

A, B — свободные параметры ($A+B \neq 0$).

Применительно к модельному уравнению $\dot{u} = -\lambda u$, $\lambda > 0$, методы (3), (6) приводят к соотношению $\dot{y} = Sy$, где

$$S = (54(A+B)^3 - 54(A+B)^2(3A+B)x + 9(A+B) \cdot (23A^2 + 18AB + 3B^2)x^2 - (151A^3 + 207A^2B + 81AB^2 + 9B^3)x^3) / (54(A+B)^3 - 108A(A+B)^2x + 72A^2(A+B)x^2 - 16A^3x^3), \quad x = \lambda\tau > 0. \quad (7)$$

Если $|S| < 1$, то методы (3), (6) A -устойчивы, при $0 \leq S < 1$ — монотонны [1]. Достаточные условия A -устойчивости и монотонности этих методов дает следующая

Теорема. Пусть $A+B > 0$, $A < 0$, $B = k|A|$, $k > 0$. Тогда при любом шаге интегрирования методы (3), (6) A -устойчивы, если

$$k \in]1; 3] \cup \{5\}, \quad (8)$$

и монотонны, если

$$k \in \left] 1, 3 - \frac{2}{3} \sqrt{3} \cos \frac{1}{3} \arccos \frac{\sqrt{3}}{3} - 2 \sin \frac{1}{3} \arccos \frac{\sqrt{3}}{3} \right]. \quad (9)$$

Теорема позволяет выделить однопараметрическое семейство нелинейных явных одношаговых методов третьего порядка точности, требующих вычисления двух значений f на каждом шаге интегрирования, вида

$$\hat{y} = y + (k-1)\tau f - \frac{f}{kf - f\left(y + \frac{2}{3}\tau f\right)} - \frac{1}{4}(k-1)(3k-7)\tau \cdot$$

$$\cdot \frac{f\left(f - f\left(y + \frac{2}{3}\tau f\right)\right)}{\left(kf - f\left(y + \frac{2}{3}\tau f\right)\right)^2} + \frac{1}{8}(k-1)(3k^2 - 18k + 23)\tau \frac{f\left(f - f\left(y + \frac{2}{3}\tau f\right)\right)^2}{\left(kf - f\left(y + \frac{2}{3}\tau f\right)\right)^3},$$

при любом τ A -устойчивых, если имеет место (8), и монотонных, если выполнено (9).

ЛИТЕРАТУРА

1. Бобков В. В. — Дифференц. уравнения, 1977, № 11, с. 2076.

Поступила в редакцию
01.06.81.

Кафедра вычислительной математики

УДК 517.926.4

О. А. КАСТРИЦА

ОБ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ОТКЛОНЕНИЯХ РЕШЕНИЙ ПРИ ОГРАНИЧЕННЫХ ВОЗМУЩЕНИЯХ ЛИНЕЙНОЙ СИСТЕМЫ

Пусть

$$\frac{dx}{dt} = A(t)x \quad (1)$$

система с кусочно-непрерывной на $[0, +\infty[$ матрицей $A(t)$ и $B(t) = [b_{ij}(t)]_{i,j=1, \dots, n}$ — кусочно-непрерывная на $[0, +\infty[$ матрица с условием $\|B(t)\| \leq \alpha$; $\alpha > 0$ — фиксированная величина. Рассмотрим систему

$$\frac{dy}{dt} = [A(t) + B(t)]y. \quad (2)$$

Обозначим $x(t, \xi)$ и $y_B(t, \xi)$ решения систем (1) и (2) со значениями ξ при $t=0$ и $\Delta_B(t) = y_B(t, \xi) - x(t, \xi)$.

Задача. Найти $B_0(t)$, $\|B_0(t)\| \leq \alpha$, такую, что $\|\Delta_{B_0}(t)\| = \max_{\|B(t)\| \leq \alpha} \|\Delta_B(t)\| + o(\alpha)$, $t \in [0, T]$, $T \in R^+$.

Для определенности считаем $B_0(t)$ непрерывной слева. Обозначим $e_k = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ (1 на k -м месте) и $B_{ij} = e_i^T e_j e$, $e \in R^+$.

Вектор $k_{ij}(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{y_{B_{ij}}(t, \xi) - x(t, \xi)}{\varepsilon}$ называется вектором чувствительности решения $x(t, \xi)$ системы (1) к возмущению ij -го элемента матрицы $A(t)$, $k_{ij}(t) = (k_{ij}^1(t), k_{ij}^2(t), \dots, k_{ij}^n(t))^T$.

Будем считать систему (1) стационарной. Тогда решение $x(t, \xi)$ будет непрерывно дифференцируемой функцией t и элементов a_{ij} матрицы A , $i, j = 1, \dots, n$, поэтому $y_B(t, \xi) = x(t, \xi) + \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial x(t, \xi)}{\partial a_{ij}} b_{ij} + o(\alpha)$.

Но для стационарной системы $\frac{\partial x(t, \xi)}{\partial a_{ij}} = k_{ij}(t)$, $\frac{\partial x_i(t, \xi)}{\partial a_{ij}} = k_{ij}^i(t)$. Значит, $\|\Delta_B(t)\| = \left| \sum_{i,j=1}^n k_{ij}(t) b_{ij} \right| + o(\alpha)$.

Пусть $\|x\| = \max_i |x_i|$. Тогда $\|\Delta_B(t)\| = \max_{l=1, \dots, n} \left| \sum_{i,j=1}^n k_{ij}^l(t) b_{ij} \right| + o(\alpha)$.

а) Для нормы матрицы, определяемой формулой $\|A\| = \max_{i,j=1, \dots, n} |a_{ij}|$ максимальным отклонением решения будет $\max_{\|\Delta_B(t)\| \leq \alpha} \|\Delta_B(t)\| = \alpha \cdot \max_{l=1, \dots, n} \times \times \sum_{i,j=1}^n |k_{ij}^l(t)| + o(\alpha)$.

Чтобы построить матрицу $B_0(t)$, реализующую экстремальное отклонение, сравниваем величины $\mu_e = \sum_{i,j=1}^n |k_{ij}^l(t)|$, $l = 1, \dots, n$. Если $\max_{l=1, \dots, n} \mu_l = \mu_p$, то матрицей $B_0(t)$ в каждый момент t будет $B_0(t) = \alpha \cdot \lim_{s \rightarrow t-0} [\text{sgn } k_{ij}^p(s)]_{i,j=1, \dots, n}$. Это кусочно-постоянная матрица, меняющая значения в моменты, когда k_{ij}^p меняют знаки, и непрерывная слева.

в) Если норма матрицы определяется формулой $\|A\| = \sum_{i,j=1}^n |a_{ij}|$, то $\max_{\|\Delta_B(t)\| \leq \alpha} \|\Delta_B(t)\| = \alpha \cdot \max_{l,i,j=1, \dots, n} |k_{ij}^l(t)| + o(\alpha)$.

Предположим, что в момент t $\max |k_{ij}^l(t)|$ достигается при $(l, i, j) = (p, q, r)$. Тогда $B_0(t) = \alpha e_q^T e_r$. Это кусочно-непрерывная матрица. В моменты переключений считаем ее непрерывной слева.

Нахождение вектора чувствительности. Дифференцируя равенство $\frac{dx(t, \xi)}{dt} = Ax(t, \xi)$ по a_{ij} и меняя порядок дифференцирования по t и по a_{ij} , получим неоднородную линейную систему для определения $k_{ij}(t)$:

$$\frac{dk_{ij}}{dt} = Ak_{ij} + e_i^T e_j x(t, \xi). \text{ Откуда } k_{ij}(t) = e^{At} k_{ij}(0) + \int_0^t e^{A(t-\tau)} e_i^T e_j e^{A\tau} \xi d\tau.$$

Поскольку $k_{ij}(0) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{e^{(A+B_{ij})t} - e^{At}}{\varepsilon} \Big|_{t=0} = 0$, то $k_{ij}(t) = \int_0^t e^{A(t-\tau)} e_i^T e_j e^{A\tau} \xi d\tau$, $i, j = 1, \dots, n$.

Для нахождения векторов чувствительности можно использовать матрицы чувствительности K_{ij} фундаментальной матрицы $X(t)$, определенные в [1]. В самом деле, $x(t, \xi) = X(t) \xi$. Откуда $k_{ij}(t) = \frac{\partial X(t) \xi}{\partial a_{ij}} = K_{ij} \xi$. В случае $n = 2$ матрицы K_{ij} вычислены в [1].

ЛИТЕРАТУРА

1. Кастрица О. А., Феденя М. М. О чувствительности и экстремальном возмущении фундаментальной матрицы.— Рукопись деп. в ВИНТИ, № 1352-81. Деп. от 25.03.81.

Поступила в редакцию
01.07.81.

Кафедра высшей математики

УДК 539.193 : 546.766

Н. Я. ШИШКИН, И. М. ЖАРСКИЙ,
В. М. ГОГОЛИНСКИЙ, И. П. ЗЯТЬКОВ

СТРУКТУРА И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИОКСОДИБРОМИДОВ МОЛИБДЕНА И ВОЛЬФРАМА

Для исследований структурных параметров соединений тяжелых элементов необходимо разработать методы расчета таких соединений и определить тестовые объекты. Следует отметить, что для бромидов и оксобромидов молибдена и вольфрама отсутствуют систематические надежные данные, а оценки их параметров строения, как показывает наш опыт [1, 2], не обоснованы.

В продолжение исследований оксогалогенидов элементов VI Б подгруппы [1] выполнено электронографическое исследование строения диоксодибромидов молибдена и вольфрама в газовой фазе.

Препараты MoO_2Br_2 и WO_2Br_2 синтезировались из коммерческих продуктов MoO_3 и WO_3 (с предварительным высушиванием) и CBr_4 квалификации ч. д. а. и очищались многократной перегонкой [3, 4].

Диоксодибромиды молибдена и вольфрама испарялись при температуре 383 и 513 К соответственно. Использовались ампулы из никеля, а также молибдена с платиновой вставкой и графитированным паропроводом. Съемки проводились на двух различных приборах — реконструированном ЭГ 100 А в БТИ имени С. М. Кирова и ЭГ 100 М в МГУ имени М. В. Ломоносова (с целью уменьшения систематических погрешностей). Дифракционная картина регистрировалась на особоконтрастные диапозитивные фотопластинки чувствительностью 2 ед. ГОСТ. Съемка велась с двух расстояний сопло ампулы — фотопластинка (~ 180 и ~ 420 мм). Длина волны электронов измерялась по электронограммам кристаллического стандарта ZnO и нестабильность ее в ходе эксперимента составляла менее 0,1 %. Хотя эллиптичность картины не была обнаружена, измерение диаметра колец кристаллического стандарта проводилось по тем же направлениям, что и микрофотометрирование. Электронограммы фотометрировались на модернизированном микрофотометре МФ4 по диаметру, чтобы уменьшить влияние неточности определения центра дифракционной картины. Получены кривые полного почернения, которые после обработки преобразованы в кривые полной интенсивности рассеяния $I_{(s)}$ в интервалах по шкале s для соединения молибдена 2,2—13,2 и 4,6—27,4 $\text{\AA}^{-1}$ и для вольфрама 2,0—13,8 и 4,8—30,2 $\text{\AA}^{-1}$. Для этих кривых графически [5] выделены молекулярные составляющие интенсивности рассеяния $sM(s)$. Обработка всех кривых велась методом наименьших квадратов (МНК) по программе КСЕД 26 на ЭВМ ЕС 1033 [6] при незначительной коррекции линии фона. После получения совпадающих результатов на разных отрезках они были объединены для каждого соединения в одну кривую молекулярной интенсивности и снова обработаны по МНК.

В качестве начальных значений варьируемых параметров в этих операциях выбраны оценки для расстояний MeO (концевые) в оксидах (MoO_3) и $(\text{WO}_3)_n$ в паре [7]; расстояния MeBr взяты из работы по MoBr_4 [8], направляющие вектора связей перенесены из данных по молекуле MoO_2Cl_2 [1], из работы [1] взяты начальные значения амплитуд колебаний. Кроме того, проанализированы кривые радиального распре-