фазових перетворень і впливу на цю конкуренцію зовнішніх чинників, зокрема швидкості охолодження, величини і швидкості деформації.

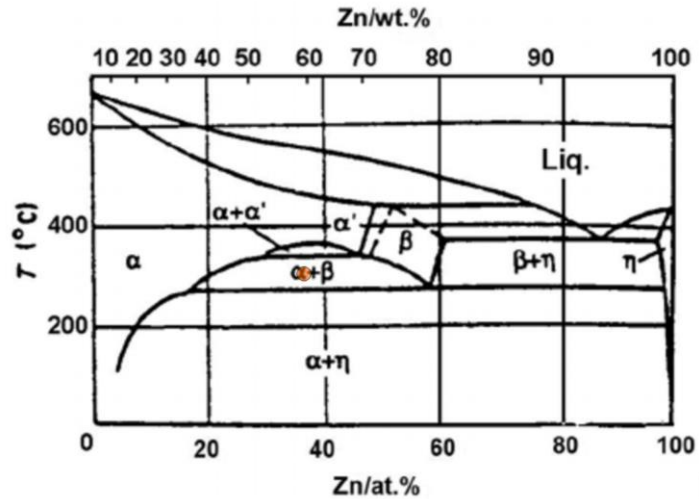


Рис.1. Діаграма стану системи алюміній-цинк.

Як відомо з емпіричного правила кроків Оствальда, при можливості ланцюжка фазових перетворень від високотемпературної фази до низькотемпературної, система зазвичай іде покроково, вибираючи кожен раз не перехід у остаточну, найвигіднішу фазу, із найбільшим вивільненням енергії, а ланцюжок переходів у фази з меншою термодинамічною рушійною силою, але зате і з найнижчим нуклеаційним бар'єром. Перевірити це можна, охолоджуючи, наприклад, 60-процентний сплав алюмінію-цинку з різними швидкостями. Тоді ми маємо шанс, в залежності від швидкості охолодження, отримати систему з одним, двома або навіть трьома твердими розчинами. Аналогічну дію може чинити деформація сплаву – адже вона призводить до генерації додаткових дефектів і відповідно, до прискорення перерозподілу концентрацій на атомному рівні.

Ряд джерел (напр., [3,4]) вказують на існування двох типів твердих розчинів Zn в Al у вузькій температурній області 350°C–270°C та евтектичної суміші фаз при низьких температурах, що формується завдяки розпаду вихідного твердого розчину.

В нашій роботі ми змінюємо швидкість охолодження та визначаємо умови, при яких реалізується деформаційний розпад.

2. Підготовка зразків та методи дослідження

Сплави Al-Zn з концентрацією цинку 30–60 масових % були виплавлені з хімічно чистих компонентів в індукційній печі та гомогенізовані протягом 12 годин при температурі 410°C. Зразки у вигляді дисків діаметром 15 і товщиною 2–3 мм гартували від температури 400°C і піддавали механічній деформації з різною швидкістю на установці з падаючим вантажем.

Швидкість зміни температури варіювали за допомогою охолодження зразка у різних середовищах (вода, масло, повітря).

Мікроструктуру зразків вивчали на електронному мікроскопі Hitachi S-4300, кристалічну структуру та фазовий склад - на рентгенівському дифрактометрі DRON у Fe K_α -випромінюванні.

Залишкову концентрацію цинку у твердому розчині визначали, подібно до роботи [5], за законом Вегарда. Для уточнення концентраційної залежності параметру ґратки ГЦК-твердого розчину проведено прецизійне вимірювання сталої ґратки загартованих від температури 410°C зразків ряду сплавів з різним вмістом цинку. На рис.2 наведено приклад обробки дифракційної лінії (400) для еталону (відпалений порошок алюмінію), загартованих сплавів Al-60%Zn, Al-50%Zn та витриманого при температурі 250°C сплаву Al-50%Zn. Видно, що відпал приводить до зміщення дифракційної лінії завдяки збільшенню параметру ГЦК-ґратки при збідненні твердого розчину цинком за рахунок розпаду. Отримана концентраційна залежність сталої ґратки добре узгоджується з законом Вегарда і представлена на рис. 3.

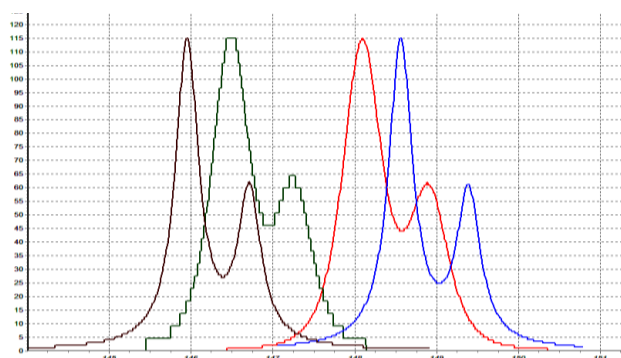


Рис.2. Апроксимовані і нормовані по інтенсивності профілі дифракційного K_α -дублету (400) зразків. Fe K_α -випромінювання.

зліва направо: Al – еталон, Al-50%Zn відпал при 250°C , Al-50%Zn, Al-60%Zn - гартування від 400°C .

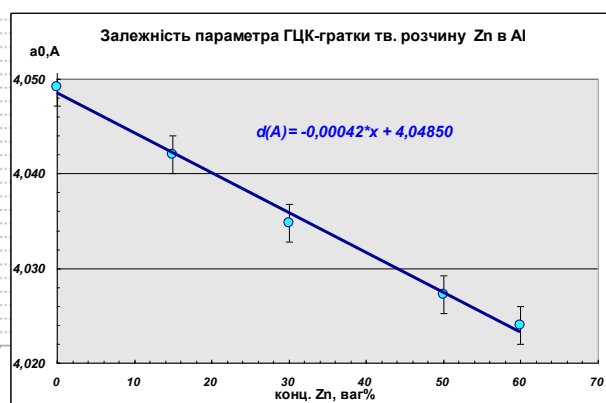


Рис. 3. Залежність параметру ґратки ГЦК-твердого розчину Al-Zn від масової частки цинку у сплаві.

Для вивчення впливу швидкості охолодження на формування структури сплаву Al-60%Zn було використані гартування у воду, трансформаторне масло, вільне охолодження зразка у повітрі та охолодження з піччю. Темп зміни температури зразка вимірювали приєднаною до зразка тонкою ХА-термопарою, сигнал якої фіксували цифровим осцилографом. Значення швидкостей охолодження склали 1200 K/c, 80 K/c, 10 K/c і 0,3 K/c відповідно для процесів гартування у воду, трансформаторне масло, вільного охолодження зразка у повітрі та охолодження з піччю.

3. Хімічний склад та морфологія сплаву Al-60%Zn у двофазній області

Зразок сплаву Al-60wt%Zn був витриманий 2 години при температурі 300°C і загартований у воду кімнатної температури. Отримано, що після гартування з області купола (точка на Рис.1), формується евтектоподібна морфологія (Рис.4а) зі складною структурою багатих цинком областей (Рис.4б).

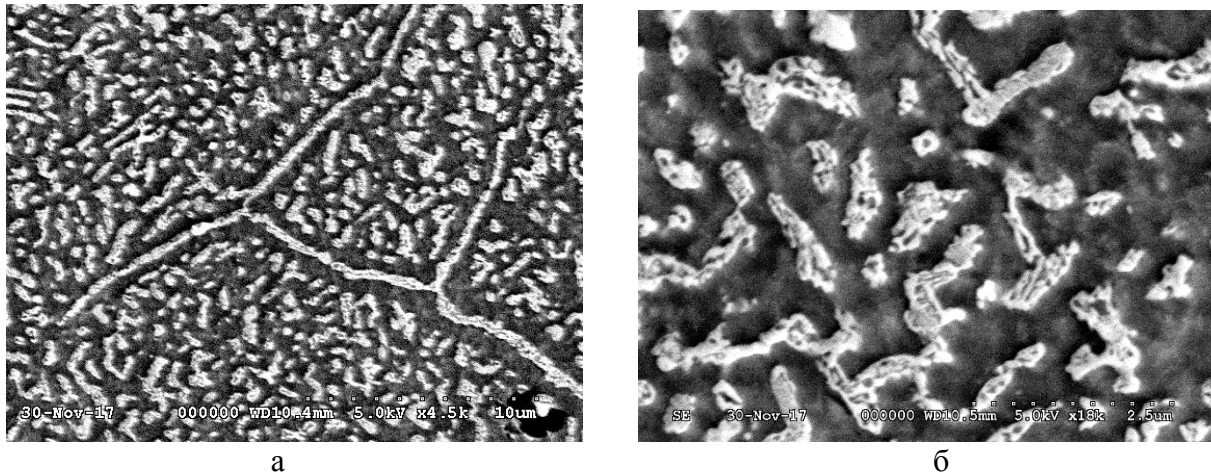


Рис. 4. Мікроструктура загартованого від 300С сплаву Al-60wt%Zn:
а – x4000, BSE б – x18000, SE.

Виділення збагаченої цинком фази спостерігається також у вигляді протяжних ліній, оточених збідненими областями (Рис.4а). Можна припустити, що ці процеси проходять по границям зерен.

Локальним рентгенівським мікроаналізом визначено середній склад збагачених цинком областей - 31% Al, 69%Zn, матриці - 51% Al, 49%Zn.

4. Динаміка розпаду при кімнатній температурі

Процес природнього старіння сплаву Al-50%Zn при кімнатній температурі досліджено протягом трьох місяців. Дифрактограми представлено на Рис.5. Видно, що ознаки розпаду твердого розчину з'являються уже через 4 дні у вигляді властивих цинку дифракційних максимумів ГЦУ-гратки (002), (100) та (101) на кутах дифракції відповідно 46,3°, 48,7° та 55,4°. Стан практично повного розпаду досягається протягом 83 діб і подальша витримка не змінює структурного стану.

Звертає на себе увагу тонка структура лінії (111) ГЦК-структури твердого розчину на основі алюмінію, що формується у часовому проміжку 11 – 34 дні. «Виступ» праворуч від максимуму – це дифракційна лінія (100) ГЦУ-цинку, а «виступ» з боку менших кутів, очевидно, формує лінія (111) ГЦК гратки другого твердого розчину на основі алюмінію, з меншим вмістом цинку.

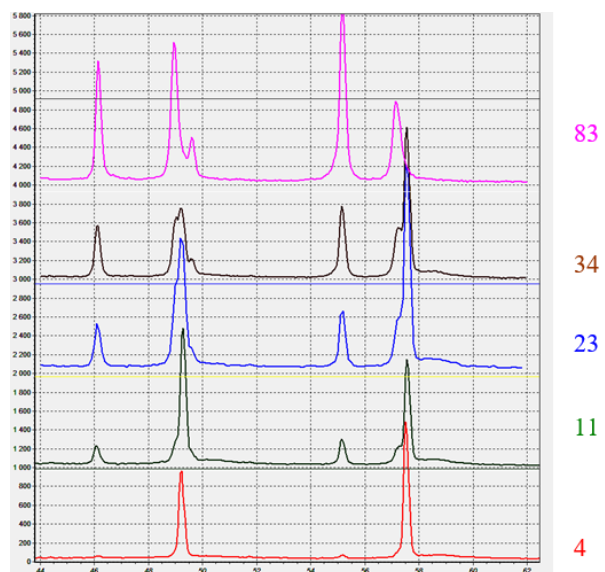


Рис.5. Дифрактограми сплаву Al-50%Zn в процесі розпаду при кімнатній температурі. Час витримки (діб) вказано біля дифрактограми. FeK α -випромінювання.

5. Мікроструктура зістарених сплавів Al-Zn

Морфологію зістарених при кімнатній температурі протягом 3 місяців сплавів Al-50wt%Zn та Al-60wt%Zn досліджено методом скануючої електронної мікроскопії. Отримано, що сплави Al-50wt%Zn включають області двох типів (Рис.6 а), які по даним

локального аналізу мають практично однаковий інтегральний склад, але відрізняються величиною зерен фаз із різним вмістом цинку. Багаті цинком окремі зерна (світлі на Рис.6б) мають розміри 0,1...0,5 мкм, що не дозволяє кількісно визначити їх склад. Області другого типу складені з нанозерен фаз, або є «острівками» вихідного твердого розчину, що не розпався. Такі області поділені на кілька фрагментів своєрідними границями (Рис.6 б).

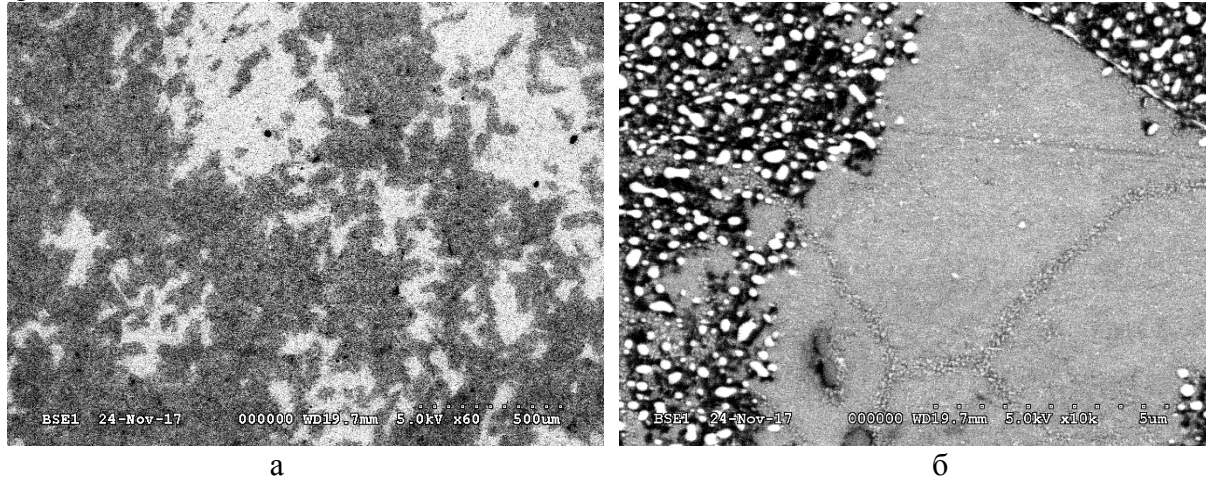


Рис. 6. Мікроструктура зістареного сплаву Al-50wt%Zn: а – x60, BSE
б – x10000, BSE.

Сплав Al-60wt%Zn після тривалого старіння при кімнатній температурі утворює суттєво іншу морфологію, подібну до двохфазної евтектики (Рис. 7). Розмір багатих цинком областей лежать в інтервалі 1...5 мкм, їх середній склад, по даним локального аналізу, 20% Al 80%Zn. Середній склад збіднених цинком зерен 65% Al, 35%Zn.

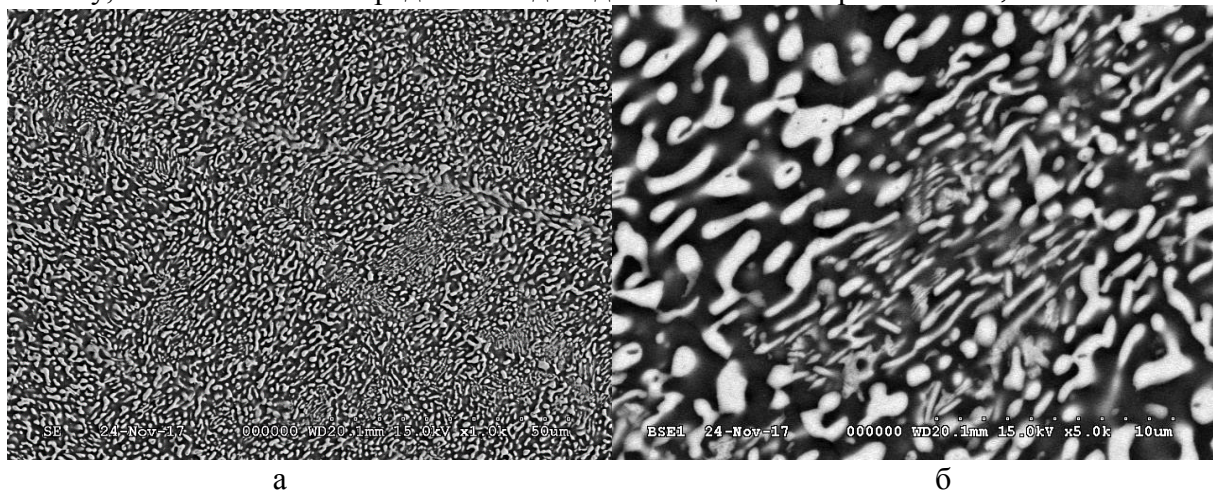


Рис. 7. Мікроструктура зістареного сплаву Al-60wt%Zn: а – x600, BSE
б – x5000, BSE.

Слід зазначити, що морфологія сплавів Al-60wt%Zn після тривалої витримки при кімнатній температурі (Рис. 7) подібна до розподілів, отриманих у роботі [6] методом математичного моделювання. Це може свідчити про подібність реальних процесів у цих сплавах фізичним принципам, використаним у згаданій роботі.

6. Вплив швидкості охолодження на структурний стан сплаву Al-60%Zn

На дифрактограмах зразків сплаву Al-60%Zn, охолоджених від температури 400°C з різними швидкостями (Рис. 8), прослідковується ріст ліній цинку та зменшення

висоти і зміщення у бік малих кутів піків ГЦК-твердого розчину на основі алюмінію. Це свідчить про виділення цинку, зменшення його концентрації у твердому розчині з відповідним збільшенням сталої ґратки.

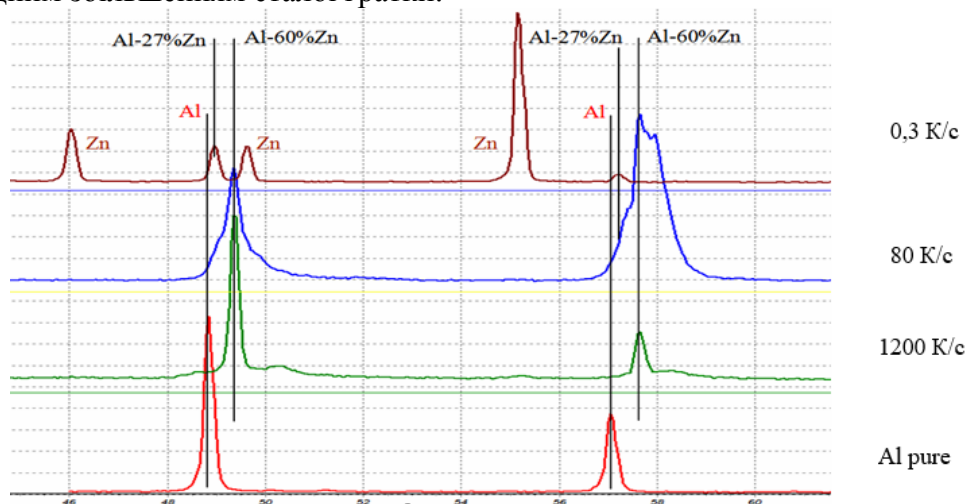


Рис.8. Дифрактограми сплаву Al-60%Zn охолоджених від 400С з різною швидкістю. Нижня дифрактограма – порошок чистого Al. FeK α -випромінювання.

При охолодженні сплаву Al-60%Zn зі швидкостями в діапазоні 500-50 K/c спостерігається особливий характер структуроутворення - формування двох типів ГЦК-фаз з різною сталою ґратки. На дифрактограмах лінії Zn відсутні – стан твердого розчину зберігається, проте лінії (111) та (200) вихідної ГЦК-структури мають багатокомпонентний профіль. Очевидно, це пов'язано з різною концентрацією Zn у твердому розчині цих фаз.

7. Розпад сплаву Al-50%Zn під дією пластичної деформації

Відомо, що розпад пересиченого твердого розчину може бути ініційований не лише температурним фактором, а також інтенсивною деформацією [7,8,9]. Подібний процес для евтектичного сплаву Pb-Sn детально досліджено експериментально і проаналізовано теоретично у роботі [10].

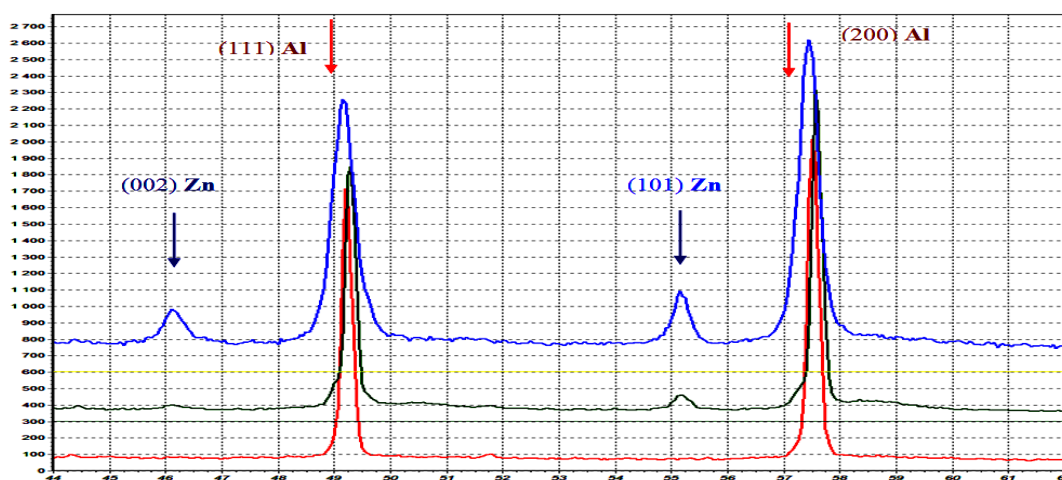


Рис.9. Дифрактограм зразків сплаву Al-50%Zn, оброблених за різними схемами

- Загартований від 420°C у воду;
- Загартований від 420°C у воду і витриманий 5 хв при температурі 100°C;
- Деформований на 50% зі швидкістю 2,9 м/с попередньо загартований зразок.

Для дослідження стійкості сплавів системи Al-Zn відносно деформації, зразок сплаву Al-50%Zn, був загартований з температурної області існування однорідного твердого розчину (400°C) та підданий ударній деформації порядку 50% при кімнатній температурі. При цьому зразок виявляв крихкість, що утруднювало коректне дослідження його структурного стану.

Для уникнення розкришування зразка, ударна деформація проводилась при підвищених температурах. Для цього була виготовлена спеціальна установка для термостатування зразка при деформації в діапазоні температур 50°C – 300°C. Оскільки монтаж і прогрів зразку вимагав 5-10 хв часу, була вибрана температура 100°C, при якій помітний розпад не відбувався.

Отримано, що при температурі 100°C зразок сплаву Al-50%Zn деформується пластично і при цьому відбувається частковий розпад ГЦК-твердого розчину з виділення цинку (Рис. 9). Також із дифрактограм видно, що при деформації лінії ГЦК-твердого розчину цинку в алюмінії уширені (внаслідок виникнення мікронапруг або подрібнення кристалітів до розмірів менше, ніж 0,2 мкм), а також зміщені у бік менших кутів (внаслідок збільшення сталої ґратки ГЦК-твердого розчину при зменшенні концентрації цинку).

На відміну від попереднього зразка, сплав Al-60%Zn при кімнатній деформувався пластично. При цьому дифракційних ознак розпаду (поява лінії цинку, кутове зміщення максимумів ГЦК-твердого розчину) не спостерігали.

8. Висновки

Отримані експериментальні результати демонструють залежність схеми і ступеню розпаду сплавів Al-Zn, близьких до еквімасових концентрацій, від швидкості охолодження, температури і деформації. Також цікавими є значні відмінності мікроструктури і пластичних властивостей близьких по складу сплавів Al-50%Zn і Al-60%Zn.

Результати можуть слугувати основою для розвитку фізичних моделей еволюції структури алюміній-цинкових сплавів при термомеханічних впливах.

Подяки

Робота виконана в рамках європейського наукового проекту EXMONAN за програмою FP7 (Marie Curie International Research Staff Exchange Scheme Fellowship IRSES within the 7th European Community Framework Program under Grant 612552), а також за підтримки МОНУ (грант 0115 U 000638).

Автори вдячні професору кафедри фізики Черкаського національного університету Андрію Михайловичу Гусаку за допомогу у постановці задачі, змістовні дискусії у ході виконання досліджень та професійні поради щодо інтерпретації результатів.

Список використаної літератури:

1. Mondolfo L. F. Aluminum Alloys: Structure and Properties / L. F. Mondolfo // Elsevier. – 2013. – 982 p.
2. 1. Gilbert Kaufman J. Aluminum Alloy Castings: Properties, Processes, and Applications / J. Gilbert Kaufman, Elwin L. Rooy // ASM International. – 2004. 340 p.
3. Skoko Željko Microstructure of Al-Zn and Zn-Al Alloys / Željko Skoko, Stanko Popović, Goran Štefanić // Croat. Chem. Acta 82 (2). – 2009. – P. 405–420.
4. Murray J. L. The Al-Zn (Aluminum-Zinc) System / J. L. Murray // Bulletin of Alloy Phase Diagrams, – 1983. – Vol. 4, №1. – P. 55–73.

5. Король Я. Д. Особливості формування та розпаду пересичених сплавів Pb-Sn / Я. Д. Король // Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки». – 2010. № 185. С. 42–47.
6. Miyazaki Toru. Computer simulations of the phase transformation in real alloy systems based on the phase field method / Toru Miyazaki, Toshiyuki Koyama, Takao Kozakai // *Materials Science and Engineering*. – 2001. – Vol. 312, № 1–2. – P. 38–49.
7. Baris A. Langdon Microstructure decomposition and unique mechanical properties in an ultrafine-grained Al-Zn alloy processed by high-pressure torsion / A. Baris, N. Q. Chinh, R. Z. Valiev, T. G. Kovove // *Mater.* – 2015. – Vol. 53, № 4. – P. 251–258.
8. Башкин И. О. Распад твердого раствора в ω -фазе системы Ti–Zr при высоких давлениях / И. О. Башкин, В. В. Шестаков, М. К. Сахаров, В. К. Федотов, Е. Г. Понятовский // *Физика твердого тела*. – 2008. – Т. 50, № 7. – С. 5.
9. Kubalova L. M. The effect of deformation treatment on the decomposition of supersaturated Ni(Nb,B) and Ni(Mo,B) solid solutions synthesized by mechanical alloying / L. M. Kubalova, V. I. Fadeeva // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2014. – Vol 586, №1. – P. 61–64.
10. Korol Ya. Deformation-Induced Phase Separation / Ya. Korol, A. Gusak // *Металлофиз. новейшие технол.* – 2013. – Т. 35, № 7. – С. 909–917.

References

1. Mondolfo L. F. (2013). *Aluminum Alloys: Structure and Properties*. Elsevier (in Eng.)
2. Gilbert Kaufman J., L. Rooy Elwin. (2004). *Aluminum Alloy Castings: Properties, Processes, and Applications*. ASM International (in Eng.)
3. Skoko Željko, Popović Stanko, Štefanić Goran. (2009). Microstructure of Al-Zn and Zn-Al Alloys. *Croat. Chem Acta*, 82(2), 405–420.
4. Murray J. L. (1983). The Al-Zn (Aluminum-Zinc) System. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 4(1), 55–73.
5. Korol Ya. (2010) Peculiarities of formation and decomposition of supersaturated alloys Pb-Sn *Visnyk Cherkaskogo universytety. Seriya «Fizyko-matematychni nauky»* (Bulletin of Cherkasy University. Series "Physics and Mathematics"), (185), 42–47.
6. Miyazaki Toru, Toshiyuki Koyama, Kozakai Takao. (2001) Computer simulations of the phase transformation in real alloy systems based on the phase field method. *Materials Science and Engineering*, 312(1–2), 38–49.
7. Baris A., Chinh N. Q., Valiev R. Z., Langdon T. G. (2015) Microstructure decomposition and unique mechanical properties in an ultrafine-grained Al-Zn alloy processed by high-pressure torsion. *Kovove Mater*, 53(4), 251–258.
8. Bashkin I. O., Shestakov V. V., Sakharov M. K., Fedotov V. K., Poniatowski E. G. (2008). Decay of the solid solution in the ω -phase of the Ti-Zr system at high pressures. *Physics of the Solid State* (in Eng.).
9. Kubalova L. M., Fadeeva V. I. (2014) The effect of deformation treatment on the decomposition of supersaturated Ni(Nb,B) and Ni(Mo,B) solid solutions synthesized by mechanical alloying. *Journal of Alloys and Compounds*, 586(1), 61–64.
10. Korol Ya., Gusak A. (2013) Deformation-Induced Phase. *Metallfiz. Noveishie Tekhnol* (Metalphysics latest technologies), 35(7), 909–917.

Summary. Ya. Korol, Csaba Cserhati, Gergő Vecsei, V. Tiutenko. *Experimental study of Al-Zn alloy decomposition at various temperature and deformation regimes.*

In this work the evolution of phase composition and microstructural characteristics of Al-50% Zn and Al-60% Zn alloys under different temperature regimes and under deformation

was investigated experimentally by X-ray diffractometry and scanning electron microscopy methods. It was found that the full decomposition of the initial homogeneous solid solution of zinc in aluminum is completed within three months at room temperature. At the same time, in the time interval of 10-40 days, a peculiar composition of fcc-solid solutions of different concentrations is formed. The final result of aging is a homogeneous solid solution of equilibrium concentrations and almost pure zinc. The SEM method shows that the microstructure of the Al-50% Zn alloy includes the fields of the same chemical composition with a different appearance of morphology. It was also shown that the morphology of the near-to-alloy alloys in the concentration range of 50-60 percent by weight has significant differences. This can be the result of the threshold nature of the concentration dependence of the processes of structuring.

The microstructure of the Al-50% Zn alloy tempered from the two-phase region under the "dome" of the phase diagram of the state is investigated. The existence of two morphological types - depleted matrix and micron formations of complex form with high zinc content is shown. By means of local X-ray microanalysis, the average composition of these regions is determined - 31% Al, 69% Zn. The composition of the matrix is 53% Al, 47% Zn.

The samples were cooled from 400C to room temperature with different rates of temperature change. It is shown that in the range of values of cooling rates 1000 K / s - 10 K / s there is an interval at which two concentric types of fcc solid solutions are formed. The diffractograms of Al-60% Zn alloy samples, cooled with the speeds characteristic for quenching in different media and free cooling from the furnace, are presented.

The phenomenon of decomposition of the solid solution of Al-50% Zn and Al-60% Zn alloys under the influence of mechanical deformation was recorded. The conditions under which the deformation of these alloys passes through is plastic, and the contribution to the decomposition of the solid solution of the thermal factor is insignificant.

Keywords: Al-Zn alloy, solid solution, deformation, decomposition, diffractometry, scanning electron microscopy.

Одержано редакцією 21.11.2017

Прийнято до друку 10.12.2017

МЕТОДИЧНІ НОТАТКИ – З ДОСВІДУ ВИКЛАДАННЯ ФІЗИКИ ТА МАТЕМАТИКИ В ВИЩІЙ ШКОЛІ

УДК 519.65

PACS 02.30.-F, 02.60.Ed, 02.60.Lj, 02.70.Dh, 04.25.-g

В.П. Денисюк, О.В. Негоденко

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ НА ОСНОВІ ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ ТРИГОНОМЕТРИЧНИХ СПЛАЙНІВ

В роботі розглядаються деякі системи фундаментальних функцій, які застосовуються в задачах побудови наближених розв'язків звичайних лінійних диференціальних рівнянь. До систем фундаментальних функцій, найбільш відомих на теперішній час, належать система фундаментальних функцій Лагранжа та системи повних, парних та непарних фундаментальних тригонометричних многочленів. Проте на рівномірних сітках існують і інші системи фундаментальних функцій, зокрема системи поліноміальних фундаментальних сплайнів, а також тригонометричних повних, парних та непарних фундаментальних сплайнів. Деякі з таких систем і розглядаються в даній роботі.

Ключові слова: фундаментальні функції, функції Лагранжа, звичайні диференціальні рівняння, прості поліноміальні сплайни, тригонометричні сплайни, математичні моделі.

1. Вступ

Сучасна наука характеризується стрімким зростанням обсягів наукової інформації. В свою чергу, можливості комп'ютерів перевищують можливості людини в галузі обробки даних. Саме сполучення цих факторів і стало передумовами комп'ютеризації науки. Це дозволяє при побудові математичних моделей використовувати більш складні математичні об'єкти і методи.

Раніше в задачах наближення функцій використовували переважно многочленні наближення; застосування ж потужніших засобів обчислення надало можливості застосовувати в таких задачах інші системи функцій, зокрема, поліноміальні і тригонометричні сплайни [1].

В задачах прикладної теорії наближень в ролі наближуваних функцій зручно використовувати узагальнені многочлени по деяким системам функцій, коефіцієнтами яких є самі значення наближуваної функції. Системи функцій, які дозволяють отримати таке подання, називають **фундаментальними**.

Важливість такого підходу пояснюється тим, що при застосуванні лінійних методів обробки наближуваних функцій обробці підлягають лише самі фундаментальні функції. Цей факт у більшості випадків дозволяє проводити необхідні обчислення по обробці експериментальних даних в два етапи. На першому етапі проводиться обчислення, пов'язані з обробкою фундаментальних функцій (ці обчислення можуть бути проведені попередньо), на другому ж етапі проводяться обчислення, що враховують значення наближуваних функцій.

Проведення двоетапної обробки має ряд переваг, серед яких відзначимо можливість обрахування експериментальних даних у масштабі реального часу, що часто є важливим в багатьох задачах обробки даних.

До систем фундаментальних функцій, найбільш відомих на теперішній час, належать системи фундаментальних інтерполяційних функцій Лагранжа, системи

повних, парних і непарних фундаментальних інтерполяційних тригонометричних многочленів. Ці системи функцій привертають увагу тим, що алгебраїчні і тригонометричні многочлени є лінійно щільними множинами у просторах відповідно неперервних і періодичних неперервних функцій. Проте існують і інші системи фундаментальних функцій, зокрема системи поліноміальних і тригонометричних фундаментальних сплайнів. [2].

Фундаментальні функції можуть застосовуватися в багатьох задачах науки і техніки, де для кількісного опису фізичних явищ використовують математичні моделі. Такі моделі часто являють собою системи звичайних диференціальних рівнянь, на які накладаються певні крайові та початкові умови. Саме в задачах побудови наближених розв'язків звичайних лінійних диференціальних рівнянь використовують фундаментальні функції.

2. Постановка задачі

Нехай маємо крайову задачу для звичайного лінійного диференціального рівняння

$$L_m u(x) = f(x); m = 1, 2, \dots \quad (1)$$

з крайовими умовами

$$\begin{aligned} u(0) &= u_0; \\ u(T) &= u_T. \end{aligned} \quad (2)$$

Розв'язок шукаємо у вигляді

$$u_N^*(x) = \sum_{n=1}^N \alpha_n \psi_n(x), \quad (3)$$

Існують різні способи визначення параметрів α_m , які входять до виразу (3). Ми застосовували метод колокацій.

Для цього підставляючи $u_N^*(x)$ в (2), отримуємо нев'язку

$$\varepsilon(x, \alpha_1, \dots, \alpha_N) = L_m u_N^*(x) - f(x). \quad (4)$$

Задамо на відрізку $[0, T]$ рівномірну сітку $\Delta_N = \{x_j\}_{j=1}^N$, $x_j = \frac{T}{N-1}(j-1)$, ($N = 2n+1$, $n = 1, 2, \dots$). Як відомо [3] метод колокацій полягає в тому, що невизначені параметри шукають з системи рівнянь

$$\varepsilon(x_j, \alpha_1, \dots, \alpha_N) = 0, \quad (j = 1, 2, \dots, N)$$

При застосуванні методу колокацій важливу роль відіграє вибір базисних функцій ψ_j ; $j = 1, 2, \dots, N$, що входять до (3). Ми розглянули випадок, коли в ролі базисних функцій виступають фундаментальні функції.

Як відомо [4] фундаментальними на сітці Δ_N називають функції, які задовольняють умовам

$$\psi_j(x_i) = \begin{cases} 1, & i = j; \\ 0, & i \neq j; \end{cases} \quad i, j = 1, 2, \dots, N.$$

Застосування фундаментальних функцій в задачах побудови наближених розв'язків диференціальних рівнянь має ряд переваг, головною з яких є те, що в ролі невизначених параметрів в (2) виступають значення наближеного шуканого розв'язку у вузлових точках x_j , ($j = 1, \dots, N$). Зрозуміло, що постановка задачі у термінах вузлових точок дозволяє асоціювати параметри з обмеженими частинами в загальному випадку просторових областей, що включають ці вузлові точки. Цей факт є дуже корисним, оскільки вивчення нев'язок такого рівняння дозволяє виявити ті підобласті, де збіжність розв'язків є повільною (або навпаки, швидкою) [5].

В ролі фундаментальних базисних функцій можна вибирати, наприклад, поліноміальні фундаментальні функції, тригонометричні фундаментальні функції, тригонометричні фундаментальні сплайни тощо [4]. Проте застосування кожного із перелічених класів функцій має свої особливості. Так в роботах [6-7] окремо розглядали випадки застосування тригонометричних фундаментальних многочленів та тригонометричних фундаментальних сплайнів. Розглянемо такі системи фундаментальних функцій більш детально та порівняємо відносні похибки наближених розв'язків, використовуючи окремо кожен із видів даних функцій.

3. Фундаментальні тригонометричні многочлени

В першому випадку шуканий розв'язок наближається тригонометричними многочленами. Ці функції мають вигляд

$$t_k(t) = \frac{1}{N} \left[1 + 2 \sum_{j=1}^n \cos j(t - t_k) \right]. \quad (5)$$

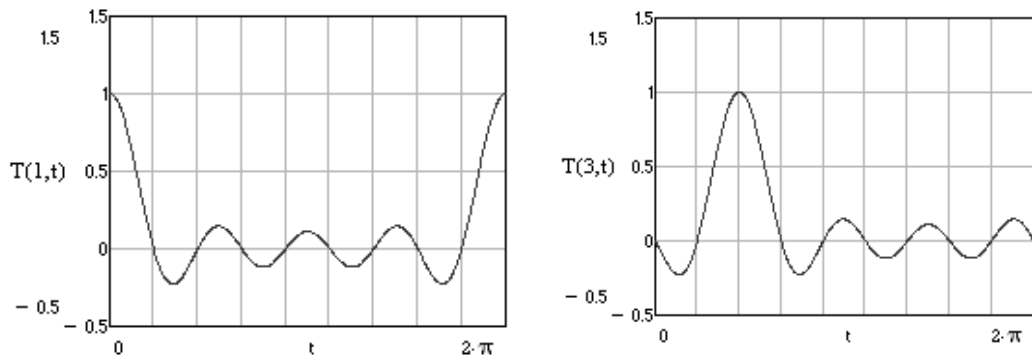


Рис.1 Фундаментальні на сітці Δ_N ($N=9$) тригонометричні многочлени $t_1(t)$ та $t_3(t)$.

Fig. 1. Fundamental trigonometric polynomials $t_1(t)$ and $t_3(t)$ on a grid Δ_N ($N=9$)

Система фундаментальних тригонометричних функцій, породжувана деякою сіткою Δ_N , є єдиною у тому розумінні, що існує лише єдина система тригонометричних многочленів порядку n , яка задовольняє на цій сітці

$$t_k(t_j) = \begin{cases} 1, & k = j; \\ 0, & k \neq j, \end{cases} \quad (k, j = 1, \dots, N). \quad (6)$$

Використовуючи систему фундаментальних тригонометричних многочленів $t_k(t)$, $k = 1, \dots, N$, наближений розв'язок будемо шукати у вигляді

$$T_n(t) = \sum_{k=1}^N f_k t_k(t). \quad (7)$$

де f_k , ($k = 1, 2, \dots, 2n+1$) – невизначені параметри, які, як ми вже казали, являють собою значення наближеного шуканого розв'язку у вузлових точках t_k , ($k = 1, \dots, 2n+1$).

Підставляючи вирази (5), (7) в рівняння (1) з урахуванням крайових умов (2) та виразу (6), отримуємо таку систему рівнянь

$$\begin{aligned} f_1 &= u_0; \\ \varepsilon(t_i) &= 0, \quad i = 2, 3, \dots, 2n; \\ f_{2n+1} &= u_T. \end{aligned} \quad (8)$$

і розв'язуючи її, отримуємо наближений розв'язок.

4. Фундаментальні тригонометричні сплайни

В другому випадку шуканий розв'язок наближається фундаментальними тригонометричними сплайнами.

Функції системи фундаментальних тригонометричних сплайнів будемо позначати $tS_k(r, t)$. На відміну від фундаментальних тригонометричних многочленів $t_k(t)$, залежать ще і від параметра $r, r=1, 2, \dots$; цей параметр визначає диференціальні властивості тригонометричних сплайнів. Так при будь якому значенні r $tS_k(r, t) \in C_{[0, 2\pi]}^{r-1}$.

В роботі [8] досліджувався вплив диференціальних властивостей фундаментальних тригонометричних інтерполяційних сплайнів на похибку інтерполяції як на кінцях так і середині відрізка інтерполяції.

Ці функції мають вигляд

$$tS_k(r, t) = \frac{1}{N} \left\{ 1 + 2 \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} \alpha_j^{-1}(r) [C_j(r, t) \cos jt_k + S_j(r, t) \sin jt_k] \right\},$$

$$\begin{aligned} \text{де } C_j(r, t) &= \frac{\cos jt}{j^{r+1}} + \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{\cos(mN+j)t}{(mN+j)^{r+1}} + \frac{\cos(mN-j)t}{(mN-j)^{r+1}} \right] \\ S_j(r, t) &= \frac{\sin jt}{j^{r+1}} + \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{\sin(mN+j)t}{(mN+j)^{r+1}} - \frac{\sin(mN-j)t}{(mN-j)^{r+1}} \right], \\ \alpha_j(r) &= \frac{1}{j^{r+1}} + \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{1}{(mN+j)^{r+1}} + \frac{1}{(mN-j)^{r+1}} \right], \\ j &= 1, 2, \dots, n, \quad k = 1, \dots, N, \quad r - \text{ступінь сплайна.} \end{aligned}$$

Подання деяких фундаментальних тригонометричних сплайнів при різних значеннях параметра r наводяться на Рис. 2.

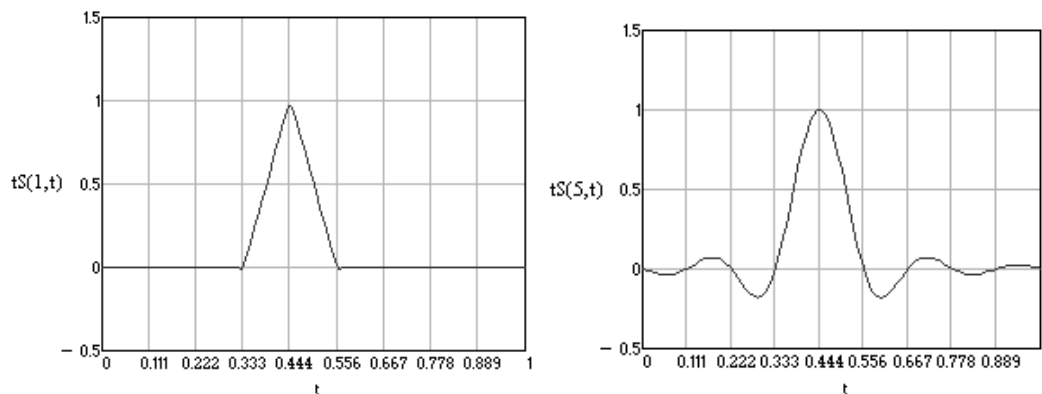


Рис.2 Фундаментальні тригонометричні сплайни при $r=1$ і $r=5$

Fig. 2. Fundamental trigonometric splines at $r=1$ and $r=5$

Легко бачити, що у тригонометричних фундаментальних сплайнів модулі максимумів спадають із віддаленням від вузла інтерполяції. Також для фундаментальних тригонометричних сплайнів при будь яких значеннях r виконується умова

$$\sum_{k=0}^N tS_k(r, t) = 1.$$

Певною вадю для фундаментальних тригонометричних сплайнів є їх періодичність. Проте, їх можна застосовувати і для подання неперіодичних функцій, застосовуючи при цьому спеціальні методи періодичного продовження [4].

Використовуючи систему фундаментальних тригонометричних сплайнів $tS_k(r, t)$, $r = 1, 2, \dots$, $k = 1, \dots, N$ наближений розв'язок будемо шукати у вигляді

$$S_n(t) = \sum_{k=1}^N f_k S_k(r, t) \quad (9)$$

де f_k , $(k = 1, 2, \dots, 2n+1)$ – невизначені параметри, які також являють собою значення наближеного шуканого розв'язку у вузлових точках t_k , $(k = 1, \dots, 2n+1)$.

Для ілюстрації вищенаведеного розглядалась крайова задача

$$\begin{aligned} y'' + \left(\frac{3}{4}\right)^2 y &= 0 \\ y(0) &= 0; y(2\pi - \alpha) = -1, \end{aligned} \quad (10)$$

де α , $0 < \alpha < 2\pi$, – параметр стискання.

Параметр стискання виникає внаслідок того, що тригонометричний многочлен $T_n(t)$ (як і тригонометричний сплайн $S_k(r, t)$) в силу періодичності приймає однакові значення у точках 0 і 2π ; отже, в загальному випадку не можна накладати крайові умови одночасно в цих точках.

Шукали наближений розв'язок задачі (10). При $n = 4$; відповідно

$$\alpha = \frac{2\pi}{9}; \quad t_i = \frac{2\pi}{9}(i-1), i = 1, \dots, 9.$$

Нескладно переконатися, що точним розв'язком цієї задачі буде

$$y(t) = \sin \frac{3}{4} t.$$

Складаючи системи рівнянь типу (7) і розв'язуючи її, отримаємо наближений розв'язок $T_4(t)$ ($S_4(t)$). Графіки точного і наближеного розв'язків, а також графік відносної похибки для двох випадків наводяться на рис. 3, 4.

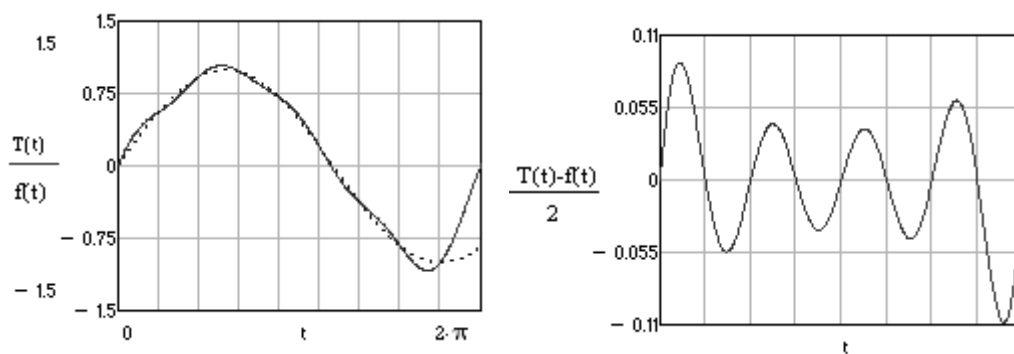


Рис. 3 Точний $f(t)$ і наближений $T_4(t)$ розв'язки та відносна похибка

наближеного розв'язку на $\left[0, \frac{8}{9} 2\pi\right]$

Fig. 3. Accurate $f(t)$ and approximate $T_4(t)$ solutions and relative error

of the approximate solution on $\left[0, \frac{8}{9} 2\pi\right]$

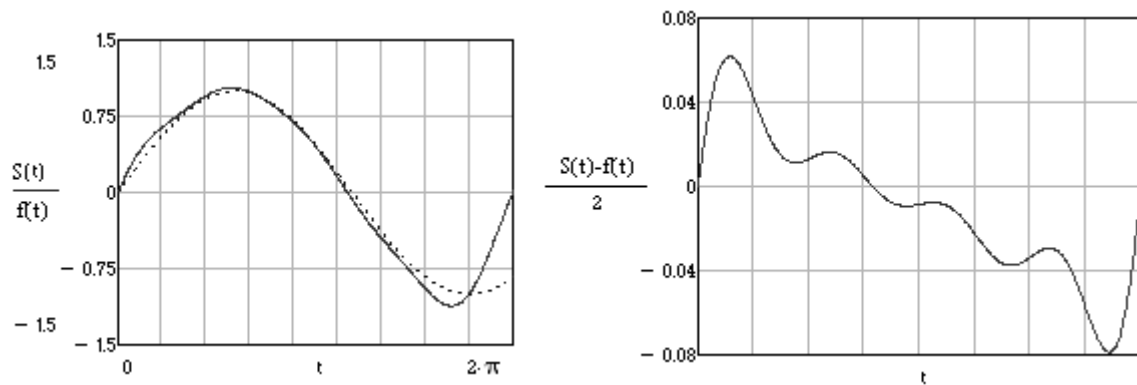


Рис. 4 Точний $f(t)$ і наближений $S_4(t)$ розв'язки та відносна похибка

наближеного розв'язку на $\left[0, \frac{8}{9}2\pi\right]$.

Fig. 4. Accurate $f(t)$ and approximate $S_4(t)$ solutions and relative error of the approximate solution on $\left[0, \frac{8}{9}2\pi\right]$

Як бачимо з графіків відносна похибка при застосуванні фундаментальних тригонометричних сплайнів зменшилась у 1.4 рази.

Це пояснюється тим, що сплайни мають ряд переваг у порівнянні з многочленами. Серед цих переваг потрібно відзначити швидку збіжність, використання многочленів невисоких степенів і простоту реалізації алгоритмів побудови сплайнів на ЕОМ. Ці та деякі інші властивості сплайнів призвели до того, що останні поступово витісняють многочлени в багатьох галузях теоретичних і прикладних досліджень [1].

5. Висновки

Розглянуто деякі системи фундаментальних функцій, які зручно застосовувати в задачах побудови наближених розв'язків диференціальних рівнянь. Подання тригонометричних многочленів у вигляді (5) має істотну перевагу перед іншими формами подання, яка полягає в тому, що немає потреби обчислювати коефіцієнти тригонометричного многочлена. В свою чергу в ролі невизначених параметрів в (7) виступають значення наближеного шуканого розв'язку у вузлових точках t_j , ($j=1, \dots, N$). Зрозуміло, що постановка задачі у термінах вузлових точок дозволяє асоціювати параметри з обмеженими частинами в загальному випадку просторових областей, що включають ці вузлові точки. Цей факт є дуже корисним, оскільки вивчення нев'язок такого рівняння дозволяє виявити ті підобласті, де збіжність розв'язків є повільною (або навпаки, швидкою) [1].

Фундаментальні тригонометричні сплайни мають ряд переваг у порівнянні з тригонометричними многочленами. До таких переваг слід віднести незмінність алгоритмів побудови тригонометричних сплайнів для різних значень параметра r та подання їх єдиним виразом (рівномірно збіжним тригонометричним рядом) на всьому інтервалі наближення. У склад фундаментальних тригонометричних сплайнів входить параметр r , який в свою чергу має великий вплив на похибку інтерполяції.

Список використаної літератури

1. Денисюк В.П. Сплайни та сигнали / В.П. Денисюк. – Київ, ЗАТ «ВІПОЛ», 2007. – 228с.

2. Денисюк В.П. Тригонометричні ряди та сплайни / В.П. Денисюк. – К.: НАУ, 2017. – 212с.
3. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация / О. Зенкевич, К. Морган. — М.: Мир, 1986. – 318с.
4. Денисюк В.П. Фундаментальні функції та тригонометричні сплайни: Монографія / В.П. Денисюк. — К.: ПАТ «Віпол», 2015. – 296с.
5. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина / К. Флетчер. — М.: Мир, 1988. — 352 с.
6. Денисюк В.П., Рибачук Л.В., Негоденко О.В. Побудова наближених розв'язків крайових задач для звичайних диференціальних рівнянь у вигляді тригонометричних многочленів / В.П.Денисюк, Л.В. Рибачук, О.В. Негоденко // Проблеми інформатизації та управління: Зб. наук. праць. – К: НАУ, 2014. – Випуск 1(45). – с. 37-42.
7. В.П. Денисюк, Негоденко О.В. Тригонометричні сплайни та їх застосування для розв'язання деяких задач небесної механіки / В.П.Денисюк, Л.В. Рибачук, О.В. Негоденко // Вісн. Астрон. школи. – К: НАУ, 2016. – Т.12, №1 – с. 62-66.
8. Денисюк В.П., Негоденко О.В. Вплив гладкості інтерполяційних тригонометричних сплайнів на похибку інтерполяції / В.П.Денисюк, О.В. Негоденко // Ukrainian Food Journal. 2013. Volume 2. Issue 4 <http://www.ufj.ho.ua/>

References

1. Denusiuk V. P. (2007). Splines and signals. Kyiv: VİPOL (in Ukr.)
2. Denusiuk V. P. (2017). Trigonometric series and splines. Kyiv: NAU (in Ukr.)
3. Zenkevych O. Morgan K. (1986). Finite elements and approximation. Moscow: Nauka (in Rus.)
4. Denusiuk V. P. (2015). Fundamental functions and trigonometric splines. Kyiv: VİPOL (in Ukr.)
5. Fletcher K. (1988). Numerical methods based on the Galerkin method. Moscow: Mur (in Rus.)
6. Denusiuk V.P., Rybachuk L. V., Nehodenko O. V. (2014). The construction of approximate solutions of boundary value problems for ordinary differential equations in the form of trigonometric polynomials. Problems of informatization and management, 1(45), 37-42.
7. Denusiuk V.P., Nehodenko O. V. (2016). Trigonometric splines and their applications for solving some problems of celestial mechanics. Visn.Astr.shkoly (Herald of the astronomical school), 12(1), 62-66.
8. Denusiuk, V.P. Nehodenko O.V., Influence of smoothness interpolation trigonometric splines on interpolation accuracy // Ukrainian Food Journal. 2013. Volume 2. Issue 4 <http://www.ufj.ho.ua/>

Summary. *Denusiuk V., Nehodenko O. Mathematical models on the basis of fundamental trigonometric splines.* The paper considers some systems of fundamental functions which are easy to be used in the problems for ordinary differential equations. The most well-known systems of fundamental functions include Lagrange system of fundamental functions and the complete systems even and odd fundamental trigonometric polynomials. However, there are some other systems of fundamental functions on analytical grid, including the systems of polynomial fundamental splines and complete trigonometric even and odd fundamental splines. Some of these systems are considered in this paper.

Keywords: funfamental functions, Lagrange functions, ordinary differential equations, simple polynomial splines, trigonometric splines, mathematical models.

УДК 510.22 + 51-71 + 517.982

Я.І. Грушка

КРИТЕРІЙ ОДНОСТАЙНОЇ ПОСТУПАЛЬНОСТІ СИСТЕМ ВІДЛІКУ В УНІВЕРСАЛЬНИХ КІНЕМАТИКАХ

Універсальні кінематики, як математичні об'єкти, є цікавими для астрофізики, оскільки існує припущення, що у великих масштабах Всесвіту закони фізики (зокрема, закони кінематики) можуть бути відмінними від тих, які діють в околі нашої сонячної системи. Дана робота присвячена дослідженню одностайно-поступального руху систем відліку в абстрактних універсальних кінематиках. У випадку одностайно-поступального руху можна дати чітке і однозначне означення переміщення, а отже і середньої та миттєвої швидкості системи відліку. Тому частинним випадком одностайно-поступального руху є рівномірний прямолінійний рух. Отже, дослідження одностайно-поступального руху систем відліку є технічно необхідним для виділення класів інерційно споріднених систем відліку (тобто тих, які знаходяться в стані рівномірного прямолінійного взаємного руху) в універсальних кінематиках. В даній роботі встановлюється необхідна і достатня умова на перетворення координат між системами відліку векторної універсальної кінематики, яка забезпечує одностайну поступальність однієї системи відліку відносно іншої.

Ключові слова: універсальні кінематики, системи відліку, одностайно-поступальний рух.

Вступ

Поняття інерційної системи відліку відіграє ключову роль в класичній механіці та спеціальній теорії відносності, оскільки в інерційних системах відліку основні, фундаментальні, закони фізики мають найпростіше формулювання. При цьому вважається, що інерційні системи відліку належать до одного класу еквівалентності. А саме, що довільні дві інерційні системи відліку рухаються прямолінійно зі сталою швидкістю одна відносно іншої.

В роботах [1–5] було побудовано новий клас абстрактних математичних об'єктів — універсальні кінематики, які призначені для математичного моделювання еволюції фізичних систем в рамках різних законів кінематики. Також в цих роботах показано, що теорія універсальних кінематик може бути застосована для математично строгого обґрунтування кінематики спеціальної теорії відносності та її тахіонних розширень. Дослідження універсальних кінематик може виявитись цікавим для астрофізики, оскільки існує припущення, що у великих масштабах Всесвіту закони фізики (зокрема, закони кінематики) можуть бути відмінними від тих, які діють в околі нашої сонячної системи (тобто відмінними від тих, які базуються на перетвореннях координат Лоренца-Пуанкаре або Галілея для інерційних систем відліку). В універсальних кінематиках можуть існувати системи відліку з перетвореннями координат довільного вигляду між довільними просторами геометричних змінних [2]¹. Саме тому, у зв'язку із сказаним в першому абзаці, природним чином постає задача дослідити рівномірний прямолінійний рух систем відліку на рівні абстрактних універсальних кінематик.

¹ Слід зазначити, що у випадку, коли простір геометричних змінних є тривимірним проблема дослідження довільних просторово-часових перетворень координат для систем відліку розглядалась у роботах [6–12]. Спроби побудови кінематики, що базується на перетвореннях координат для інерційних систем відліку відмінних від Лоренца-Пуанкаре або Галілея можна знайти, наприклад, в роботах [13–21].

Але, оскільки рівномірний прямолінійний рух систем відліку є рухом зі сталою швидкістю, то спершу доцільно дослідити на абстрактному рівні більш загальний випадок, коли системи відліку рухаються таким чином, що можна однозначно ввести поняття переміщення, а отже середньої або миттєвої швидкості руху однієї системи відліку відносно іншої. Саме такий вид руху систем відліку в роботі [22] названо *однотайно-поступальним*, де було дано математично строге означення *однотайно-поступальних* (однотайних) систем відліку в універсальних кінематиках.

В даній роботі продовжуються дослідження, розпочаті в [22]. Зокрема, буде встановлена необхідна і достатня умова на перетворення координат між системами відліку векторної універсальної кінематики, яка забезпечує однотайну поступальність однієї системи відліку відносно іншої.

1 Векторні універсальні кінематики та їх властивості

В даній роботі ми будемо використовувати математичний апарат, систему понять і позначень теорії універсальних кінематик, розвинутої в роботах [1–5]. Теорія універсальних кінематик в свою чергу базується на теоріях мінливих та кінематичних мінливих множин, розвинених в [1, 23–29]. Для зручності читачів результати всіх зазначених робіт зібрані і викладені з єдиної точки зору в препринті [5]. Для подальшого розуміння змісту цієї статті необхідно володіти основними положеннями теорій мінливих і кінематичних мінливих множин та універсальних кінематик. Саме тому читачам, котрі не знайомі з цими теоріями, радимо звернутися до препринта [5] або відповідних журнальних статей, результати яких зібрані в [5].

Означення 1. (а) *Кінематична множина $\mathfrak{C}$ називається векторною, якщо:*

$$\forall I \in \mathcal{Lk}(\mathfrak{C}) \quad \mathbb{Ls}(I) \neq \emptyset,$$

де $\mathbb{Ls}(I) = \mathbb{Ls}(I; \mathfrak{C})$ — *лінійна структура системи відліку I в кінематичній множині $\mathfrak{C}$ (див [1, стор. 65], [5, стор. 89]).*

(б) *Універсальна кінематика $\mathcal{F} = (\mathfrak{C}, \mathcal{Q})$ називається векторною, якщо $\mathfrak{C}$ є векторною кінематичною множиною.*

Використовуючи систему позначень, прийняту в [2–5], отримуємо наступний наслідок означення 1.

Наслідок 1. *Універсальна кінематика $\mathcal{F}$ є векторною тоді і тільки тоді, коли:*

$$\forall I \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F}) \quad \mathbb{Ls}(I) \neq \emptyset.$$

Наслідок 1 можна розглядати як альтернативний варіант означення векторної універсальної кінематики.

Нехай, $\mathfrak{C}$ — довільна векторна кінематична множина або універсальна кінематика. Тоді, згідно з означенням 1 та наслідком 1, для довільної системи відліку $I \in \mathcal{Lk}(\mathfrak{C})$ виконується співвідношення $\mathbb{Ls}(I; \mathfrak{C}) \neq \emptyset$. Звідси, враховуючи систему позначень, прийняту в [2–5], впливає, що:

$$\forall I \in \mathcal{Lk}(\mathfrak{C}) \quad \mathfrak{Ps}(I; \mathfrak{C}) \neq \emptyset,$$

причому, для будь-якої системи відліку $I \in \mathcal{Lk}(\mathfrak{C})$ і для довільних елементів $a_1, \dots, a_n \in \mathbf{Zk}(I, \mathfrak{C})$, $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathfrak{Ps}(I; \mathfrak{C})$ визначений елемент:

$$(\lambda_1 a_1 + \dots + \lambda_n a_n)_{I, \mathfrak{C}} \quad (n \in \mathbb{N}).$$

Керуючись скороченими варіантами позначень, введеними в [2–5], надалі у випадку, коли наперед відомо, про яку кінематичну множину або універсальну кінематику $\mathfrak{C}$ йде мова, замість позначень $\mathbb{L}s(I; \mathfrak{C})$, $\mathfrak{Ps}(I; \mathfrak{C})$, $\mathbf{Zk}(I, \mathfrak{C})$, $(\lambda_1 a_1 + \dots + \lambda_n a_n)_{I, \mathfrak{C}}$ будемо використовувати позначення $\mathbb{L}s(I)$, $\mathfrak{Ps}(I)$, $\mathbf{Zk}(I)$, $(\lambda_1 a_1 + \dots + \lambda_n a_n)_I$ відповідно. Крім того, коли зі змісту тексту можна визначити, про яку систему відліку $I \in \mathcal{Lk}(\mathfrak{C})$ йде мова, замість позначення $(\lambda_1 a_1 + \dots + \lambda_n a_n)_I$ будемо використовувати позначення $\lambda_1 a_1 + \dots + \lambda_n a_n$.

2 Перетворення координат в універсальних кінематиках та оператори перетворення координат

Означення 2. Нехай, Ω_1, Ω_2 — координатні простори², а $T_1 = (T_1, \leq_1)$ і $T_2 = (T_2, \leq_2)$ ($T_1, T_2 \neq \emptyset$) — довільні лінійно упорядковані множини. Довільну бієкцію $\mathcal{U}$ між $T_1 \times \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ і $T_2 \times \mathbf{Zk}(\Omega_2)$ ($\mathcal{U} : T_1 \times \mathbf{Zk}(\Omega_1) \mapsto T_2 \times \mathbf{Zk}(\Omega_2)$) будемо називати оператором перетворення координат з (T_1, Ω_1) в (T_2, Ω_2) . Множину всіх операторів перетворення координат з (T_1, Ω_1) в (T_2, Ω_2) будемо позначати через:

$$\mathbf{Pk}(T_1, \Omega_1; T_2, \Omega_2).$$

Твердження 1 (див. [22]). Нехай, $\mathcal{F}$ — універсальна кінематика і $I, m \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ — довільні системи відліку $\mathcal{F}$. Тоді:

$$[m \leftarrow I, \mathcal{F}] \in \mathbf{Pk}(Tm(I), BG(I); Tm(m), BG(m)).$$

Зауваження 1. Позначення “ $[m \leftarrow I, \mathcal{F}]$ ” означає універсальне перетворення координат з системи відліку I в систему відліку m в кінематиці $\mathcal{F}$ (див. [2–5]).

Отже, довільне перетворення координат між системами відліку в довільній універсальній кінематиці є оператором перетворення координат. Навпаки, виявляється, що для довільного оператора перетворення координат $\mathcal{U}$ існує така універсальна кінематика $\mathcal{F}$ що оператор $\mathcal{U}$ є універсальним перетворенням координат між деякими системами відліку $I, m \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$.

Твердження 2 (див. [22]). Для довільного оператора перетворення координат $\mathcal{U} \in \mathbf{Pk}(T_1, \Omega_1; T_2, \Omega_2)$ існують універсальна кінематика $\mathcal{F}$ і системи відліку $I, m \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ такі, що:

$$\begin{aligned} Tm(I) &= T_1; & BG(I, \mathcal{F}) &= \Omega_1; \\ Tm(m) &= T_2; & BG(m, \mathcal{F}) &= \Omega_2; \\ [m \leftarrow I] &= \mathcal{U}. \end{aligned}$$

При цьому якщо Ω_1 і Ω_2 є векторними координатними просторами (тобто $\mathbb{L}s(\Omega_1) \neq \emptyset$, $\mathbb{L}s(\Omega_2) \neq \emptyset$), то універсальна кінематика $\mathcal{F}$ також є векторною.

3 Траєкторії для систем відліку в універсальних кінематиках

Означення 3. Нехай, $\mathcal{F}$ — довільна універсальна кінематика і $I, m \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ — довільні системи відліку $\mathcal{F}$. Траєкторією точки $x \in \mathbf{Zk}(m)$ (при русі системи відліку m відносно системи відліку I) в кінематиці $\mathcal{F}$ будемо називати множину:

$$\text{trj}_{[I \leftarrow m, \mathcal{F}]}(x) = \{[I \leftarrow m](t, x) \mid t \in Tm(m)\} \subseteq \mathbb{Mk}(I)$$

² Означення координатного простору можна знайти в [1, означення 3], [5, Definition 2.14.2].

Зауваження 2 (про фізичний зміст траєкторії $\text{trj}_{[l \leftarrow m, \mathcal{F}]}(x)$). Можна уявляти, що довільна універсальна кінематика $\mathcal{F}$ є певним абстрактним “світом”, котрий не обов’язково збігається з “нашим”. Якщо в точці з координатою x у системі відліку m “світу” $\mathcal{F}$ знаходиться нерухома відносно m матеріальна точка, то $\text{trj}_{[l \leftarrow m, \mathcal{F}]}(x)$ буде відображати траєкторію руху цієї матеріальної точки відносно системи відліку l .

Зауваження 3. У випадку, коли наперед відомо, про яку універсальну кінематику $\mathcal{F}$ йде мова, замість позначення $\text{trj}_{[l \leftarrow m, \mathcal{F}]}(x)$ будемо використовувати скорочене позначення:

$$\text{trj}_{[l \leftarrow m]}(x).$$

В наступних твердженнях (3 та 4) описано деякі властивості траєкторій, введених вище. У цих твердженнях $\mathcal{F}$ є довільною універсальною кінематикою і $l, m \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ — довільні системи відліку $\mathcal{F}$.

Твердження 3 (див. [22]). Для довільних $x, y \in \mathbf{Zk}(m)$ з умов $x \neq y$ випливає співвідношення:

$$\text{trj}_{[l \leftarrow m]}(x) \cap \text{trj}_{[l \leftarrow m]}(y) = \emptyset.$$

Твердження 4 (див. [22]). Для довільного елемента $w \in \mathbf{Mk}(l)$ існує, причому єдиний елемент $x \in \mathbf{Zk}(m)$ такий, що:

$$w \in \text{trj}_{[l \leftarrow m]}(x).$$

4 Одностайно-поступальні системи відліку в універсальних кінематиках

В цьому розділі буде сформульоване математично строге означення одностайно поступальних систем відліку в універсальних кінематиках. Спершу будуть наведені деякі технічні означення та технічні твердження, необхідні для того, щоб це зробити.

Нехай T, X — довільні множини. Для довільної упорядкованої пари $\omega = (t, x) \in T \times X$ будемо використовувати такі позначення:

$$\text{bs}(\omega) := x, \quad \text{tm}(\omega) := t.$$

(де символ $\times$ означає декартовий добуток множин).

Означення 4 (див. [22]). Нехай, $\mathcal{F}$ — довільна векторна універсальна кінематика і $l \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ довільна система відліку $\mathcal{F}$.

1. **Паралельним зсувом** множини $A \subseteq \mathbf{Mk}(l)$ на вектор $x \in \mathbf{Zk}(l)$ (в системі відліку $l \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$) будемо називати множину:

$$A^{(+x; l)} := \{(\text{tm}(w), x + \text{bs}(w)) \mid w \in A\}.$$

У випадках, коли не виникає непорозуміннь, замість позначення $A^{(+x; l)}$ будемо використовувати позначення:

$$A^{(+x)}.$$

2. Будемо говорити, що множина $A \subseteq \mathbf{Mk}(l)$ **паралельна** множині $B \subseteq \mathbf{Mk}(l)$ **відносно** системи відліку l (позначення: $A \parallel_l^{\mathcal{F}} B$), якщо існує елемент $x \in \mathbf{Zk}(l)$ такий, що $B = A^{(+x)}$, тобто такий, що:

$$B = \{(\text{tm}(w), x + \text{bs}(w)) \mid w \in A\}.$$

У випадку, коли відомо, про яку універсальну кінематику $\mathcal{F}$ йде мова, замість позначення $A \parallel_{\mathcal{F}} B$ будемо використовувати позначення:

$$A \parallel_{\mathcal{I}} B$$

Твердження 5 (див. [22]). Нехай, $\mathcal{F}$ — довільна векторна універсальна кінематика і $\mathcal{I} \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ довільна система відліку $\mathcal{F}$. Тоді:

1. $A^{(+0)} = A$ (для довільної множини $A \subseteq \mathbb{Mk}(\mathcal{I})$), де $0 = 0_{\mathcal{I}} = 0_{\mathcal{I}, \mathcal{F}}$ — нульовий вектор лінійного простору (над полем дійсних або комплексних чисел), порожденного лінійною структурою $\mathbb{Ls}(\mathcal{I})$;
2. $(A^{(+x)})^{(+y)} = A^{(+x+y)}$ (для довільних $A \subseteq \mathbb{Mk}(\mathcal{I})$ та $x, y \in \mathbf{Zk}(\mathcal{I})$), зокрема $(A^{(+x)})^{+(-x)} = A^{(+0)} = A$;
3. Бінарне відношення $\parallel_{\mathcal{I}}$ є відношенням еквівалентності (тобто рефлексивним, симетричним і транзитивним відношенням) на множині $2^{\mathbb{Mk}(\mathcal{I})} = \{A \mid A \subseteq \mathbb{Mk}(\mathcal{I})\}$.

Означення 5 (див. [22]). Нехай, $\mathcal{F}$ — довільна універсальна кінематика.

1. Будемо говорити, що система відліку $\mathbf{m} \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ є **траекторно-регулярною** відносно системи відліку $\mathcal{I} \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ (у кінематиці $\mathcal{F}$), якщо виконується наступна умова:
 - (а) для довільного $x \in \mathbf{Zk}(\mathbf{m})$ траекторія $\mathbf{trj}_{[\mathcal{I} \leftarrow \mathbf{m}]}(x)$ є абстрактною траекторією з $\mathbf{Tm}(\mathcal{I})$ в $\mathbf{Zk}(\mathcal{I})$ (тобто $\forall w_1, w_2 \in \mathbf{trj}_{[\mathcal{I} \leftarrow \mathbf{m}]}(x)$ з умови $\mathbf{tm}(w_1) = \mathbf{tm}(w_2)$ випливає рівність $\mathbf{bs}(w_1) = \mathbf{bs}(w_2)$, а отже і рівність $w_1 = w_2$).

У наступних двох пунктах, $\mathcal{F}$ — довільна векторна універсальна кінематика.

2. Будемо говорити, що система відліку $\mathbf{m} \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ є **одностайно-квазіпоступальною** (скорочено — **квазіодностайною**) відносно системи відліку $\mathcal{I} \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ (у кінематиці $\mathcal{F}$), якщо:
 - (б) для довільних $x, y \in \mathbf{Zk}(\mathbf{m})$ виконується співвідношення $\mathbf{trj}_{[\mathcal{I} \leftarrow \mathbf{m}]}(x) \parallel_{\mathcal{I}} \mathbf{trj}_{[\mathcal{I} \leftarrow \mathbf{m}]}(y)$.
3. Будемо говорити, що система відліку $\mathbf{m} \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ є **одностайно-поступальною** (скорочено — **одностайною**) відносно системи відліку $\mathcal{I} \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ (у кінематиці $\mathcal{F}$), якщо $\mathbf{m}$ є квазіодностайною і траекторно регулярною відносно $\mathcal{I}$ у кінематиці $\mathcal{F}$, тобто, якщо виконуються умови (а) і (б) даного означення.

Підкреслимо, що надалі всюди в цій статті замість термінів “одностайно-квазіпоступальна” та “одностайно-поступальна” (система відліку) ми будемо користуватись їхніми скороченими варіантами “**квазіодностайна**” та “**одностайна**” відповідно.

Зауваження 4. В роботі [22] показано, що на фізичному рівні з допомогою означення 5 можна описати системи відліку, пов'язані з твердими тілами, що знаходяться в стані поступального руху в рамках законів класичної механіки. Також в роботі [22] показано, що в рамках теорії відносності виділений курсивом висновок вже не є справедливим. Цей ефект обумовлений тим фактом, що лоренцове скорочення довжини не може бути рівномірним у прискорених системах відліку, а тому, жорсткі не інерційні системи відліку в “нерухомій” інерційній системі відліку не виглядають жорсткими [30, 31].

5 Одностайна поступальність і оператори перетворення координат

Означення 6. Нехай, $\mathcal{U} \in \text{Pk}(\mathbb{T}_1, \Omega_1; \mathbb{T}_2, \Omega_2)$, де Ω_1, Ω_2 — довільні координатні простори, а $\mathbb{T}_1 = (\mathbf{T}_1, \leq_1)$, $\mathbb{T}_2 = (\mathbf{T}_2, \leq_2)$ — довільні лінійно упорядковані множини. **Траєкторією** точки $x \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ відносно оператора перетворення координат $\mathcal{U}$ будемо називати множину:

$$\text{trj}_{\mathcal{U}}(x) := \{\mathcal{U}(t, x) \mid t \in \mathbf{T}_1\} \subseteq \mathbf{T}_2 \times \mathbf{Zk}(\Omega_2).$$

Означення 7. 1) Координатний простір Ω будемо називати **векторним**, якщо $\mathbb{L}_s(\Omega) \neq \emptyset$.

2) Нехай, Ω — векторний координатний простір і $\mathbb{T} = (\mathbf{T}, \leq)$ — лінійно упорядкована множина.

(2.1) Для довільної множини $A \subseteq \mathbf{T} \times \mathbf{Zk}(\Omega)$ покладемо, $A^{(+x; \Omega)} := \{(\text{tm}(w), x + \text{bs}(w)) \mid w \in A\}$.

(2.2) Будемо говорити, що множина $A \subseteq \mathbf{T} \times \mathbf{Zk}(\Omega)$ є $(\mathbb{T}, \Omega)$ -**паралельною** множині $B \subseteq \mathbf{T} \times \mathbf{Zk}(\Omega)$ (позначення $A \parallel_{(\mathbb{T}; \Omega)} B$), якщо існує елемент $x \in \mathbf{Zk}(\Omega)$ такий, що:

$$B = A^{(+x; \Omega)} = \{(\text{tm}(w), x + \text{bs}(w)) \mid w \in A\}.$$

Аналогічно до твердження 5 доводиться наступне твердження.

Твердження 6. Бінарне відношення $\parallel_{(\mathbb{T}; \Omega)}$ є відношенням еквівалентності на множині $2^{\mathbf{T} \times \mathbf{Zk}(\Omega)} = \{A \mid A \subseteq \mathbf{T} \times \mathbf{Zk}(\Omega)\}$.

Означення 8. Нехай, Ω_1, Ω_2 — векторні координатні простори і $\mathbb{T}_1 = (\mathbf{T}_1, \leq_1)$, $\mathbb{T}_2 = (\mathbf{T}_2, \leq_2)$ — лінійно упорядковані множини. Оператор перетворення координат $\mathcal{U} \in \text{Pk}(\mathbb{T}_1, \Omega_1; \mathbb{T}_2, \Omega_2)$ будемо називати **одностайно-поступальним** (скорочено — **одностайним**), якщо:

1. для довільного $x \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ траєкторія $\text{trj}_{\mathcal{U}}(x)$ є абстрактною траєкторією з $\mathbb{T}_2$ в $\mathbf{Zk}(\Omega_2)$ (тобто $\forall w_1, w_2 \in \text{trj}_{\mathcal{U}}(x)$ з умови $\text{tm}(w_1) = \text{tm}(w_2)$ випливає рівність $\text{bs}(w_1) = \text{bs}(w_2)$, а отже і рівність $w_1 = w_2$).
2. для довільних $x, \tilde{x} \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ виконується співвідношення $\text{trj}_{\mathcal{U}}(x) \parallel_{(\mathbb{T}_2; \Omega_2)} \text{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x})$.

Нехай, $\mathcal{F}$ — довільна векторна універсальна кінематика. Тоді, згідно із системою позначень для універсальних кінематик (див. [2, підрозділ 5.2], [5, підрозділ 22.2]), для довільної системи відліку $l \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ маємо рівності:

$$\begin{aligned} \mathbf{Zk}(l) &= \mathbf{Zk}(\text{BG}(l)); \\ \mathbf{Mk}(l) &= \mathbf{Tm}(l) \times \mathbf{Zk}(l) = \mathbf{Tm}(l) \times \mathbf{Zk}(\text{BG}(l)), \end{aligned}$$

де $\text{BG}(l)$ — координатний простір. Враховуючи вищесказане, а також означення 4 (пункт 2), означення 5 (пункт 3), означення 7 (пункт (2.2)), та означення 8, отримуємо таке твердження:

Твердження 7. Нехай, $\mathcal{F}$ — довільна векторна універсальна кінематика і $l, m \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ — довільні системи відліку $\mathcal{F}$. Тоді:

1. Для довільних множин $A, B \subseteq \text{Mk}(I)$ співвідношення $A \parallel_I B$ рівносильне співвідношенню:

$$A \parallel_{(\text{Tm}(I); \text{BG}(I))} B.$$

2. Система відліку m є одностайною відносно системи відліку I тоді і тільки тоді, коли оператор перетворення координат:

$$[I \leftarrow m, \mathcal{F}] \in \text{Pk}(\text{Tm}(m), \text{BG}(m); \text{Tm}(I), \text{BG}(I))$$

є одностайним.

6 Критерії одностайної поступальності для операторів перетворень координат та систем відліку

Теорема 1. Нехай, Ω_1, Ω_2 — довільні векторні координатні простори, а $T_1 = (T_1, \leq_1)$, $T_2 = (T_2, \leq_2)$ — довільні лінійно упорядковані множини. Відображення $\mathcal{U} : T_1 \times \text{Zk}(\Omega_1) \mapsto T_2 \times \text{Zk}(\Omega_2)$ є одностайним оператором перетворення координат тоді і тільки тоді, коли існують функції:

$$\begin{aligned} \Phi : T_1 \times \text{Zk}(\Omega_1) &\mapsto T_2, \\ F : T_2 &\mapsto \text{Zk}(\Omega_2) \quad i \\ g : \text{Zk}(\Omega_1) &\mapsto \text{Zk}(\Omega_2), \end{aligned}$$

що задовольняють такі умови:

1. Для довільного $x \in \text{Zk}(\Omega_1)$ функція $\Phi_{(x)}(t) := \Phi(t, x)$, $t \in T_1$ є бієкцією між T_1 і T_2 .
2. Функція g є бієкцією між $\text{Zk}(\Omega_1)$ і $\text{Zk}(\Omega_2)$.
3. Для довільної пари $(t, x) \in T_1 \times \text{Zk}(\Omega_1)$ виконується рівність:

$$\mathcal{U}(t, x) = (\Phi(t, x), F(\Phi(t, x)) + g(x)). \quad (1)$$

Доведення. I) Необхідність. Нехай, оператор перетворення координат $\mathcal{U} \in \text{Pk}(T_1, \Omega_1; T_2, \Omega_2)$ є одностайним. Покладемо:

$$\Phi(t, x) := \text{tm}(\mathcal{U}(t, x)), \quad (t, x) \in T_1 \times \text{Zk}(\Omega_1). \quad (2)$$

Зафіксуємо довільний елемент $x_0 \in \text{Zk}(\Omega_1)$. Покладемо:

$$F := \text{trj}_{\mathcal{U}}(x_0). \quad (3)$$

За означенням 8, F є абстрактною траєкторією з T_2 в $\text{Zk}(\Omega_2)$, тобто функцією з $\mathfrak{D}(F) \subseteq T_2$ в $\text{Zk}(\Omega_2)$. Доведемо, що $\mathfrak{D}(F) = T_2$. Нехай, $\tau \in T_2$. Виберемо довільний елемент $y \in \text{Zk}(\Omega_2)$. Оскільки, за означенням 2, $\mathcal{U}$ є бієкцією між $T_1 \times \text{Zk}(\Omega_1)$ і $T_2 \times \text{Zk}(\Omega_2)$, то існують елементи $\tilde{t} \in T_1$ і $\tilde{x} \in \text{Zk}(\Omega_1)$ такі, що $\mathcal{U}(\tilde{t}, \tilde{x}) = (\tau, y)$. Тоді $(\tau, y) \in \text{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x})$. За означенням 8, $\text{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x})$ є абстрактною траєкторією з T_2 в $\text{Zk}(\Omega_2)$. Отже, із співвідношення $(\tau, y) \in \text{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x})$ випливає, що $\tau \in \mathfrak{D}(\text{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x}))$. Згідно з умовою 2 означення 8, маємо:

$$\text{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x}) \parallel_{(T_2; \Omega_2)} \text{trj}_{\mathcal{U}}(x_0). \quad (4)$$

Тобто, враховуючи (3), маємо:

$$\mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x}) \parallel_{(\mathbf{T}_2; \mathbf{\Omega}_2)} \mathbf{F}.$$

З останнього співвідношення, за означенням 7 (пункт (2.2)), випливає, що $\mathfrak{D}(\mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x})) = \mathfrak{D}(\mathbf{F})$. Отже, оскільки $\tau \in \mathfrak{D}(\mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x}))$, то $\tau \in \mathfrak{D}(\mathbf{F})$. Таким чином, довільний елемент $\tau \in \mathbf{T}_2$ належить до $\mathfrak{D}(\mathbf{F}) \subseteq \mathbf{T}_2$. Тому, $\mathfrak{D}(\mathbf{F}) = \mathbf{T}_2$. Тобто $\mathbf{F}$ є відображенням виду:

$$\mathbf{F} : \mathbf{T}_2 \longmapsto \mathbf{Zk}(\mathbf{\Omega}_2).$$

Тому, траєкторію $\mathbf{F} := \mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(x_0)$ можна подати у вигляді:

$$\mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(x_0) = \{(\tau, \mathbf{F}(\tau)) \mid \tau \in \mathbf{T}_2\}. \quad (5)$$

Покладемо:

$$\mathbf{G}(t, x) := \mathbf{bs}(\mathcal{U}(t, x)) - \mathbf{F}(\Phi(t, x)), \quad (t, x) \in \mathbf{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\mathbf{\Omega}_1).$$

Тоді, використовуючи (2), для довільних $(t, x) \in \mathbf{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\mathbf{\Omega}_1)$ отримуємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t, x) &= (\mathbf{tm}(\mathcal{U}(t, x)), \mathbf{bs}(\mathcal{U}(t, x))) = \\ &= (\Phi(t, x), \mathbf{F}(\Phi(t, x)) + \mathbf{G}(t, x)). \end{aligned} \quad (6)$$

Отже, згідно означення 6, для довільного фіксованого елемента $x \in \mathbf{Zk}(\mathbf{\Omega}_1)$ траєкторію $\mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(x)$ можна подати у вигляді:

$$\begin{aligned} \mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(x) &= \{\mathcal{U}(t, x) \mid t \in \mathbf{T}_1\} = \\ &= \{(\Phi(t, x), \mathbf{F}(\Phi(t, x)) + \mathbf{G}(t, x)) \mid t \in \mathbf{T}_1\}. \end{aligned} \quad (7)$$

За означенням 8 маємо $\mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(x_0) \parallel_{(\mathbf{T}_2; \mathbf{\Omega}_2)} \mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(x)$. Тому, враховуючи співвідношення (5) і означенням 7 (пункт (2.2)), отримуємо:

$$\begin{aligned} \mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(x) &= \{(\mathbf{tm}(w), y + \mathbf{bs}(w)) \mid w \in \mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(x_0)\} = \\ &= \{(\tau, y + \mathbf{F}(\tau)) \mid \tau \in \mathbf{T}_2\}, \end{aligned} \quad (8)$$

де $y \in \mathbf{Zk}(\mathbf{\Omega}_2)$. Із співвідношень (7) і (8) випливає, що:

$$\{(\Phi(t, x), \mathbf{F}(\Phi(t, x)) + \mathbf{G}(t, x)) \mid t \in \mathbf{T}_1\} = \{(\tau, y + \mathbf{F}(\tau)) \mid \tau \in \mathbf{T}_2\}.$$

Звідси випливає, що для довільних $t_1, t_2 \in \mathbf{T}_1$ існують елементи $\tau_1, \tau_2 \in \mathbf{T}_2$ такі, що:

$$(\Phi(t_i, x), \mathbf{F}(\Phi(t_i, x)) + \mathbf{G}(t_i, x)) = (\tau_i, y + \mathbf{F}(\tau_i)) \quad (i \in \overline{1, 2}).$$

З останньої рівності отримуємо:

$$\begin{aligned} \Phi(t_i, x) &= \tau_i; \\ \mathbf{F}(\tau_i) + \mathbf{G}(t_i, x) &= y + \mathbf{F}(\tau_i) \quad (i \in \overline{1, 2}). \end{aligned}$$

Тобто, $\mathbf{G}(t_i, x) = y$ ($i \in \overline{1, 2}$). Отже, $\mathbf{G}(t_1, x) = \mathbf{G}(t_2, x)$ ($\forall t_1, t_2 \in \mathbf{T}_1$). Звідси, враховуючи довільність вибору вектора $x \in \mathbf{Zk}(\mathbf{\Omega}_1)$, випливає, що існує функція $\mathbf{g} : \mathbf{Zk}(\mathbf{\Omega}_1) \longmapsto \mathbf{Zk}(\mathbf{\Omega}_2)$ така, що:

$$\mathbf{G}(t, x) = \mathbf{g}(x) \quad (\forall (t, x) \in \mathbf{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\mathbf{\Omega}_1)).$$

Враховуючи останню рівність, співвідношення (6) переписується у вигляді:

$$\mathcal{U}(t, x) = (\Phi(t, x), \mathbf{F}(\Phi(t, x)) + \mathbf{g}(x)) \quad ((t, x) \in \mathbf{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\mathbf{\Omega}_1)). \quad (9)$$

Отже, залишилось довести, що функції Φ і $\mathbf{g}$ задовольняють умови 1 і 2 даної теореми.

I.1) Нехай, $x \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)$. Зафіксуємо довільний елемент $\tau \in \mathbf{T}_2$. Розглянемо довільний $y \in \mathbf{Zk}(\Omega_2)$. Оскільки (за означенням 8), $\mathcal{U} \in \mathbf{Pk}(\mathbf{T}_1, \Omega_1; \mathbf{T}_2, \Omega_2)$, то, за означенням 2, існує пара $(\tilde{t}, \tilde{x}) \in \mathbf{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ така, що $\mathcal{U}(\tilde{t}, \tilde{x}) = (\tau, y)$. Тоді, за означенням 6,

$$(\tau, y) \in \mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x}). \quad (10)$$

Оскільки $\mathcal{U}$ — одностайне перетворення координат, то, за означенням 8, $\mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(x) \parallel_{(\mathbf{T}_2; \Omega_2)} \mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x})$. Тому, за означенням 7, $\mathfrak{D}(\mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(x)) = \mathfrak{D}(\mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x}))$. Отже, оскільки, згідно (10), $\tau \in \mathfrak{D}(\mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(\tilde{x}))$, то $\tau \in \mathfrak{D}(\mathbf{trj}_{\mathcal{U}}(x))$. Тому, за означенням 6, існує момент часу $t \in \mathbf{T}_1$ такий, що $\mathbf{tm}(\mathcal{U}(t, x)) = \tau$. Тобто, згідно (2), $\Phi(t, x) = \tau$. Отже, при довільному фіксованому $x \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ маємо:

$$\forall \tau \in \mathbf{T}_2 \exists t \in \mathbf{T}_1 (\Phi(t, x) = \tau). \quad (11)$$

Нехай, знову, x — фіксований елемент з $\mathbf{Zk}(\Omega_1)$, і для деяких $t_1, t_2 \in \mathbf{T}_1$ має місце рівність $\Phi(t_1, x) = \Phi(t_2, x)$. Тоді, згідно з (9), отримуємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t_1, x) &= (\Phi(t_1, x), \mathbf{F}(\Phi(t_1, x)) + \mathbf{g}(x)) = \\ &= (\Phi(t_2, x), \mathbf{F}(\Phi(t_2, x)) + \mathbf{g}(x)) = \mathcal{U}(t_2, x). \end{aligned}$$

Отже, оскільки $\mathcal{U} \in \mathbf{Pk}(\mathbf{T}_1, \Omega_1; \mathbf{T}_2, \Omega_2)$, то, за означенням 2, з останньої рівності випливає рівність, $t_1 = t_2$. Таким чином, при довільному фіксованому $x \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ маємо:

$$\forall t_1, t_2 \in \mathbf{T}_1 ((\Phi(t_1, x) = \Phi(t_2, x)) \Rightarrow (t_1 = t_2)). \quad (12)$$

З (11) і (12) випливає, що функція Φ задовольняє першу умову даної теореми.

I.2) Нехай, $y \in \mathbf{Zk}(\Omega_2)$. Виберемо довільний елемент $\tau \in \mathbf{T}_2$. Оскільки оскільки $\mathcal{U} \in \mathbf{Pk}(\mathbf{T}_1, \Omega_1; \mathbf{T}_2, \Omega_2)$, то, за означенням 2, існує пара $(t, x) \in \mathbf{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ така, що:

$$\mathcal{U}(t, x) = (\tau, \mathbf{F}(\tau) + y).$$

Тоді, згідно з (9), отримуємо:

$$(\Phi(t, x), \mathbf{F}(\Phi(t, x)) + \mathbf{g}(x)) = (\tau, \mathbf{F}(\tau) + y).$$

Звідси випливає, що $\Phi(t, x) = \tau$ і $\mathbf{F}(\tau) + \mathbf{g}(x) = \mathbf{F}(\tau) + y$. З останньої рівності отримуємо, $\mathbf{g}(x) = y$. Таким чином:

$$\forall y \in \mathbf{Zk}(\Omega_2) \exists x \in \mathbf{Zk}(\Omega_1) (\mathbf{g}(x) = y). \quad (13)$$

Нехай, $x_1, x_2 \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ і $\mathbf{g}(x_1) = \mathbf{g}(x_2)$. Виберемо довільний елемент $\tau_0 \in \mathbf{T}_2$. Згідно з (11), існують елементи $t_1, t_2 \in \mathbf{T}_1$ такі, що:

$$\Phi(t_1, x_1) = \Phi(t_2, x_2) = \tau_0.$$

Звідси, використовуючи (9), отримуємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t_1, x_1) &= (\Phi(t_1, x_1), \mathbf{F}(\Phi(t_1, x_1)) + \mathbf{g}(x_1)) = \\ &= (\tau_0, \mathbf{F}(\tau_0) + \mathbf{g}(x_1)) = (\tau_0, \mathbf{F}(\tau_0) + \mathbf{g}(x_2)) = \\ &= (\Phi(t_2, x_2), \mathbf{F}(\Phi(t_2, x_2)) + \mathbf{g}(x_2)) = \mathcal{U}(t_2, x_2). \end{aligned}$$

Оскільки $\mathcal{U} \in \mathbf{Pk}(\mathbb{T}_1, \mathfrak{Q}_1; \mathbb{T}_2, \mathfrak{Q}_2)$, то, за означенням 2, з останньої рівності отримуємо, $(t_1, x_1) = (t_2, x_2)$, тобто $x_1 = x_2$. Таким чином, тільки-що було доведено, що:

$$\forall x_1, x_2 \in \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_1) ((g(x_1) = g(x_2)) \Rightarrow (x_1 = x_2)). \quad (14)$$

Із співвідношень (13) і (14) випливає, що функція g задовольняє другу умову теореми.

Таким чином, якщо оператор $\mathcal{U} \in \mathbf{Pk}(\mathbb{T}_1, \mathfrak{Q}_1; \mathbb{T}_2, \mathfrak{Q}_2)$ є одностайним, то існують функції $\Phi : \mathbb{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_1) \mapsto \mathbb{T}_2$, $F : \mathbb{T}_2 \mapsto \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_2)$ і $g : \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_1) \mapsto \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_2)$, що задовольняють умови 1, 2 і 3 даної теореми.

II) Достатність. Навпаки, нехай існують функції $\Phi : \mathbb{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_1) \mapsto \mathbb{T}_2$, $F : \mathbb{T}_2 \mapsto \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_2)$ і $g : \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_1) \mapsto \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_2)$, що задовольняють умови 1, 2 і 3 даної теореми. Доведемо, що тоді відображення $\mathcal{U}$, що задається формулою (1) є одностайним оператором перетворення координат.

II.1) Доведемо, що $\mathcal{U} \in \mathbf{Pk}(\mathbb{T}_1, \mathfrak{Q}_1; \mathbb{T}_2, \mathfrak{Q}_2)$. Нехай, $(t_1, x_1), (t_2, x_2) \in \mathbb{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_1)$ і

$$\mathcal{U}(t_1, x_1) = \mathcal{U}(t_2, x_2).$$

Тоді, згідно (1), отримуємо:

$$\begin{aligned} \Phi(t_1, x_1) &= \Phi(t_2, x_2); \\ F(\Phi(t_1, x_1)) + g(x_1) &= F(\Phi(t_2, x_2)) + g(x_2). \end{aligned} \quad (15)$$

З останніх двох рівностей випливає, що $g(x_1) = g(x_2)$. Отже, згідно із другою умовою теореми, $x_1 = x_2$. З останньої рівності і рівності (15) випливає рівність $\Phi(t_1, x_1) = \Phi(t_2, x_1)$. Отже, згідно з першою умовою теореми, $t_1 = t_2$. Таким чином, $x_1 = x_2$ і $t_1 = t_2$, тобто $(t_1, x_1) = (t_2, x_2)$. Отже, для довільних $(t_1, x_1), (t_2, x_2) \in \mathbb{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_1)$ маємо:

$$(\mathcal{U}(t_1, x_1) = \mathcal{U}(t_2, x_2)) \Rightarrow ((t_1, x_1) = (t_2, x_2)) \quad (16)$$

Розглянемо довільну упорядковану пару $(\tau, y) \in \mathbb{T}_2 \times \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_2)$. З умов 1 і 2 даної теореми випливає існування таких $x \in \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_1)$ і $t \in \mathbb{T}_1$, що:

$$g(x) = y - F(\tau) \quad \text{і} \quad \Phi(t, x) = \tau.$$

Звідси, використовуючи (1), отримуємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t, x) &= (\Phi(t, x), F(\Phi(t, x)) + g(x)) = \\ &= (\tau, F(\tau) + (y - F(\tau))) = (\tau, y). \end{aligned}$$

Таким чином:

$$\forall (\tau, y) \in \mathbb{T}_2 \times \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_2) \exists (t, x) \in \mathbb{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_1) (\mathcal{U}(t, x) = (\tau, y)) \quad (17)$$

З (16) і (17) випливає, що відображення $\mathcal{U}$ є бієкцією між $\mathbb{T}_1 \times \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_1)$ і $\mathbb{T}_2 \times \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_2)$, тобто, за означенням 2:

$$\mathcal{U} \in \mathbf{Pk}(\mathbb{T}_1, \mathfrak{Q}_1; \mathbb{T}_2, \mathfrak{Q}_2).$$

II.2) Доведемо, що оператор перетворення координат $\mathcal{U} \in \mathbf{Pk}(\mathbb{T}_1, \mathfrak{Q}_1; \mathbb{T}_2, \mathfrak{Q}_2)$ є одностайним.

II.2.a) Для довільного $x \in \mathbf{Zk}(\mathfrak{Q}_1)$, використовуючи (1) та умову 1 даної теореми, маємо:

$$\text{trj}_{\mathcal{U}}(x) = \{\mathcal{U}(t, x) \mid t \in \mathbb{T}_1\} =$$

$$\begin{aligned}
&= \{(\Phi(t, x), F(\Phi(t, x)) + g(x)) \mid t \in T_1\} = \\
&= \{(\tau, F(\tau) + g(x)) \mid \tau \in T_2\}.
\end{aligned} \tag{18}$$

Оскільки F є відображенням з T_2 в $Zk(\Omega_2)$ і, згідно з умовою 2 теореми, $g(x) \in Zk(\Omega_2)$, то $\text{trj}_{\mathcal{U}}(x)$ є абстрактною траєкторією з T_2 в $Zk(\Omega_2)$. Отже, умова 1 означення 8 для відображення $\mathcal{U}$ виконується.

II.2.6) Перевіримо виконання умови 2 означення 8 для відображення $\mathcal{U}$. Для довільних $x_1, x_2 \in Zk(\Omega_1)$, використовуючи (18), отримуємо:

$$\begin{aligned}
\text{trj}_{\mathcal{U}}(x_2) &= \{(\tau, F(\tau) + g(x_2)) \mid \tau \in T_2\} = \\
&= \{(\tau, F(\tau) + g(x_1) + (g(x_2) - g(x_1))) \mid \tau \in T_2\} = \\
&= \{(\tau, y + (g(x_2) - g(x_1))) \mid (\tau, y) \in \text{trj}_{\mathcal{U}}(x_1)\} = (\text{trj}_{\mathcal{U}}(x_1))^{+(g(x_2) - g(x_1)); \Omega_2}.
\end{aligned}$$

Отже, згідно з означенням 7, враховуючи довільність вибору векторів $x_1, x_2 \in Zk(\Omega_1)$ отримуємо:

$$\forall x_1, x_2 \in Zk(\Omega_1) \quad (\text{trj}_{\mathcal{U}}(x_1) \parallel_{(T_2; \Omega_2)} \text{trj}_{\mathcal{U}}(x_2)).$$

Тому, умова 2 означення 8 для відображення $\mathcal{U}$ також виконується. Таким чином, обидві умови означення 8 для відображення $\mathcal{U} \in \mathbf{Pk}(T_1, \Omega_1; T_2, \Omega_2)$ виконуються. Тому, за означенням 8, $\mathcal{U}$ є одностайним оператором перетворення координат. $\square$

З теореми 1 випливає такий наслідок:

Наслідок 2. Нехай, $\mathcal{F}$ — векторна універсальна кінематика. Система відліку $\mathbf{m} \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ є одностайною відносно системи відліку $\mathbf{l} \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ тоді і тільки тоді, коли існують функції:

$$\begin{aligned}
\Phi &: \mathbb{Mk}(\mathbf{m}) \longrightarrow T\mathbf{m}(\mathbf{l}), \\
F &: T\mathbf{m}(\mathbf{l}) \longrightarrow Zk(\mathbf{l}), \\
g &: Zk(\mathbf{m}) \longrightarrow Zk(\mathbf{l}),
\end{aligned}$$

що задовольняють такі умови:

1. Для довільного $x \in Zk(\mathbf{m})$ функція $\Phi_{(x)}(t) := \Phi(t, x)$, $t \in T\mathbf{m}(\mathbf{m})$ є бієкцією між $T\mathbf{m}(\mathbf{m})$ і $T\mathbf{m}(\mathbf{l})$.
2. Функція g є бієкцією між $Zk(\mathbf{m})$ і $Zk(\mathbf{l})$.
3. Для довільного $w \in \mathbb{Mk}(\mathbf{m})$ виконується рівність:

$$[l \leftarrow \mathbf{m}] w = (\Phi(t_w, x_w), F(\Phi(t_w, x_w)) + g(x_w)),$$

$$\partial e t_w = t\mathbf{m}(w), x_w = b\mathbf{s}(w).$$

Функція Φ в умові теореми 1 визначається однозначно для довільного фіксованого одностайного оператора перетворення координат. Справді, з формули (1) випливає, що:

$$\Phi(t, x) := t\mathbf{m}(\mathcal{U}(t, x)), \quad (t, x) \in T_1 \times Zk(\Omega_1).$$

Що торкається функцій F і g , то вони визначаються неоднозначно. Справді нехай, трійка функцій Φ , F і g задовольняє умови теореми 1. Тоді, якщо взяти довільний вектор $y \in Zk(\Omega_2)$, і покласти:

$$F_1(\tau) := F(\tau) + y \quad (\tau \in T_2);$$

$$g_1(x) := g(x) - y \quad (x \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)),$$

то, як легко перевірити, трійка функцій Φ , F_1 і g_1 також задовольнятиме умови теореми 1.

Твердження 8. Нехай, Ω_1, Ω_2 — векторні координатні простори; $T_1 = (T_1, \leq_1)$, $T_2 = (T_2, \leq_2)$ — лінійно упорядковані множини і відображення $\mathcal{U} : T_1 \times \mathbf{Zk}(\Omega_1) \mapsto T_2 \times \mathbf{Zk}(\Omega_2)$ є одностайним оператором перетворення координат. Якщо функції $\Phi : T_1 \times \mathbf{Zk}(\Omega_1) \mapsto T_2$, $F, F_1 : T_2 \mapsto \mathbf{Zk}(\Omega_2)$ і $g, g_1 : \mathbf{Zk}(\Omega_1) \mapsto \mathbf{Zk}(\Omega_2)$ є такими, що:

1. функція Φ задовольняє умову 1 теореми 1;
2. функції g і g_1 задовольняють умову 2 теореми 1;
3. для довільних $(t, x) \in T_1 \times \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ виконується рівність:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t, x) &= (\Phi(t, x), F(\Phi(t, x)) + g(x)) = \\ &= (\Phi(t, x), F_1(\Phi(t, x)) + g_1(x)), \end{aligned} \quad (19)$$

то існує вектор $y_0 \in \mathbf{Zk}(\Omega_2)$ такий, що для довільних $\tau \in T_2$ і $x \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ мають місце рівності:

$$F_1(\tau) = F(\tau) + y_0; \quad (20)$$

$$g_1(x) = g(x) - y_0. \quad (21)$$

Доведення. З рівності (19) для довільних $(t, x) \in T_1 \times \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ отримуємо рівність:

$$F(\Phi(t, x)) + g(x) = F_1(\Phi(t, x)) + g_1(x).$$

Враховуючи, що функція Φ задовольняє умову 1 теореми 1, останню рівність можна переписати у вигляді:

$$F(\tau) + g(x) = F_1(\tau) + g_1(x) \quad (\forall \tau \in T_2 \forall x \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)).$$

Звідси:

$$F_1(\tau) - F(\tau) = g(x) - g_1(x) \quad (\forall \tau \in T_2 \forall x \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)).$$

Тому, вирази в правій і лівій частині останньої рівності не залежать ні від змінної τ ні від змінної x . Тобто, існує елемент $y_0 \in \mathbf{Zk}(\Omega_2)$ такий, що для довільних $\tau \in T_2$ і $x \in \mathbf{Zk}(\Omega_1)$ мають місце рівності:

$$F_1(\tau) - F(\tau) = y_0; \quad g(x) - g_1(x) = y_0.$$

З останніх рівностей випливають рівності (20) і (21). □

Список використаної літератури

1. Грушка Я.І. Критерій існування універсального перетворення координат у кінематичних мінливих множинах // Буковинський математичний журнал. — 2014. — Т. 2, № 2-3. — С. 59–71.
2. Грушка Я.І. Кінематичні мінливі множини із заданим універсальним перетворенням координат // Збірник праць Інституту математики НАН України. — 2015. — Т. 12, № 1. — С. 74–118.

3. Грушка Я.І. Еволюційні розширення кінематичних множин та універсальних кінематик // Збірник праць Інституту математики НАН України. — 2015. — Т. 12, № 2. — С. 139–204.
4. Грушка Я.І. Теорема про еволюційне розширення для універсальних кінематик // Буковинський математичний журнал. — 2015. — Т. 3, № 3-4. — С. 67–77.
5. Grushka Ya.I. Draft introduction to abstract kinematics. (Version 2.0). — Preprint: ResearchGate, 2017. — P. 1–208. — URL: <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.28964.27521>.
6. Baccetti Valentina, Tate Kyle, Visser Matt. Inertial frames without the relativity principle // J. High Energ. Phys. — 2012. — Vol. 2012, no. 5. — P. 43. — URL: [http://dx.doi.org/10.1007/JHEP05\(2012\)119](http://dx.doi.org/10.1007/JHEP05(2012)119).
7. Baccetti Valentina, Tate Kyle, Visser Matt. Lorentz violating kinematics: Threshold theorems // J. High Energ. Phys. — 2012. — Vol. 2012, no. 3. — P. 28. — URL: [http://dx.doi.org/10.1007/JHEP03\(2012\)087](http://dx.doi.org/10.1007/JHEP03(2012)087).
8. Baccetti Valentina, Tate Kyle, Visser Matt. Inertial frames without the relativity principle: breaking Lorentz symmetry // Proceedings of the Thirteenth Marcel Grossmann Meeting on General Relativity. — World Scientific, 2013. — P. 1189–1191. — URL: <https://arxiv.org/abs/1302.5989>.
9. Mamone-Capria Marco. On the Fundamental Theorem of the Theory of Relativity // Foundations of Physics. — 2016. — Dec. — Vol. 46, no. 12. — P. 1680–1712. — URL: <https://doi.org/10.1007/s10701-016-0038-3>.
10. Berzi Vittorio, Gorini Vittorio. On space-time, reference frames and the structure of relativity groups // Ann. Inst. H. Poincaré Sect. A (N.S.). — 1972. — Vol. 16. — P. 1–22.
11. Gorini Vittorio. Linear kinematical groups // Communications in Mathematical Physics. — 1971. — Jun. — Vol. 21, no. 2. — P. 150–163. — URL: <https://doi.org/10.1007/BF01646749>.
12. Lugiato Luigi A., Gorini Vittorio. On the Structure of Relativity Groups // Journal of Mathematical Physics. — 1972. — Vol. 13, no. 5. — P. 665–671. — <https://doi.org/10.1063/1.1666034>.
13. Recami E., Olkhovsky V.S. About Lorentz transformations and tachyons // Lettere al Nuovo Cimento. — 1971. — Vol. 1, no. 4. — P. 165–168. — URL: <http://dx.doi.org/10.1007/BF02799345>.
14. Recami E., Mignani R. More about Lorentz transformations and tachyons // Lettere al Nuovo Cimento. — 1972. — Vol. 4, no. 4. — P. 144–152.
15. Recami E. Classical Tachyons and Possible Applications // Riv. Nuovo Cim. — 1986. — Vol. 9, no. 6. — P. 1–178. — URL: <http://dx.doi.org/10.1007/BF02724327>.
16. Goldoni R. Faster-than-light inertial frames, interacting tachyons and tadpoles // Lettere al Nuovo Cimento. — 1972. — Vol. 5, no. 6. — P. 495–502. — URL: <http://dx.doi.org/10.1007/BF02785903>.
17. Vieira Ricardo S. An Introduction to the Theory of Tachyons // Revista Brasileira de Ensino de Física. — 2012. — Vol. 34, no. 3. — P. 1–15. — URL: <http://dx.doi.org/10.1590/S1806-11172012000300006>.
18. Tangherlini Frank Robert. The Velocity of Light in Uniformly Moving Frames // Abraham Zelmanov Journal. — 2009. — Vol. 2. — P. 44–110.

19. Медведєв С.Ю., Галамба І.Ф. Про деякі наслідки з перетворень Тангерліні // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. — 2012. — № 31. — С. 174–184.
20. Medvedev Sergey Yu. Superluminal Velocities in the Synchronized Space-Time // Progress in Physics. — 2014. — Vol. 10, no. 3. — P. 151–156.
21. Hassani Mohamed. Foundations of Superluminal Relativistic Mechanics // Communications in Physics. — 2015. — Vol. 24, no. 4. — P. 313–332.
22. Грушка Я.І. Одностаїно-поступальний рух систем відліку в універсальних кінематиках // Буковинський математичний журнал. — 2017. — Т. 5, № 3-4.
23. Грушка Я.І. Мінливі множини та їх властивості // Доповіді Національної академії наук України. — 2012. — № 5. — С. 12–18.
24. Грушка Я.І. Примітивні мінливі множини та їх властивості // Математичний вісник НТШ. — 2012. — Т. 9. — С. 52–80.
25. Грушка Я.І. Видимість у мінливих множинах // Збірник праць Інституту математики НАН України. — 2012. — Т. 9, № 2. — С. 122–145.
26. Грушка Я.І. Базові мінливі множини та математичне моделювання еволюції систем // Укр. мат. журн. — 2013. — Т. 65, № 9. — С. 1198–1218.
27. Грушка Я.І. Мінливі множини та їх застосування для побудови кінематики тахіонів // Збірник праць Інституту математики НАН України. — 2014. — Т. 11, № 1. — С. 192–227.
28. Грушка Я.І. Перетворення координат у кінематичних мінливих множинах // Доповіді Національної академії наук України. — 2015. — № 3. — С. 24–31. — URL: <http://dx.doi.org/10.15407/dopovidi2015.03.024>.
29. Grushka Ya.I. On Universal Coordinate Transform in Kinematic Changeable Sets // Methods Funct. Anal. Topology. — 2017. — Vol. 23, no. 2. — P. 133–154.
30. Møller C. The theory of relativity. International series of monographs on physics. — Clarendon Press, Oxford, 1957. — P. 1–398.
31. Misner C.W., Thorne K.S., Wheeler J.A. Gravitation. Part 1. — W. H. Freeman, 1973. — ISBN: 9780716703341.

References

1. Grushka Ya.I. (2014). Criterion of existence of universal coordinate transform in kinematic changeable sets. *Bukovinian Mathematical Journal*, 2(2-3), 59–71.
2. Grushka Ya.I. (2015). Kinematic changeable sets with given universal coordinate transforms. *Proceedings of Institute of Mathematics NAS of Ukraine*, 12(1), 74–118.
3. Grushka Ya.I. (2015). Evolutionary Extensions of Kinematic Sets and Universal Kinematics. *Proceedings of Institute of Mathematics NAS of Ukraine*, 12(2), 139–204.
4. Grushka Ya.I. (2015). Theorem on Evolutional Extension for Universal Kinematics. *Bukovinian Mathematical Journal*, 3(3-4), 67–77.
5. Grushka Ya.I. (2017). Draft introduction to abstract kinematics. (Version 2.0). Preprint: ResearchGate, 208 pages.
6. Baccetti Valentina, Tate Kyle, Visser Matt. (2012). Inertial frames without the relativity principle. *J. High Energ. Phys.*, 2012(5), 43.

7. Baccetti Valentina, Tate Kyle, Visser Matt. (2012). Lorentz violating kinematics: Threshold theorems. *J. High Energ. Phys.*, 2012(3), 28.
8. Baccetti Valentina, Tate Kyle, Visser Matt. (2013). Inertial frames without the relativity principle: breaking Lorentz symmetry. In *Proceedings of the Thirteenth Marcel Grossmann Meeting on General Relativity*, pages 1189–1191. World Scientific.
9. Mamone-Capria Marco. (2016). On the Fundamental Theorem of the Theory of Relativity. *Foundations of Physics*, 46(12), 1680–1712.
10. Berzi Vittorio, Gorini Vittorio. (1972). On space-time, reference frames and the structure of relativity groups. *Ann. Inst. H. Poincaré Sect. A (N.S.)*, 16, 1–22.
11. Gorini Vittorio. (1971). Linear kinematical groups. *Communications in Mathematical Physics*, 21(2), 150–163.
12. Lugiato Luigi A., Gorini Vittorio. (1972). On the Structure of Relativity Groups. *Journal of Mathematical Physics*, 13(5), 665–671.
13. Recami E., Olkhovsky V.S. (1971). About Lorentz transformations and tachyons. *Lettere al Nuovo Cimento*, 1(4), 165–168.
14. Recami E., Mignani. R. (1972). More about Lorentz transformations and tachyons. *Lettere al Nuovo Cimento*, 4(4), 144–152.
15. Recami E. (1986). Classical Tachyons and Possible Applications. *Riv. Nuovo Cim.*, 9(6), 1–178.
16. Goldoni R. (1972). Faster-than-light inertial frames, interacting tachyons and tadpoles. *Lettere al Nuovo Cimento*, 5(6), 495–502.
17. Vieira Ricardo S. (2012). An Introduction to the Theory of Tachyons. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 34(3), 1–15.
18. Tangherlini Frank Robert. (2009). The Velocity of Light in Uniformly Moving Frames. *Abraham Zelmanov Journal*, 2, 44–110.
19. Medvedev S.Yu., Galamba I.F. (2012). About some consequences from the Tangherlini transformations. *Uzhhorod University Scientific Herald. Series Physics*, (31), 174–184.
20. Medvedev Sergey Yu. (2014). Superluminal Velocities in the Synchronized Space-Time. *Progress in Physics*, 10(3), 151–156.
21. Hassani Mohamed. (2015). Foundations of Superluminal Relativistic Mechanics. *Communications in Physics*, 24(4), 313–332.
22. Grushka Ya.I. (2017). Unanimously-translational motion of reference frames in universal kinematics. *Bukovinian Mathematical Journal*, 5(3-4).
23. Grushka Ya.I. (2012). Changeable sets and their properties. *Reports of the National Academy of Sciences of Ukraine*, (5), 12–18.
24. Grushka Ya.I. (2012). Primitive changeable sets and their properties. *Mathematical Bulletin of Taras Shevchenko Scientific Society*, 9, 52–80.
25. Grushka Ya.I. (2012). Visibility in changeable sets. *Proceedings of Institute of Mathematics NAS of Ukraine*, 9(2), 122–145.
26. Grushka Ya.I. (2013). Base changeable sets and mathematical simulation of the evolution of systems. *Ukrainian Math. J.*, 65(9), 1198–1218.

27. Grushka Ya.I. (2014). Changeable sets and their application for the construction of tachyon kinematics. *Proceedings of Institute of Mathematics NAS of Ukraine*, 11(1), 192–227.
28. Grushka Ya.I. (2015). Coordinate transforms in kinematic changeable sets. *Reports of the National Academy of Sciences of Ukraine*, (3), 24–31.
29. Grushka Ya.I. (2017). On Universal Coordinate Transform in Kinematic Changeable Sets. *Methods Funct. Anal. Topology*, 23(2), 133–154.
30. Møller C. (1957). *The theory of relativity*. International series of monographs on physics. Clarendon Press, Oxford.
31. Misner C.W., Thorne K.S., Wheeler J.A. (1973). *Gravitation. Part 1*. W. H. Freeman.

Summary. *Ya.I. Grushka. The criterion for self-consistently translational motion of reference frames in universal kinematics.* Universal kinematics as mathematical objects may be interesting for astrophysics, because there exists the hypothesis, that in the large scale of the Universe, physical laws (in particular, the laws of kinematics) may be different from the laws, acting in the neighborhood of our Solar System. The present paper is devoted to investigation of self-consistently translational motion of reference frames in abstract universal kinematics. In the case of self-consistently translational motion we can give the clear and unambiguous definition of displacement as well average and instantaneous speed of the reference frame. Hence the uniform rectilinear motion is the particular case of self-consistently translational motion. So, the investigation of self-consistently translational motion is technically necessary for definition of classes of inertially-related reference frames (being in the state of uniform rectilinear mutual motion) in universal kinematics. In the paper we establish the necessary and sufficient condition on coordinate transformation between reference frames of universal kinematics assuring self-consistently translational motion of one reference frame relatively to another:

Theorem. *Let $\mathcal{F}$ be vector universal kinematics. The reference frame $\mathbf{m} \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ is self-consistently translational relatively the reference frame $\mathbf{l} \in \mathcal{Lk}(\mathcal{F})$ if and only if, there exist the functions: $\Phi : \mathbb{Mk}(\mathbf{m}) \mapsto \mathbf{Tm}(\mathbf{l})$, $\mathbf{F} : \mathbf{Tm}(\mathbf{l}) \mapsto \mathbf{Zk}(\mathbf{l})$, $\mathbf{g} : \mathbf{Zk}(\mathbf{m}) \mapsto \mathbf{Zk}(\mathbf{l})$, satisfying the following conditions:*

1. *For each $\mathbf{x} \in \mathbf{Zk}(\mathbf{m})$ the function $\Phi_{(\mathbf{x})}(t) := \Phi(t, \mathbf{x})$, $t \in \mathbf{Tm}(\mathbf{m})$ is a bijection between $\mathbf{Tm}(\mathbf{m})$ and $\mathbf{Tm}(\mathbf{l})$.*

2. *The function $\mathbf{g}$ is a bijection between $\mathbf{Zk}(\mathbf{m})$ and $\mathbf{Zk}(\mathbf{l})$.*

3. *For every $\mathbf{w} \in \mathbb{Mk}(\mathbf{m})$ the following equality is performed:*

$$[\mathbf{l} \leftarrow \mathbf{m}] \mathbf{w} = (\Phi(t_{\mathbf{w}}, \mathbf{x}_{\mathbf{w}}), \mathbf{F}(\Phi(t_{\mathbf{w}}, \mathbf{x}_{\mathbf{w}})) + \mathbf{g}(\mathbf{x}_{\mathbf{w}})),$$

where $t_{\mathbf{w}} = \mathbf{tm}(\mathbf{w})$, $\mathbf{x}_{\mathbf{w}} = \mathbf{bs}(\mathbf{w})$.

Keywords: *universal kinematics, reference frames, self-consistently translational motion.*

Одержано редакцією 01.12.2017

Прийнято до друку 29.12.2017

О.А. Гулівець, С.Ю. Олійник, Г.А. Маркевич

**ВЕКТОРНІ ФУНКЦІЇ СКАЛЯРНОГО АРГУМЕНТУ ПРИ ДОСЛІДЖЕННЯХ
КІНЕМАТИКИ ТОЧКИ ТА ТВЕРДОГО ТІЛА**

В роботі застосовується безкоординатний (векторний) спосіб проведення математичних операцій над векторними величинами на прикладі доведення теорем кінематики точки та твердого тіла. Такий спосіб в навчальному процесі дозволяє скоротити час на доведення деяких теорем з курсу «Теоретичної механіки». Так, при дослідженнях кінематики точки та твердих тіл використовуються векторні функції скалярного аргументу (часу): радіус-вектор, швидкість, прискорення, над якими є необхідність проводити ряд математичних операцій: знаходження їх суми, векторного та скалярного їх добутку, добутку векторних функцій на скалярну, диференціювання та інтегрування, тощо. Як відомо, існують два методи проведення математичних операцій над векторними величинами: безкоординатний (або векторний), який оперує безпосередньо з векторами та координатний – операції проводяться над скалярними величинами, які аналітично визначають в деякій системі координат. Безкоординатний метод є більш компактним і доцільним для використання при проведенні теоретичних досліджень. Використавши деякі властивості векторних функцій: можливість зображати векторну функцію скалярного аргументу у вигляді добутку одиначної векторної функції (орта функції) на скалярну функцію (модуль векторної функції) і правила диференціювання векторних функцій, за допомогою безкоординатного метода проведено доведення декількох теорем по визначенню кінематичних параметрів точок вільного твердого тіла та окремої точки при складному її русі. Застосування таких методів доведення теорем при вивченні дисципліни «Теоретична механіка» дозволяє децю скоротити час на доведення цих теорем, що є важливим фактором в сучасних умовах.

Ключові слова: безкоординатний метод, кінематика твердого тіла, векторна функція, скаляр, похідна, радіус-вектор, швидкість, прискорення.

1. Вступ

Проблема та її зв'язок з науковими та практичними завданнями. Теоретична механіка є науковою основою сучасної техніки і фундаментальною дисципліною в справі підготовки інженерних кадрів. В сучасних умовах роботи вищої школи, коли різко (в 2 рази і більше) скорочено кількість годин на вивчення цієї дисципліни, необхідно зменшувати кількість часу на доведення ряду теорем з цієї дисципліни без зменшення обсягу знань у студентів внаслідок її вивчення. Отже, необхідно розробити такі методи доведення ряду теорем кінематики точки та твердого тіла, які не зменшуючи точності і якості доведення цих теорем дозволяли б скорочувати час на їх доведення.

Аналіз досліджень і публікацій. Питання кінематики точки та твердого тіла в вітчизняній літературі відображені досить повно і на високому рівні. Доведення теорем кінематики точки та твердого тіла виконані в основному з застосуванням аналітичного координатного методу математичних операцій над векторними величинами [3], аналітичного координатного в поєднанні з безкоординатним [5...10] та геометричного методу складання векторних величин [4, 11].

Як показала практика застосування існуючих методів доведення теорем кінематики точки та твердого тіла, ці методи не дозволяють скоротити час на доведення цих теорем.

Постановка задачі. На основі аналізу властивостей векторних функцій скалярного аргументу і аналізу фізичної суті кінематики точки та твердого тіла розробити доведення теорем кінематики точки та твердого тіла, які б дозволяли скоротити час на доведення цих теорем.

2. Викладення матеріалу та результати

При вивченні руху матеріальних об'єктів в просторі з плином часу використовуються певні системи відліку. Кожна система відліку є сукупністю тіла відліку та зв'язаних з ним системи координат і системи відліку часу, по відношенню до яких розглядається рух будь-яких інших тіл.

Сучасна механіка ґрунтується на ряді закономірностей, що установлені в формі, яка є незалежною від вибору системи координат, які застосовуються при одержуванні та дослідженні цих закономірностей. Така форма закономірностей називається інваріантною.

Як відомо з курсу математики [1, 2]:

1) фізичні величини, значення яких можуть бути виражені додатними або від'ємними числами («скалярами») і які не залежать від системи відліку називаються скалярними величинами (маса, температура, енергія);

2) величини, значення яких визначаються як розмірами так і напрямом в просторі, називаються векторами і можуть зображуватись відрізками, які мають певну величину та напрям;

3) векторною функцією (вектор-функцією) скалярної змінної t називається змінний вектор $\vec{a}$, якщо кожному значенню t відповідає певне значення вектора $\vec{a}$

$$\vec{a} = \vec{a}(t).$$

При дослідженнях кінематики точки та твердих тіл векторними функціями скалярного аргументу (часу) є радіуси-вектори точок $\vec{r} = \vec{r}(t)$, їх швидкості $\vec{v} = \vec{v}(t)$ та прискорення $\vec{a} = \vec{a}(t)$.

При кінематичних дослідженнях над векторними функціями скалярного аргументу проводяться математичні операції: знаходження їх суми, векторного та скалярного їх добутку, добутку векторних функцій на скалярну функцію або стали скалярну величину, диференціювання та інтегрування.

Як відомо [5] є два методи проведення математичних операцій над векторними величинами: безкоординатний – оперують безпосередньо з векторами не зв'язуючи їх з певними системами координат та координатний – операції проводяться над скалярними величинами, які аналітично визначають вектор в деякій системі координат. При цьому установлені безкоординатним способом операції не залежать від вибору координатної системи і, як наслідок, є інваріантними. Безкоординатний метод є більш компактним в порівнянні з координатним і застосовується переважно при проведенні теоретичних досліджень. Координатний метод також дозволяє побудувати систему інваріантних операцій, які відрізняються від операцій, виконаних безпосередньо над векторами, лише формою запису і застосовується як при теоретичних дослідженнях так і при розв'язуванні конкретних задач.

Математичні операції над векторними функціями скалярного аргументу: знаходження їх суми, векторного та скалярного добутку, добутку векторних функцій на скалярну функцію виконуються так само як і над будь-якими векторними величинами.

Диференціювання векторних функцій скалярного аргументу, добутку векторних функцій на скалярну, скалярного або векторного добутку векторних функцій виконуються за правилами, які аналогічні відомим правилам диференціювання скалярних функцій.

Нехай необхідно визначити швидкість змінювання векторної функції $\vec{\rho}(t)$, яка характеризує деяке механічне явище в певній системі відліку. При диференціюванні цієї функції використаємо властивість: векторну функцію скалярного аргументу можна подати у вигляді добутку [2]

$$\vec{\rho}(t) = \vec{c}_\rho(t) \cdot \rho(t), \quad (1)$$

де: $\vec{c}_\rho(t)$ – одинична векторна функція (орт вектора $\vec{\rho}(t)$); $\rho(t)$ – скалярна функція (модуль векторної функції $\vec{\rho}(t)$).

Продиференціюємо за часом вираз (1)

$$\frac{d\vec{\rho}(t)}{dt} = \frac{d\vec{c}_\rho(t)}{dt} \cdot \rho(t) + \vec{c}_\rho(t) \cdot \frac{d\rho(t)}{dt}. \quad (2)$$

В формулі (2) перша складова в правій частині характеризує змінювання напрямку вектора $\vec{\rho}(t)$, а друга складова характеризує змінювання його величини (модуля).

Як відомо [2], похідна за часом від одиничної векторної функції дорівнює

$$\frac{d\vec{c}_\rho(t)}{dt} = \vec{\omega} \times \vec{c}_\rho(t), \quad (3)$$

де: $\vec{\omega}$ – вектор кутової швидкості обертання вектора $\vec{\rho}(t)$, який спрямований за правилом правого гвинта вздовж осі обертання.

Отже, похідна за часом векторної функції скалярного аргументу $\vec{\rho}(t)$ буде мати вигляд

$$\frac{d\vec{\rho}(t)}{dt} = (\vec{\omega} \times \vec{c}_\rho(t)) \cdot \rho(t) + \vec{c}_\rho(t) \cdot \frac{d\rho(t)}{dt}. \quad (4)$$

В загальному випадку векторна функція $\frac{d\vec{\rho}(t)}{dt}$ буде спрямована по дотичній до годографа функції $\vec{\rho}(t)$.

Якщо скалярна функція $\rho(t) = \text{const}$, то вектори $\vec{\rho}(t)$ і $\frac{d\vec{\rho}(t)}{dt}$ будуть взаємно перпендикулярні, при $\vec{c}_\rho(t) = \text{const}$ а $\rho(t) \neq \text{const}$ вектори $\vec{\rho}(t)$ і $\frac{d\vec{\rho}(t)}{dt}$ будуть лежати на одній прямій.

Розглянемо більш складний випадок диференціювання векторних функцій скалярного аргументу.

Нехай в деякій точці простору відбувається механічне явище, яке характеризується деякою функцією $\vec{\rho}(t)$ і яке фіксується в двох системах відліку: у системі, де це явище відбувається безпосередньо, яку будемо називати відносною, і в системі, яку приймаємо за нерухому і відносно якої рухається рухома.

Швидкість змінювання векторної функції $\vec{\rho}(t)$ відносно рухомої системи відліку будемо називати відносною похідною за часом, а відносно нерухомої системи відліку – абсолютною похідною векторної функції за часом.

Установимо залежність між абсолютною та відносною похідними векторної функції $\bar{\rho}(t)$.

Векторна функція $\bar{\rho}(t)$ відображає суть механічного явища, яке відбувається у відносній системі відліку і не залежить від руху цієї системи відліку відносно нерухомої.

Отже, відносна похідна за часом векторної функції скалярного аргументу $\bar{\rho}(t)$ згідно з рівнянням (4) буде мати вигляд

$$\left(\frac{d\bar{\rho}(t)}{dt} \right)_r = (\bar{\omega}_r \times \bar{c}_\rho(t)) \cdot \rho(t) + \bar{c}_\rho \cdot \frac{d\rho(t)}{dt}, \quad (5)$$

де $\bar{\omega}_r$ – вектор кутової швидкості обертання вектора $\bar{\rho}(t)$ у відносній системі відліку.

Розглянемо тепер абсолютну похідну від векторної функції $\bar{\rho}(t)$. Враховуючи, що на величину модуля векторної функції $\bar{\rho}(t)$ зміна положення рухомої системи відліку відносно нерухомої не впливає, а на величину змінювання напрямку даної векторної функції впливає додатково лише кутова швидкість обертання тіла відліку рухомої системи запишемо похідну векторної функції $\bar{\rho}(t)$ за часом відносно нерухомої системи відліку – абсолютну похідну

$$\left(\frac{d\bar{\rho}(t)}{dt} \right)_a = (\bar{\omega}_r \times \bar{c}_\rho(t)) \cdot \rho(t) + \bar{c}_\rho \cdot \frac{d\rho(t)}{dt} + (\bar{\omega}_e \times \bar{c}_\rho(t)) \cdot \rho(t), \quad (6)$$

де $\bar{\omega}_e$ – вектор кутової швидкості обертання тіла відліку рухомої системи відносно миттєвої осі, що проходить через початок відліку рухомої системи.

Тоді з урахуванням рівняння (5) запишемо рівняння, яке виражає абсолютну похідну векторної функції $\bar{\rho}(t)$ за часом

$$\left(\frac{d\bar{\rho}(t)}{dt} \right)_a = \left(\frac{d\bar{\rho}(t)}{dt} \right)_r + (\bar{\omega}_e \times \bar{c}_\rho(t)) \cdot \rho(t) \quad (7)$$

або

$$\left(\frac{d\bar{\rho}(t)}{dt} \right)_a = \left(\frac{d\bar{\rho}(t)}{dt} \right)_r + \bar{\omega}_e \times \bar{\rho}(t). \quad (8)$$

Таким чином безкоординатним способом одержана формула Бура (8), з якої випливає, що абсолютна похідна векторної функції скалярного аргументу дорівнює векторній сумі відносно похідної цієї функції і векторного добутку кутової швидкості переносного обертання тіла на вектор, який диференціюють.

Якщо фізичне явище, яке характеризується деякою векторною функцією $\bar{\rho}(t)$ і яке фіксується крім нерухомої в декількох рухомих системах відліку, які матимуть свої тіла відліку, кожне з яких буде мати свій вектор кутової швидкості обертання відносно своєї миттєвої осі $\bar{\omega}_{ei}$, то абсолютна похідна векторної функції $\bar{\rho}(t)$ (8) прийме вигляд

$$\left(\frac{d\bar{\rho}(t)}{dt} \right)_a = \left(\frac{d\bar{\rho}(t)}{dt} \right)_r + \sum_{i=1}^n \bar{\omega}_{ei} \times \bar{\rho}(t) \quad (9)$$

Нижче наведені доведення декількох теорем кінематики, які виконані на основі запропонованого способу диференціювання векторних функцій скалярного аргументу.

Розглянемо рух вільного твердого тіла G . Як відомо, рух вільного твердого тіла можна нескінченною кількістю способів розкласти на два рухи: поступальний, який

визначається рухом довільної фіксованої точки тіла – полюса, та обертальний навколо миттєвої осі, що проходить через цей полюс, з деякою кутовою швидкістю $\bar{\omega}_e$.

Виберемо в тілі довільні дві точки A та B (рис. 1). Визначимо їх положення відносно нерухомої точки O простору радіусами-векторами $\bar{r}_A$ та $\bar{r}_B$, а положення точки B відносно точки A радіус-вектором $\bar{\rho}$. Прийmemo точку O за початок нерухомої системи відліку, а точку A – за початок рухомої системи відліку (полюс). Тоді положення точки B відносно рухомої системи відліку буде визначитись радіусом-вектором $\bar{\rho}_{BA}$. Під час всього руху тіла радіуси-вектори будуть змінюватись з часом: $\bar{r}_A$ та $\bar{r}_B$ – за величиною та напрямом, а радіус-вектор $\bar{\rho}_{BA}$ – лише за напрямом. Під час всього руху тіла буде вірна залежність

$$\bar{r}_B = \bar{r}_A + \bar{\rho}_{BA}. \quad (10)$$

Визначимо швидкість точки B

$$\bar{v}_B = \frac{d\bar{r}_B}{dt} = \frac{d\bar{r}_A}{dt} + \frac{d\bar{\rho}_{BA}}{dt}. \quad (11)$$

Виразимо векторну функцію скалярного аргументу $\bar{\rho}_{BA}$ у вигляді добутку одиничної векторної функції $\bar{c}_\rho$ на скалярну функцію ρ_{BA}

$$\bar{\rho}_{BA} = \bar{c}_\rho \cdot \rho_{BA}. \quad (12)$$

Тоді

$$\bar{v}_B = \bar{v}_A + \frac{d\bar{c}_\rho}{dt} \cdot \rho_{BA} + \bar{c}_\rho \cdot \frac{d\rho_{BA}}{dt} = \bar{v}_A + [(\bar{\omega}_r + \bar{\omega}_e) \times \bar{c}_\rho] \cdot \rho_{BA} + \bar{c}_\rho \cdot \frac{d\rho_{BA}}{dt}. \quad (13)$$

Так як для точок твердого тіла $\frac{d\bar{\rho}_{BA}}{dt} = 0$, $\bar{\omega}_r = 0$, то одержимо рівняння яке виражає теорему про розподіл швидкостей точок вільного твердого тіла

$$\bar{v}_B = \bar{v}_A + \bar{\omega}_e \times \bar{\rho}_{BA} = \bar{v}_A + \bar{v}_{BA}. \quad (14)$$

Швидкість довільної точки вільного твердого тіла дорівнює векторній сумі швидкості довільно вибраного полюса і швидкості обертового руху навколо осі, яка проходить через полюс.

Визначимо проєкції швидкості двох точок A та B твердого тіла, яке перебуває в довільному русі, на вісь $\overline{AB}$, що проходить через ці точки (див. рис. 1).

Скористуємось рівнянням (14), яке виражає залежність між швидкостями цих точок, і спроекуємо його на вісь $\overline{AB}$:

$$v_B \cdot \cos(\bar{v}_B; \overline{AB}) = v_A \cdot \cos(\bar{v}_A; \overline{AB}) + v_{BA} \cdot \cos(\bar{v}_{BA}; \overline{AB}). \quad (15)$$

Так як вектор обертового швидкості $\bar{v}_{BA} \perp \overline{AB}$, то одержимо

$$v_B \cdot \cos(\bar{v}_B; \overline{AB}) = v_A \cdot \cos(\bar{v}_A; \overline{AB}). \quad (16)$$

Таким чином доведена теорема: *проєкції швидкостей двох точок абсолютно твердого тіла при будь-якому його русі на вісь, що проходить через ці точки, рівні між собою.*

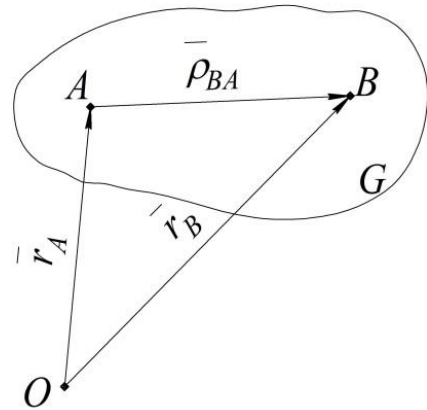


Рис. 1. До теореми про розподіл швидкості точок твердого тіла.

Розглянемо рух точки M (рис. 2), яка рухається відносно тіла G , з яким незмінно зв'язана рухома система координат $Oxyz$ і яке в свою чергу рухається певним способом відносно іншої системи координат $O_ax_ay_az_a$, яку приймаємо за базову (умовно вважаємо нерухомою). Нехай положення рухомої точки M відносно початку рухомої системи координат визначається радіусом-вектором $\vec{\rho}$, положення початку рухомої системи координат (точки O) відносно нерухомої системи координат – радіусом-вектором $\vec{r}_O$, а положення рухомої точки M відносно початку нерухомої системи координат – радіусом-вектором $\vec{r}$. В загальному випадку радіуси-вектори $\vec{\rho}$, $\vec{r}_O$ та $\vec{r}$ з часом можуть змінювати свій модуль та напрям в просторі, тобто, є векторними функціями скалярного аргументу t .

Під час всього руху буде вірною залежність

$$\vec{r} = \vec{r}_O + \vec{\rho},$$

де векторна функція $\vec{r}_O$ змінює свій напрям з часом лише в нерухомій системі відліку, векторна функція $\vec{\rho}$ змінює свій напрям відносно рухомої системи відліку, яка зв'язана з тілом G , і відносно нерухомої системи відліку внаслідок обертання тіла G навколо миттєвої осі OP з деякою кутовою швидкістю $\vec{\omega}_e$.

Визначимо абсолютну швидкість точки M

$$\vec{v}_a = \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right)_a = \left(\frac{d\vec{r}_O}{dt} \right)_a + \left(\frac{d\vec{\rho}}{dt} \right)_a. \quad (17)$$

Як відомо, $\left(\frac{d\vec{r}_O}{dt} \right)_a$ є швидкістю початку рухомої системи координат (тіла G) відносно нерухомої:

$$\left(\frac{d\vec{r}_O}{dt} \right)_a = \vec{v}_O \quad (18)$$

$\left(\frac{d\vec{\rho}}{dt} \right)_a$ – абсолютна похідна векторної функції $\vec{\rho}$ за часом, яка згідно з формулою (8) дорівнює

$$\left(\frac{d\vec{\rho}}{dt} \right)_a = \left(\frac{d\vec{\rho}}{dt} \right)_r + \vec{\omega}_e \times \vec{\rho} = \vec{v}_r + \vec{\omega}_e \times \vec{\rho}, \quad (19)$$

де $\vec{\omega}_e \times \vec{\rho}$ – оберտальна швидкість тієї точки тіла G , де в дану мить знаходиться рухома точка M , навколо миттєвої осі, що проходить через точку O .

Після підстановки (18) і (19) в формулу (17) одержимо

$$\vec{v}_a = \vec{v}_O + \vec{v}_r + \vec{\omega}_e \times \vec{\rho}. \quad (20)$$

Якщо прийняти до уваги, що векторна сума $\vec{v}_O + \vec{\omega}_e \times \vec{\rho}$ є швидкістю точки тіла G , де знаходиться рухома точка M і є для точки M переносною швидкістю $\vec{v}_e$, то

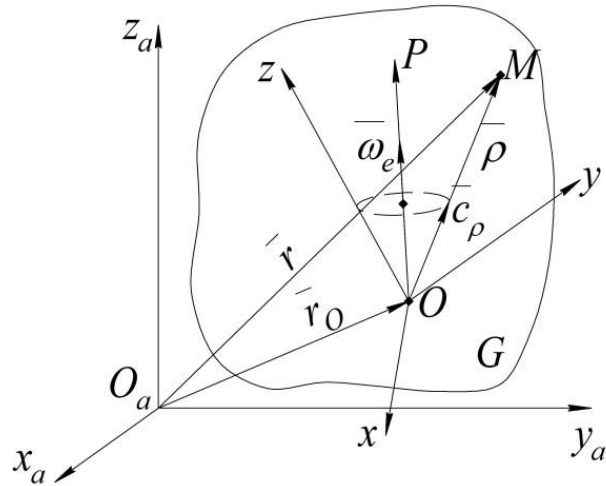


Рис. 2. До теореми про складання швидкостей та прискорень при складному русі точки.

$$\bar{v}_a = \bar{v}_e + \bar{v}_r. \quad (21)$$

Одержана рівність виражає теорему про складання швидкостей при складному русі точки: *абсолютна швидкість точки при складному її русі дорівнює геометричній сумі відносної та переносної швидкостей.*

Визначимо прискорення точки M продиференціювавши за часом векторну функцію її швидкості $\bar{v}_a$ у вигляді (20)

$$\bar{a}_a = \frac{d\bar{v}_a}{dt} = \frac{d\bar{v}_o}{dt} + \frac{d\bar{\omega}_e}{dt} \times \bar{\rho} + \bar{\omega}_e \times \left(\frac{d\bar{\rho}}{dt} \right)_a + \left(\frac{d\bar{v}_r}{dt} \right)_a \quad (22)$$

Застосувавши рівність (8) визначимо абсолютні похідні векторних функцій $\bar{\rho}$ та $\bar{v}_r$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\bar{\rho}(t)}{dt} \right)_a &= \left(\frac{d\bar{\rho}(t)}{dt} \right)_r + \bar{\omega}_e \times \bar{\rho}(t) = \bar{v}_r + \bar{\omega}_e \times \bar{\rho}(t) \\ \left(\frac{d\bar{v}_r}{dt} \right)_a &= \left(\frac{d\bar{v}_r}{dt} \right)_r + \bar{\omega}_e \times \bar{v}_r = \bar{a}_r + \bar{\omega}_e \times \bar{v}_r \end{aligned}$$

Підставимо значення абсолютних похідних векторних функцій $\bar{\rho}$ та $\bar{v}_r$ в рівняння (22) одержимо

$$\begin{aligned} \bar{a}_a &= \frac{d\bar{v}_o}{dt} + \frac{d\bar{\omega}_e}{dt} \times \bar{\rho} + \bar{\omega}_e \times (\bar{v}_r + \bar{\omega}_e \times \bar{\rho}) + \bar{a}_r + \bar{\omega}_e \times \bar{v}_r = \\ &= \bar{a}_o + \bar{\varepsilon}_e \times \bar{\rho} + \bar{\omega}_e \times \bar{v}_r + \bar{\omega}_e \times (\bar{\omega}_e \times \bar{\rho}) + \bar{a}_r + \bar{\omega}_e \times \bar{v}_r \end{aligned} \quad (23)$$

Так як

$$\bar{a}_o + \bar{\varepsilon}_e \times \bar{\rho} + \bar{\omega}_e \times (\bar{\omega}_e \times \bar{\rho}) = \bar{a}_e$$

є повним прискоренням тієї точки тіла G , де в дану мить знаходиться рухома точка M , для якої це прискорення є переносним прискоренням, а подвійний добуток $2(\bar{\omega}_e \times \bar{v}_r) = \bar{a}_c$ є коріолісовим (поворотним) прискоренням, то рівняння (23) запишемо у вигляді

$$\bar{a}_a = \bar{a}_e + \bar{a}_r + \bar{a}_c \quad (24)$$

Остання рівність виражає теорему про складання прискорень при складному русі точки: *абсолютне прискорення точки при складному русі дорівнює векторній сумі переносного, відносного та коріолісового прискорень.*

3. Висновки

На основі аналізу властивостей векторних функцій скалярного аргументу і аналізу фізичної суті кінематики точок твердого тіла та матеріальної точки і застосовуючи безкоординатний спосіб проведення математичних операцій на векторними функціями розроблені доведення теорем по визначенню кінематичних характеристик точок твердого тіла та окремої матеріальної точки. Застосування таких методів доведення теорем при вивченні дисципліни «Теоретична механіка» дозволяє суттєво (~ в 1,5 рази) скоротити час на доведення цих теорем, що є досить важливим в сучасних умовах.

Список використаної літератури

1. Бронштейн И. Н. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. Изд. 10-е стереотипное / И. Н. Бронштейн, К. А. Семендяев. – М.: «Наука», 1964. – 608 с.
2. Корн Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров. Определения, теоремы, формулы / Корн Г., Корн Т. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1970. – 720 с.

3. Яблонский А. А. Курс теоретической механики. Ч. 1. Статика. Кинематика. Учебник для вузов. Изд. 5-е испр. / А. А. Яблонский, В. М. Никифорова. – М.: Высшая школа, 1977. – 368 с.
4. Тарг С. М. Краткий курс теоретической механики. Учебник. 9-е изд., стер. / С. М. Тарг. – СПб.: Издательство «Лань», 2002. – 768 с.
5. Кильчевский Н. А. Курс теоретической механики, Т. 1 (кинематика, статика, динамика точки). Изд. 2-е. / Н. А. Кильчевский. – М.: Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», 1977. – 780 с.
6. Павловський М. А. Теоретична механіка / М. А. Павловський. – Київ: Техніка, 2002. – с. 510.
7. Никитин Н. П. Курс теоретической механики. Учеб. для машиностроит. и приборостроит. спец. вузов, 5-е изд. перераб. и доп. / Н. П. Никитин. – М.: Высш. шк., 1990. – 607 с.
8. Бондаренко А. А. Теоретична механіка. Підручник: У 2 ч. – Ч. 1: Статика. Кінематика / А. А. Бондаренко, О. О. Дубінін, О. М. Переяславцев. – К.: Знання, 2004. – 599 с.
9. Дронг В. И. Курс теоретической механики: Учебник для вузов / В. И. Дронг, В. В. Дубинин, М. М. Ильин и др. Под общей ред. К. С. Колесникова. 3-е изд., стереотип. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2005. – 736 с.
10. Бутенин Н. В. Курс теоретической механики. В двух томах / Н. В. Бутенин, Я. Л. Лунц, Д. Р. Меркин. – СПб.: Издательство «Лань», 2002. – 736 с.
11. Токар А. М. Теоретична механіка. Кінематика. Методи і задачі: Навч. посібник / А. М. Токар. – К.: Либідь, 2001. – 416 с.

References

1. Bronshtein I.N., Semendyaev K.A. (1964). *A reference book on mathematics for engineers and students of technical institutions*. 10th stereotype Ed. – Moscow: Nauka. – 608p (in Rus).
2. Korn G., Korn T. (1970). *A reference book on mathematics for scientists and engineers. Definitions, theorems, formulas*. - Moscow: Nauka. Main edition of physical and mathematical literature. – 720 p (in Rus).
3. Yablonsky A.A., Nikiforova V.M. (1977). *Course of theoretical mechanics*. Part 1. Statics. Kinematics. Textbook for technical institutions. 5th revised ed. - Moscow: High school. - 368 p (in Rus).
4. Targ S.M. (2002). *A short course of theoretical mechanics*: Textbook. 9th stereotype ed., – St. Petersburg: Publishing House "Lan". – 768 p (in Rus).
5. Kilchevsky N.A. (1977). *Course of theoretical mechanics*. T. 1 (kinematics, statics, dynamics of point). The 2nd Ed. – Moscow: The main editorial board of the physical and mathematical literature of the “Nauka” Publishers. – 780 p (in Rus).
6. Pavlovsky M.A. (2002). *Theoretical mechanics*. - Kyiv: Tekhnika. – 510 p (in Ukr).
7. Nikitin N.P. (1990). *Course of theoretical mechanics*. Textbook for machine building and instrument-making specialties of universities, 5th revised ed. – Moscow: High school. – 607 p (in Rus).
8. Bondarenko A.A., Dubinin O.O., Pereyaslavtsev O.M. (2004). *Theoretical Mechanics: Manual*: in 2 parts. – Part 1: Static. Kinematics. – Kyiv: Znannya, – 599 p (in Ukr).
9. V.I. Drong, V.V. Dubinin, M.M. Iljin and others (2005). *Course of theoretical mechanics*: Textbook for high schools. Under the general ed. of K.S. Kolesnikov. 3rd ed., The stereotype. – Moscow: MSTU after N.E. Bauman. – 736 p (in Rus).
10. Butenin N.V., Luntz Ya.L., Merkin D.R. (2002). *Course of theoretical mechanics*. In two volumes. – St. Petersburg: Publishing House "Lan". – 736 p (in Rus).

11. Tokar A.M. (2001). *Theoretical mechanics. Kinematics: Methods and objectives: Teaching Manual* – Kyiv: Lybid. – 416 p (in Ukr).

Summary. *O.A. Gulivets, S.Yu. Oliinyk, G.A. Markevych. Vector functions of a scalar argument in research of point and solid body kinematics.* In the work, the uncoordinated (vector) method of mathematical operations on vector values is used, for example, to prove the theorems of point and solids kinematics. This way in the educational process can reduce the time to prove some theorems on the course "Theoretical mechanics". Thus, in the study of kinematics of a point and solids, the vector functions of a scalar argument (time) are used: radius vector, velocity, acceleration, over which there is a need to perform a number of mathematical operations: finding their sum, vector and scalar product, and the product of vector functions on scalar, differentiation and integration, etc. As you know, there are two methods for conducting mathematical operations over vector values: a coordinate (or vector) that operates directly with vectors and coordinates - operations are performed over scalar quantities that are analytically determined in some coordinate system. The non-coordinate method is more compact and expedient for use in conducting theoretical studies. Using some properties of vector functions: the possibility of depicting a vector function of a scalar argument in the form of a product of a unit vector function (orth function) on a scalar function (a module of a vector function) and the rules of differentiation of vector functions, using the uncoordinated method, the proof of several theorems for determining the kinematic parameters of free points a solid body and a single point with its complex motion. The application of such methods of proving the theorems in the study of the discipline "Theoretical Mechanics" allows some time to be reduced to prove these theorems, which is an important factor in modern conditions.

Keywords: non-coordinate method, kinematics of solid body, vector function, scalar, derivative, radius vector, velocity, acceleration.

Одержано редакцією 27.09.2017

Прийнято до друку 20.10.2017

Відомості про авторів

Danielewski Marek, Doctor of Science, Professor,
Faculty of Materials Science and Ceramics, AGH University of Science and Technology,
Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Poland, daniel@agh.edu.pl

Cserháti Csaba, associate professor, PhD,
University of Debrecen, cserhati.csaba@science.unideb.hu

Vecsei Gergő, undergraduate student, no sci. degree,
University of Debrecen, gergo.vecsei@gmail.com

Sapa Lucjan, assistant professor,
Faculty of Applied Mathematics, AGH University of Science and Technology,
sapa@agh.edu.pl

Бобров О. А., студент,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
oleg_bobrov@ukr.net

Герасименко В.І., доктор фіз.-мат. наук, професор,
провідний науковий співробітник, Інститут математики НАНУ, gerasym@imath.kiev.ua

Гонда А.Р., студент, кафедра фізики,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
andriy.gonda@gmail.com

бульв. Шевченка 81, 18031, Черкаси

Гохман О., доктор фіз.-мат. наук, професор,
завідувач кафедри фізики, Південноукраїнський національний педагогічний
університет імені К. Д. Ушинського, Одеса-65020, alexander.gokhman@gmail.com

Грушка Я.І.
старший науковий співробітник, відділ нелінійного аналізу, Інститут математики НАН
України, м.Київ, grushka@imath.kiev.ua

Гулівець О.А., кандидат тех. наук, доцент,
кафедра прикладної механіки та загальноінженерних дисциплін, ДВНЗ «Криворізький
національний університет», вул. Віталія Матусевича, 11, Кривий Ріг, Україна, 50027.

Гусак А.М., доктор фіз.-мат. наук, професор,
заслужений діяч науки і техніки України,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
бульв. Шевченка 81, 18031, Черкаси, amgusak@ukr.net

Денисюк В.П., доктор фіз.-мат. наук, професор,
завідувач кафедри вищої та обчислювальної математики Інституту комп'ютерних
інформаційних технологій Національного авіаційного університету,
kvomden@nau.edu.ua

Дерев'яно С. І., аспірант,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
бульв. Шевченка 81, 18031, Черкаси, Україна, derevianko.serhii@gmail.com

Дідук В. А., кандидат тех. наук, доцент,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, inokc@i.ua

Замрій І.В., кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
кафедра вищої математики, Державний університет телекомунікацій,
irinafraktal@gmail.com

Колінько С. О., кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
Черкаський державний технологічний університет, кафедри фізики,
kulyk1211@gmail.com

Кондря М., аспірант,

Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського, Одеса-65020, marianna.kondrea@gmail.com

Король Я. Д., кандидат фіз.-мат. наук, доцент,

заступник директора навчально-наукового центру фізико-хімічних досліджень ЧНУ, Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,

бульв. Шевченка 81, 18031, Черкаси, Україна, yaking@ukr.net

Левчук К. Г., кандидат технічних наук, доцент,

докторант, Івано-Франківський НТУ нафти і газу, kgl.imp.nan@gmail.com

Ляшенко О. Ю., м.н.с.,

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,

бульв. Шевченка 81, 18031, Черкаси, Україна, lyashenko.al@gmail.com

Ляшенко Ю. О., доктор фіз.-мат. наук, доцент,

директор ННІ інформаційних та освітніх технологій, Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, бульв. Шевченка 81, 18031, urico@ukr.net

Маркевич Г. А., студент,

ДВНЗ «Криворізький національний університет», вул. Віталія Матусевича, 11, Кривий Ріг, Україна, 50027,

Морозович В. В., м.н.с.,

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,

бульв. Шевченка 81, 18031, Черкаси, Україна, vladmorozua@gmail.com

Негоденко О. В., здобувач,

кафедра вищої та обчислювальної математики Інституту комп'ютерних інформаційних технологій Національного авіаційного університету,

negodenkoav@i.ua

Олійник С. Ю., асистент,

кафедра прикладної механіки та загальноінженерних дисциплін, ДВНЗ «Криворізький національний університет», вул. Віталія Матусевича, 11, Кривий Ріг, Україна, 50027,

oleynic.sveta@gmail.com

Пантелєв М. Г. кандидат фіз.-мат. наук, доцент,

старший науковий співробітник, кафедра «Електричні апарати», Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», Харків,

m150462@yahoo.com

Пасічний М. О., кандидат фіз.-мат. наук, доцент,

Доцент кафедри фізики, Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, бульв. Шевченка 81, 18031, Черкаси, Україна, pasichnyy@ukr.net

Петров А. Д., аспірант,

Днепровський національний університет імені Олеся Гончара, caf-vmi@ukr.net

Терентьев Д.,

Group Leader, SCK•CEN, Nuclear Material Science Institute, Boeretang 200, B-2400 Mol

Тютенко В. М., магістр фізики та астрономії,

ст. лаборант навчально-наукового центру фізико-хімічних досліджень, Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, vasyatm95@gmail.com

Зміст

К.П. Гуров – персоналія до 100 річчя	i
<i>Герасименко В. І.</i>	
Про розповсюдження початкових кореляцій в активних м'яких речовинах.....	3
<i>Гусак А. М., Гонда А. Р.</i>	
Інтенсивна пластична деформація КоВо-методу – оцінки та модель.....	12
<i>Данілевські М., Сапа Л.</i>	
Нелінійне рівняння Клейна-Гордона у пружному твердому середовищі Коші-Нав'є.....	22
<i>Гохман О., Терентьев Д., Кондря М.</i>	
Ізохронний відпал електронно-опроміненого вольфраму, моделюється методом КД: Вплив вуглецю на першу і другу стадії відновлення	29
<i>Петров А. Д.</i>	
Поведінка матеріалу з пам'яттю форми та псевдопружністю при нестационарному навантаженні тіл	37
<i>Дерев'яно С. І., Морозович В. В., Король Я. Д., Ляшенко О. Ю., Ляшенко Ю. О.</i>	
Твердофазні реакції в порошкових паяльних сумішах системи Cu-Sn	44
<i>Бобров О. А., Пасічний М. О., Ляшенко О. Ю., Гусак А. М.</i>	
Розмірний ефект розподілу часів до відмови та часів перетворення	53
<i>Тютенко В. М., Морозович В. В., Дідук В. А., Колінько С. О., Ляшенко Ю. О.</i>	
Вплив SMAT обробки на структуру електроосаджених в стаціонарному, реверсному та стохастичному режимах прошарків міді.....	63
<i>Пантелеят М. Г.</i>	
Застосування методу скінчених елементів для комп'ютерного моделювання електромагнітних і теплових процесів у індукційних кухонних плитах і посуді, що нагрівається	79
<i>Замрій І. В.</i>	
Спосіб задання функцій, визначених у термінах Q_3 -зображення дійсних чисел та інваріантами у їх зображенні.....	86
<i>Левчук К. Г.</i>	
Процес руйнування неголономних в'язей прихопленої бурильної колони методом поперечних вібрацій	97
<i>Король Я.Д., Cserhati Csaba, Vecsei Gergő, Тютенко В.М.</i>	
Експериментальне вивчення розпаду сплавів Al-Zn при різних температурних і деформаційних режимах.....	106
<i>Денисюк В. П., Негоденко О. В.</i>	
Математичні моделі на основі фундаментальних тригонометричних сплайнів.....	115
<i>Грушка Я. І.</i>	
Критерій одностайної поступальності систем відліку в універсальних кінематиках.....	122
<i>Гулівець О. А., Олійник С. Ю., Маркевич Г. А.</i>	
Векторні функції скалярного аргументу при дослідженнях кінематики точки та твердого тіла	138
Відомості про авторів	147

Content

K.P. Gurov – personalia.....	iii
<i>Gerasimenko V. I.</i>	
On propagation of initial correlations in active soft matter	3
<i>Gusak A. M., Gonda A. R.</i>	
Severe plastic deformation by KoBo method – estimations and model	12
<i>Danielewski Marek, Sapa Lucjan</i>	
Quaternionic Quantum Wave And Gravity In The Planck-Kleinert Crystal.....	22
<i>Gokhman A., Terentyev D., Kondria M.</i>	
Isochronal Annealing Of Electron-Irradiated Tungsten Modelled By Cd Method: Influence Of Carbon On The First And Second Stages Of Recovering	29
<i>Petrov A. D.</i>	
Behavior of material with a memory of form and pseudoelasticity under nonstationary loading of the body	37
<i>Derevianko S. I. , Morozovych V. V. , Korol Ya. D. , Liashenko O. Yu., Lyashenko Yu. O.</i>	
The solid state reactions in powder soldering mixtures of Cu-Sn system.....	44
<i>Bobrov O.A., Pasichnyy M.O., Liashenko O.Yu., Gusak A.M.</i>	
Size effect on Distributions of the Times To Failure and Times To Transformation.....	53
<i>Tiutenko V. M., Morozovych V. V., Diduk V. A., Kolinko S. O., Lyashenko Yu. O.</i>	
The influence of SMAT processing on microstructure of copper films electroplated in steady-state, reversed impulse and stochastic regimes.....	63
<i>Pantelyat M.G.</i>	
Application of the finite element method to computer simulation of electromagnetic and thermal processes in induction cookers and heated dishes	79
<i>Zamrui I. V.</i>	
A method for specifying functions defined in terms of the Q_3 -representation of real numbers and invariants in their representation.....	86
<i>Levchuk K.</i>	
Destruction of Nonholonomic Constraints a Sticking Drill String by the Method of Transverse Vibrations.....	97
<i>Ya. Korol, Csaba Cserhati, Gergő Vecsei, V. Tiutenko</i>	
Experimental study of Al-Zn alloy decomposition at various temperature and deformation regimes.	106
<i>Denusiuk V., Nehodenko O.</i>	
Mathematical models on the basis of fundamental trigonometric splines.....	115
<i>Grushka Ya. I.</i>	
The criterion for self-consistently translational motion of reference frames in universal kinematics.....	122
<i>Gulivets O. A., Oliynyk S. Yu., Markevych G. A.</i>	
Vector functions of a scalar argument in research of point and solid body kinematics.....	138
About the Authors	147

**ВІСНИК
ЧЕРКАСЬКОГО
УНІВЕРСИТЕТУ**

Серія фізико-математичні науки
№1. 2017

Відповідальний за випуск:
Ляшенко Ю.О.

Відповідальний секретар:
Сторожук Н.В.

Підписано до друку Формат 84x108/16.
Ум. друк. арк. 9,0. Тираж 300 пр.

Видавець і виготівник видавничий відділ
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького
Адреса: 18000, Черкаси, бул. Шевченка, 81, кімн. 117,
Тел.(0472) 37-13-16, факс (0472) 37-22-33,
e-mail: vydav@cdu.edu.ua, <http://www.cdu.edu.ua>
Свідоцтво про внесення до державного реєстру
суб'єктів видавничої справи ДК №3427 від 17.03.2009 р