

I. A. CHERNOV

Volume and area of intersection of a ball and an infinite parallelepiped

In the paper we study the solid being a model of the new phase nucleus for a phase change reaction. The solid is the intersection of the ball of a given radius R and an infinite parallelepiped, i.e. the cartesian product of the square with a given side a and a line. Such model appears, e.g., when describing dehydriding of activated alane: numerous nuclei of new metal phase appear and grow as hemispheres, but later they intersect being cut off by planes. Their total surface increases, reaching the maximal value that exceeds the initial total surface area S_0 of the old phase, then reduces, asymptotically tending to S_0 .

This property can explain the higher dehydriding rate (which depends on the surface area of the new phase) in the middle of the dehydriding reaction. We calculate volume, surface area, and some other quantities for this solid as functions of R and a . They are expressed via non-trivial integrals as elementary functions. Using these quantities, we present the conservative mathematical model describing the dehydriding reaction. Also we discuss properties of the obtained functions and the constructed model.

УДК 517.38

И. А. ЧЕРНОВ

ОБЪЕМ И ПЛОЩАДЬ ПОВЕРХНОСТИ ПЕРЕСЕЧЕНИЯ БЕСКОНЕЧНОГО ПАРАЛЛЕЛЕПИПЕДА И ШАРА

Аннотация. В статье рассматривается тело, являющееся пересечением шара и прямого произведения квадрата на прямую (бесконечный параллелепипед), причем диаметр шара лежит на оси симметрии параллелепипеда. Вычисляются объем и площадь поверхности этого тела.

Ключевые слова: *объем прямых произведений, площадь поверхности*

§ 1. Введение

Возникающие при решении прикладных задач интегралы, как правило, не вычисляются в элементарных (и даже специальных) функциях, либо выражения настолько громоздки, что делают затруднительной дальнейшую работу с результатом. К нетривиальным интегралам приводят, например, задачи материаловедения, в которых для описания законов сохранения необходимо знать объемы и площади поверхностей тех или иных тел. Однако в редких случаях возникающие на практике интегралы (часто зависящие от параметров) удается вычислить точно, причем зависимость результата от параметров обозрима. Такие задачи представляют практический и педагогический интерес.

Настоящая работа посвящена изучению геометрического тела, которое является моделью зародыша новой фазы при фазовом переходе и представляет собой пересечение шара некоторого радиуса $R > 0$ (параметр) и «бесконечного параллелепипеда» — прямого произведения квадрата D на прямую, причем диаметр шара лежит на оси симметрии параллелепипеда, то есть на прямой, перпендикулярной плоскости квадрата и проходящей через его центр. Ребро квадрата

обозначим $2a$ (число a — второй параметр). Очевидно, что можно рассматривать конечный параллелепипед достаточной высоты R .

Эта задача возникла в ходе работы по моделированию гидридного фазового перехода [1]. Частицы порошка гидрида алюминия (химического соединения металла с водородом) имеют форму, близкую к кубической (см. рис. 2 в [2]). В подходящих условиях (давление и температура в некотором диапазоне) гидрид разлагается на металл (алюминий) и водород, который покидает частицу. Особенно важен начальный этап процесса, на котором формируются начальные зародыши новой фазы металла, сравнимые по размеру с периодом кристаллической решетки материала, — именно этот этап определяет кинетику разложения гидрида. Существуют способы ускорить появление зародышей и тем самым — весь процесс выделения водорода, например облучением ультрафиолетовым светом. Детально процесс активации ультрафиолетом и связанные с этим физико-химические процессы описаны в [2].

Упрощенно можно считать¹, что зародыш растет во времени t , как полусфера на поверхности частицы порошка, то есть ограничен плоскостью грани кубической частицы и полусферой (той, что «внутри» куба) радиуса $r(t)$. Многочисленные зародыши распределены регулярно (например, в узлах решетки) и растут одинаково; пусть расстояние между центрами соседних сфер $2a$. При этом в какой-то момент времени t^* два соседних зародыша достигают размера $r(t^*) = a$, при котором они касаются; обозначим общую касательную плоскость d . После этого растущий зародыш ограничен еще и плоскостью d . В силу регулярного расположения каждый зародыш имеет четырех соседей и, следовательно, ограничен четырьмя плоскостями (зародыши на краю ограничены плоскостью грани кубической частицы).

Так возникает поставленная задача о характеристиках тела, образованного пересечением полусферы и бесконечного параллелепипеда. Очевидно, если грань кубической частицы разбита на N^2 квадратов, в центре каждого из которых растет зародыш, то площадь поверхности всех зародышей асимптотически стремится к площади грани, поскольку радиус сферы, ограничивающей зародыш, стремится к бесконечности, а кривизна — к нулю. На ранней стадии, когда зародыши малы, их суммарная площадь также мала. Однако по мере развития общая площадь поверхности зародышей превосходит площадь грани. Ука-

¹Описываемая модель зародышей принадлежит проф. И. Е. Габису, СПбГУ.

занная модель позволяет объяснить наблюдающиеся эффекты «ускоренного» разложения гидрида на интервале времени между, условно, началом процесса и его финальной стадией.

Для описания кинетики процесса необходимы объем тела при заданных a и R , а также площади той части поверхности, которая лежит в плоскости квадрата и той, которая лежит на поверхности шара. Площадь боковой поверхности роли не играет (поскольку это граница между двумя слившимися зародышами). Указанные величины выражаются интегралами, которые вычисляются в элементарных функциях, хотя и нетривиально, причем результат достаточно компактен, чтобы поддаваться дальнейшему анализу. Настоящая работа посвящена вычислению этих характеристик и их изучению.

Введем координатную систему так, чтобы оси x и y лежали в плоскости квадрата, ось z была перпендикулярна к ней, а квадрат описывался неравенством $\max(|x|, |y|) \leq a$. Рассмотрим полупространство $z \geq 0$; в силу симметрии достаточно вычислить характеристики лишь «половины» тела. Отметим, что физический смысл имеет именно половина — часть тела, лежащая в указанном полупространстве. Полу-сфера описывается уравнением $x^2 + y^2 + z^2 = R^2$. Круг $x^2 + y^2 \leq R^2$ назовем опорным кругом (а соответствующую окружность — опорной). Фигура, образованная пересечением квадрата и опорного круга, также имеет физический смысл. Назовем ее основанием. Часть поверхности тела, лежащую на сфере, назовем внешней поверхностью (следуя физическому смыслу).

Очевидно, что следует различать три случая: $R \leq a$ (шар целиком помещается в параллелепипеде, так что искомым телом будет сам шар, а основанием — опорный круг), $R \geq a\sqrt{2}$ (квадрат D целиком лежит в опорном круге и является основанием) и $a \leq R \leq a\sqrt{2}$.

В дальнейшем нам понадобятся три неопределенных интеграла из [3], а именно формулы 33.14 (при $a^2 > b^2$), 33.17 и 33.20:

$$\int \frac{dx}{a + b \cos x} = \frac{2}{a^2 - b^2} \operatorname{arctg} \frac{(a - b) \operatorname{tg} \frac{x}{2}}{\sqrt{a^2 - b^2}}; \quad (1)$$

$$\int \frac{dx}{(a + b \cos x)^2} = \frac{b \sin x}{(b^2 - a^2)(a + b \cos x)} - \frac{a}{b^2 - a^2} \int \frac{dx}{a + b \cos x}; \quad (2)$$

$$\int \frac{\cos x dx}{a + b \cos x} = \frac{x}{b} - \frac{a}{b} \int \frac{dx}{a + b \cos x}. \quad (3)$$

Ниже всюду имеет место $a > b > 0$.

§ 2. Объем тела

Объем рассматриваемого тела выражает двойной интеграл

$$V = \int_D z \, dx \, dy.$$

Рассмотрим одну восьмую квадрата D , отсекаемую лучом $y = 0$ и $y = x$, и обозначим ее D_8 . В силу симметрии общая площадь в восемь раз больше площади этой части. Тогда

$$V = 8 \int_{D_8} \sqrt{R^2 - x^2 - y^2} \, dx \, dy.$$

Перейдем в полярные координаты; пусть

$$x = r \cos \varphi, \quad y = r \sin \varphi, \quad dx \, dy = r \, dr \, d\varphi.$$

Тогда

$$\begin{aligned} V &= 8 \int_{D_8} \sqrt{R^2 - r^2} r \, dr \, d\varphi = 8 \int_0^{\frac{\pi}{4}} d\varphi \int_0^{\hat{r}(R, \varphi)} r \sqrt{R^2 - r^2} \, dr = \\ &= \frac{8}{3} \int_0^{\frac{\pi}{4}} \left(R^3 - (R^2 - \hat{r}^2(R, \varphi))^{\frac{3}{2}} \right) d\varphi, \end{aligned}$$

где $\hat{r}(R, \varphi)$ — это граница области в полярных координатах; в общем случае она состоит из части опорной окружности и из части прямой $x = a$ (части стороны квадрата D). Причем если $R \leq a$, то $\hat{r}(R, \varphi) = R$; при $R \geq a\sqrt{2}$ имеем

$$\hat{r}(R, \varphi) = \frac{a}{\cos \varphi};$$

наконец, при $a \leq R \leq a\sqrt{2}$ имеем переключение:

$$\begin{aligned} \hat{r}(R, \varphi) &= \frac{a}{\cos \varphi}, & \text{если} & \quad \varphi \leq \arccos\left(\frac{a}{R}\right); \\ \hat{r}(R, \varphi) &= R, & \text{если} & \quad \varphi \geq \arccos\left(\frac{a}{R}\right). \end{aligned}$$

Случай $R \leq a$ прост: $V = \frac{2}{3}\pi R^3$, что и составляет объем полушария.
Рассмотрим случай $R \geq a\sqrt{2}$:

$$\begin{aligned} V &= \frac{8}{3} \int_0^{\frac{\pi}{4}} \left(R^3 - \left(R^2 - \frac{a^2}{\cos^2 \varphi} \right)^{\frac{3}{2}} \right) d\varphi = \\ &= \frac{2}{3}\pi R^3 - \frac{8}{3} \int_0^{\frac{\pi}{4}} \left(R^2 - \frac{a^2}{\cos^2 \varphi} \right)^{\frac{3}{2}} d\varphi. \quad (4) \end{aligned}$$

Вычислим последний интеграл ($u = \sin \varphi$):

$$\begin{aligned} \int \left(R^2 - \frac{a^2}{\cos^2 \varphi} \right)^{\frac{3}{2}} d\varphi &= \int \frac{(R^2(1-u^2) - a^2)^{\frac{3}{2}}}{(1-u^2)^2} du = \\ &= \int \frac{((R^2 - a^2) - R^2 u^2)^{\frac{3}{2}}}{(1-u^2)^2} du. \end{aligned}$$

Сделаем замену переменной по формулам

$$\begin{aligned} u &= \frac{\sqrt{R^2 - a^2}}{R} \sin \psi, & du &= \frac{\sqrt{R^2 - a^2}}{R} \cos \psi d\psi, \\ \sin \psi &= \frac{Ru}{\sqrt{R^2 - a^2}}, & \cos \psi &= \frac{\sqrt{R^2(1-u^2) - a^2}}{\sqrt{R^2 - a^2}}. \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} \int \left(R^2 - \frac{a^2}{\cos^2 \varphi} \right)^{\frac{3}{2}} d\varphi &= R^3 (R^2 - a^2)^2 \int \frac{\cos^4 \psi d\psi}{(R^2 - (R^2 - a^2) \sin^2 \psi)^2} = \\ &= R^3 (R^2 - a^2)^2 \int \frac{(1 + \cos 2\psi)^2 d\psi}{(2R^2 - (R^2 - a^2)(1 - \cos 2\psi))^2} = \\ &= R^3 (R^2 - a^2)^2 \int \left(\frac{1 + \cos 2\psi}{(R^2 + a^2) + (R^2 - a^2) \cos 2\psi} \right)^2 d\psi = \\ &= R^3 \int \left(\frac{(R^2 - a^2) + (R^2 - a^2) \cos 2\psi}{(R^2 + a^2) + (R^2 - a^2) \cos 2\psi} \right)^2 d\psi. \end{aligned}$$

Дальнейшие преобразования:

$$\begin{aligned} \int \left(R^2 - \frac{a^2}{\cos^2 \varphi} \right)^{\frac{3}{2}} d\varphi &= \\ &= \frac{R^3}{2} \int \left(1 - \frac{2a^2}{(R^2 + a^2) + (R^2 - a^2) \cos 2\psi} \right)^2 d2\psi = \\ &= R^3 \psi - 2a^2 R^3 \int \frac{d2\psi}{(R^2 + a^2) + (R^2 - a^2) \cos 2\psi} + \\ &\quad + 2a^4 R^3 \int \frac{d2\psi}{\left((R^2 + a^2) + (R^2 - a^2) \cos 2\psi \right)^2}. \end{aligned}$$

Воспользуемся формулами (1) и (2) при $a = R^2 + a^2$ и $b = R^2 - a^2$:

$$\begin{aligned} \int \frac{d2\psi}{(R^2 + a^2) + (R^2 - a^2) \cos 2\psi} &= \frac{1}{Ra} \operatorname{arctg} \left(\frac{a}{R} \operatorname{tg} \psi \right), \\ \int \frac{d2\psi}{\left((R^2 + a^2) + (R^2 - a^2) \cos 2\psi \right)^2} &= \frac{R^2 + a^2}{4R^3 a^3} \operatorname{arctg} \left(\frac{a}{R} \operatorname{tg} \psi \right) - \\ &\quad - \frac{(R^2 - a^2) \sin 2\psi}{4R^2 a^2 \left((R^2 + a^2) + (R^2 - a^2) \cos 2\psi \right)}. \end{aligned}$$

Подставляя эти выражения, получаем

$$\begin{aligned} \int \left(R^2 - \frac{a^2}{\cos^2 \varphi} \right)^{\frac{3}{2}} d\varphi &= R^3 \psi - 2aR^2 \operatorname{arctg} \left(\frac{a}{R} \operatorname{tg} \psi \right) + \\ &\quad + \frac{a(R^2 + a^2)}{2} \operatorname{arctg} \left(\frac{a}{R} \operatorname{tg} \psi \right) - \frac{a^2 R (R^2 - a^2) \sin 2\psi}{2 \left((R^2 + a^2) + (R^2 - a^2) \cos 2\psi \right)} = \\ &= R^3 \operatorname{arcsin} \left(\frac{R \sin \varphi}{\sqrt{R^2 - a^2}} \right) + \frac{a(a^2 - 3R^2)}{2} \operatorname{arctg} \left(\frac{a \sin \varphi}{\sqrt{R^2 \cos^2 \varphi - a^2}} \right) - \\ &\quad - \frac{a^2 \sin \varphi \sqrt{R^2 \cos^2 \varphi - a^2}}{2 \cos^2 \varphi}. \quad (5) \end{aligned}$$

Теперь возвращаемся к (4) — вычислению V :

$$V = \frac{2}{3}\pi R^3 - \frac{8}{3} \int_0^{\frac{\pi}{4}} \left(R^2 - \frac{a^2}{\cos^2 \varphi} \right)^{\frac{3}{2}} d\varphi = \frac{2}{3}\pi R^3 + \frac{4}{3}a^2 \sqrt{R^2 - 2a^2} - \frac{8R^3}{3} \arcsin \left(\frac{R}{\sqrt{2} \cdot \sqrt{R^2 - a^2}} \right) - \frac{4}{3}a(a^2 - 3R^2) \operatorname{arctg} \left(\frac{a}{\sqrt{R^2 - 2a^2}} \right).$$

Рассмотрим промежуточный случай $a \leq R \leq a\sqrt{2}$. При этом с учетом (5)

$$V = \frac{2}{3}\pi R^3 - \frac{8}{3} \int_0^{\arccos(\frac{a}{R})} \left(R^2 - \frac{a^2}{\cos^2 \varphi} \right)^{\frac{3}{2}} d\varphi = -\frac{2}{3}\pi R^3 + \frac{2a(3R^2 - a^2)}{3}\pi = \frac{2\pi}{3} (3aR^2 - a^3 - R^3).$$

Выпишем формулы для случаев $R \leq a$, $a \leq R \leq a\sqrt{2}$ и $R \geq a\sqrt{2}$:

$$V = \frac{2}{3}\pi R^3; \quad (6)$$

$$V = \frac{2\pi}{3} (3aR^2 - a^3 - R^3); \quad (7)$$

$$V = \frac{2}{3}\pi R^3 - \frac{8R^3}{3} \arcsin \left(\frac{R}{\sqrt{2} \cdot \sqrt{R^2 - a^2}} \right) + \frac{4}{3}a(3R^2 - a^2) \operatorname{arctg} \left(\frac{a}{\sqrt{R^2 - 2a^2}} \right) + \frac{4}{3}a^2 \sqrt{R^2 - 2a^2}. \quad (8)$$

Легко проверить, что формула (7) переходит в (6) при $R = a$ и в (8) при $R = a\sqrt{2}$, а производная V по R непрерывна.

Представляет интерес асимптотическое поведение вычисленной величины при больших R . Интуитивно ясно, что объем тела должен приближаться к объему параллелепипеда с квадратным основанием. Вычислим предел выражения $V/(Ra^2)$ при $R \rightarrow \infty$; для этого разложим слагаемое с \arcsin с точностью до бесконечно малых первого

порядка (бесконечно малые более высокого порядка обозначим o):

$$\begin{aligned} \frac{8R^3}{3} \arcsin\left(\frac{R}{\sqrt{2} \cdot \sqrt{R^2 - a^2}}\right) &= \\ &= \frac{8R^3}{3} \arcsin\left(\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{R - \sqrt{R^2 - a^2}}{\sqrt{2} \cdot \sqrt{R^2 - a^2}}\right) = \\ &= \frac{8R^3}{3} \arcsin\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) + \frac{8R^3}{3\sqrt{1-0.5}} \cdot \frac{R - \sqrt{R^2 - a^2}}{\sqrt{2} \cdot \sqrt{R^2 - a^2}} + o = \\ &= \frac{2\pi R^3}{3} + \frac{8R^3}{6} \cdot \frac{a^2}{\sqrt{R^2 - a^2} \cdot (R + \sqrt{R^2 - a^2})} + o = \\ &= \frac{2\pi R^3}{3} + \frac{4R^3 a^2}{3\sqrt{R^2 - a^2} \cdot (R + \sqrt{R^2 - a^2})} + o = \frac{2\pi R^3}{3} + \frac{4a^2 R}{3} + o. \end{aligned}$$

С учетом этого:

$$\frac{V}{Ra^2} \sim \frac{2\pi R^2}{3a^2} - \frac{2\pi R^2}{3a^2} - \frac{4}{3} - \frac{4}{3} \frac{a^2 - 3R^2}{R\sqrt{R^2 - 2a^2}} + \frac{4}{3R} \sqrt{R^2 - 2a^2} \rightarrow 4,$$

что соответствует объему прямоугольного параллелепипеда с двумя ребрами длины $2a$ и одним — длины R .

На рис. 1 приведен график зависимости $V(R)/R$ при $a = 1$ (радиус выражен в единицах a). Из рисунка можно сделать вывод, что предел практически достигается при $R = 10a$.

§ 3. Площадь внешней поверхности

Вычислим площадь внешней поверхности тела — той части поверхности, которая лежит на сфере радиуса R . Касательные векторы к сфере — производные радиус-вектора (x, y, z) по параметрам:

$$\tau_x = \left(1, 0, -\frac{x}{z}\right), \quad \tau_y = \left(0, 1, -\frac{y}{z}\right).$$

Их векторное произведение есть

$$\tau_x \times \tau_y = \left(\frac{x}{z}, \frac{y}{z}, 1\right) = \frac{1}{z}(x, y, z).$$

Его модуль (а это площадь параллелограмма, построенного на векторах) равен

$$|\tau_x \times \tau_y| = \frac{R}{z}.$$

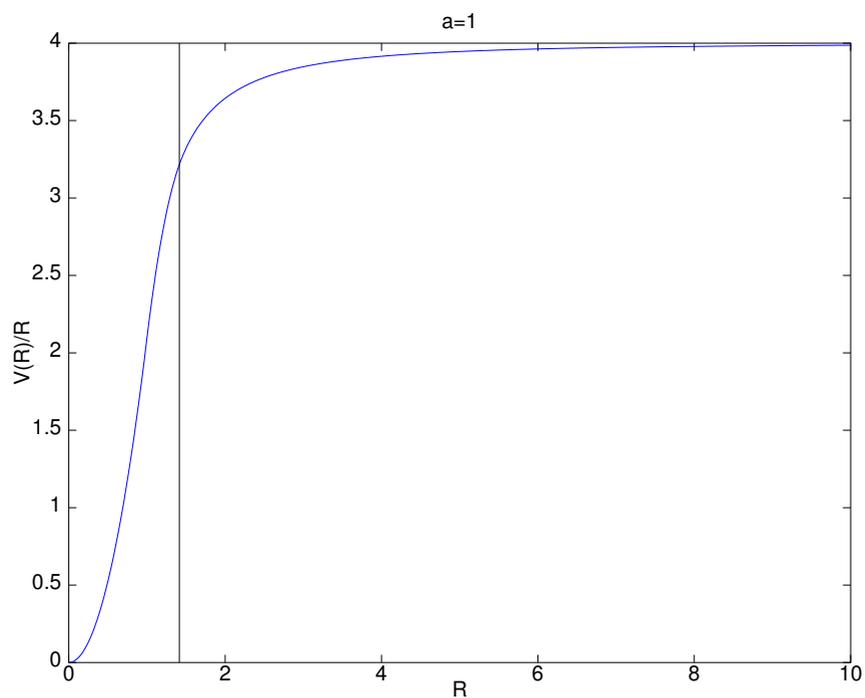


Рис. 1.

Дифференциал площади

$$dS = \frac{R dx dy}{z}$$

Искомая площадь S — это поверхностный интеграл

$$S = \int_S dS = \int_D \frac{R}{z} dx dy.$$

Рассмотрим одну восьмую квадрата D_8 , отсекаемую лучом $y = 0$ и $y = x$. В силу симметрии общая площадь в восемь раз больше площади этой части. Тогда

$$S = 8R \int_{D_8} \frac{dx dy}{\sqrt{R^2 - x^2 - y^2}}.$$

Перейдем в полярные координаты по формулам $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$, $dx dy = r dr d\varphi$:

$$S = 8R \int_{D_8} \frac{r dr d\varphi}{\sqrt{R^2 - r^2}} = 8R \int_0^{\frac{\pi}{4}} d\varphi \int_0^{\hat{r}(R, \varphi)} \frac{r dr}{\sqrt{R^2 - r^2}},$$

где $\hat{r}(R, \varphi)$ — это граница области в полярных координатах (она описана на стр. 42). Случай $R \leq a$ прост: $S = 2\pi R^2$, что и составляет площадь полной полусферы. Рассмотрим случай $R \geq a\sqrt{2}$:

$$S = 8R \int_0^{\frac{\pi}{4}} \left(R - \sqrt{R^2 - \hat{r}^2} \right) d\varphi = 8R \int_0^{\frac{\pi}{4}} \left(R - \sqrt{R^2 - \frac{a^2}{\cos^2 \varphi}} \right) d\varphi. \quad (9)$$

Вычислим последний интеграл:

$$\begin{aligned} I &= \int \left(R - \sqrt{R^2 - \frac{a^2}{\cos^2 \varphi}} \right) d\varphi = \int \frac{a^2 \cos^{-2} \varphi}{R + \sqrt{R^2 - a^2 \cos^{-2} \varphi}} d\varphi = \\ &= \int \frac{a^2 d \operatorname{tg} \varphi}{R + \sqrt{R^2 - a^2(1 + \operatorname{tg}^2 \varphi)}} = \int \frac{a^2 d \operatorname{tg} \varphi}{R + \sqrt{(R^2 - a^2) - a^2 \operatorname{tg}^2 \varphi}}. \end{aligned}$$

Сделаем замену переменной по формулам

$$\frac{\sqrt{R^2 - a^2}}{a} \sin \psi = \operatorname{tg} \varphi, \quad \frac{\sqrt{R^2 - a^2}}{a} \cos \psi d\psi = d \operatorname{tg} \varphi;$$

тогда

$$I = a\sqrt{R^2 - a^2} \int \frac{\cos \psi d\psi}{R + \sqrt{(R^2 - a^2) \cos \psi}}.$$

Воспользуемся формулой (3) и затем (1) при $a = R$ и $b = \sqrt{R^2 - a^2}$:

$$\begin{aligned} I &= a\psi - aR \int \frac{d\psi}{R + \sqrt{(R^2 - a^2) \cos \psi}} = \\ &= a\psi - 2R \operatorname{arctg} \left(\frac{\left(R - \sqrt{R^2 - a^2} \right) \operatorname{tg}(\psi/2)}{a} \right). \end{aligned}$$

С учетом формулы $\operatorname{tg}(0.5x) = \sin(x)(1 + \cos(x))^{-1}$ имеем окончательно

$$I = a\psi - 2R \operatorname{arctg} \left(\frac{(R - \sqrt{R^2 - a^2}) \sin \psi}{a(1 + \cos \psi)} \right).$$

Теперь возвращаемся к (9). Если $\varphi = 0$, то $\psi = 0$, а если $\varphi = \pi/4$, то

$$\sin \psi = \frac{a}{\sqrt{R^2 - a^2}}, \quad \cos \psi = \frac{\sqrt{R^2 - 2a^2}}{\sqrt{R^2 - a^2}}.$$

Поэтому

$$S = 8Ra \arcsin \left(\frac{a}{\sqrt{R^2 - a^2}} \right) - 16R^2 \operatorname{arctg} \left(\frac{R - \sqrt{R^2 - a^2}}{\sqrt{R^2 - a^2} + \sqrt{R^2 - 2a^2}} \right).$$

Рассмотрим промежуточный случай $a \leq R \leq a\sqrt{2}$. При этом

$$S = 8R \int_0^{\arccos(\frac{a}{R})} \left(R - \sqrt{R^2 - \hat{r}^2(R, \varphi)} \right) d\varphi + 8R \int_{\arccos(\frac{a}{R})}^{\frac{\pi}{4}} R d\varphi.$$

Если $\varphi = \arccos(\frac{a}{R})$, то $\sin \psi = 1$ и $\psi = \pi/2$. Окончательно

$$S = 2\pi R^2 - 8R^2 \arccos \left(\frac{a}{R} \right) + 4\pi Ra - 16R^2 \operatorname{arctg} \left(\frac{R - \sqrt{R^2 - a^2}}{a} \right).$$

Эту формулу можно упростить. В самом деле, сделаем замену переменной $a = R \sin \xi$ и воспользуемся формулами

$$\arccos x = \frac{\pi}{2} - \arcsin x, \quad \operatorname{tg} \frac{x}{2} = \frac{1 - \cos x}{\sin x};$$

получаем, что

$$S = 2\pi R^2 - 8R^2 \left(\frac{\pi}{2} - \xi \right) + 4\pi R^2 \sin \xi - 8R^2 \xi = 2\pi R(2a - R).$$

Выпишем формулы для случаев $R \leq a$, $a \leq R \leq a\sqrt{2}$, $R \geq a\sqrt{2}$:

$$S = 2\pi R^2; \quad (10)$$

$$S = 2\pi R(2a - R); \quad (11)$$

$$S = 8Ra \arcsin\left(\frac{a}{\sqrt{R^2 - a^2}}\right) - 16R^2 \operatorname{arctg}\left(\frac{R - \sqrt{R^2 - a^2}}{\sqrt{R^2 - a^2} + \sqrt{R^2 - 2a^2}}\right). \quad (12)$$

Легко проверить, что формула (11) переходит в (10) при $R = a$ и в (12) при $R = a\sqrt{2}$.

Изучим асимптотическое поведение величины $S(R)$ при больших R (по сравнению с a), пользуясь формулами $\arcsin x \sim x$, $\operatorname{arctg} x \sim x$ при $x \rightarrow 0$, получим

$$S \sim \frac{8Ra^2}{\sqrt{R^2 - a^2}} - 16R^2 \left(\frac{R - \sqrt{R^2 - a^2}}{\sqrt{R^2 - a^2} + \sqrt{R^2 - 2a^2}} \right)$$

с учетом того, что $R - \sqrt{R^2 - a^2} \rightarrow 0$ при $R \rightarrow \infty$.

Первая дробь стремится к $8a^2$; рассмотрим вторую:

$$\frac{16R^2(R - \sqrt{R^2 - a^2})}{\sqrt{R^2 - a^2} + \sqrt{R^2 - 2a^2}} = \frac{16R^2a^2}{(\sqrt{R^2 - a^2} + \sqrt{R^2 - 2a^2})(R + \sqrt{R^2 - a^2})}.$$

Это выражение стремится к $16a^2/4 = 4a^2$. Окончательно имеем

$$S \rightarrow 8a^2 - 4a^2 = 4a^2,$$

что в точности совпадает с площадью квадрата со стороной $2a$; это согласуется с интуитивным ожиданием (маленький участок поверхности сферы большого радиуса неотличим от плоского), а сложный характер предела указывает на нетривиальное поведение величины.

Производная $S'(R)$ терпит разрыв в точке $R = a$. В самом деле, дифференцируя (11), получаем

$$S'(R) = 4\pi(a - R).$$

Таким образом, $S'(a) = 0$ (предел справа), тогда как производная (10) в точке $R = a$ есть $4\pi a > 0$. Также $S'(R) < 0$ при $R > a$, то есть рост площади сменяется ее убыванием.

На рис. 2 приведен график зависимости $1.01S(R)$ при $a = 1$ (радиус выражен в единицах a). Из рисунка видно, что производная действительно терпит разрыв в точке $R = a$, что в точке $R = a\sqrt{2}$ она непрерывна (это проверяется непосредственно) и что при $R > a$ имеет место монотонное убывание, откуда следует максимум площади в точке $R = a$, то есть при касании опорным кругом сторон квадрата. Этот максимум равен $S_{\max} = S(1) = 2\pi a^2$, то есть ≈ 6.28 при $a = 1$. Превышение предельной площади $4a^2$, таким образом, составляет $50(\pi - 2)\% \approx 57\%$. Еще из рисунка видно, что предел практически достигается при $R = 10a$.

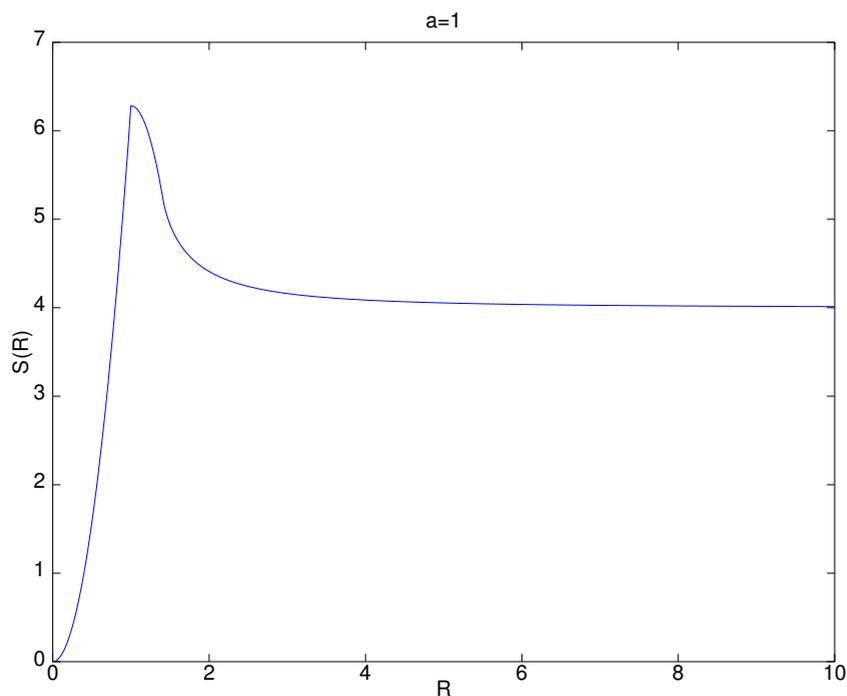


Рис. 2.

§ 4. Производная объема

Рассмотрим некоторое семейство геометрических пространствен-

ных тел, зависящих от параметра p . Зависимость предполагается гладкой в том смысле, что площадь поверхности $s(p)$ (или площадь части поверхности) и объем тела $v(p)$ непрерывно зависят от параметра, причем производные кусочно-непрерывны.

В ряде случаев имеет место равенство $v'(p) = s(p)$. Это так, например, для семейства шаров, если p — радиус. Существуют наводящие соображения в пользу этой гипотезы. В самом деле, приращению dp отвечает некоторый тонкий слой, который с точностью до бесконечно малых изометричен цилиндру, основание которого имеет площадь $s(p)$, а высота равна dp . Для куба со стороной p , например, соотношение не имеет места, но верно в случае, если $s(p)$ — половина площади (площадь трех граней). В работе [4] рассмотрен класс тел, для которых гипотеза верна и доказана. Изучаемый в настоящей работе случай попадает в этот класс. В качестве параметра p выступает радиус R , а площадь $s(p)$ — это площадь внешней поверхности, обозначенная выше $S(R)$. Приращение объема, отвечающее приращению радиуса dR , с точностью до бесконечно малых равно $S(R)dR$.

Вычислим производную $V'(R) = dV/dR$. Для (6) и (7) она совпадает с $S(R)$ (см. (10) и (11)). Вычислим производную от (8):

$$V' = 2\pi R^2 - 8R^2 \arcsin\left(\frac{R}{\sqrt{2}\sqrt{R^2 - a^2}}\right) + 8aR \operatorname{arctg}\left(\frac{a}{\sqrt{R^2 - 2a^2}}\right).$$

Равенство последнего выражения и (12) неочевидно, но оно имеет место, что численно иллюстрирует рис. 3, на котором приведены графики $1.01S(R)$ и $V'(R)$.

§ 5. Площадь основания

Вычислим площадь \hat{S} основания — то есть фигуры, образованной пересечением квадрата и опорного круга. При $R \leq a$ это круг и $\hat{S}(R) = \pi R^2$, а при $R \geq a\sqrt{2}$ это квадрат и $\hat{S} = 4a^2$. При $a \leq R \leq a\sqrt{2}$

$$\hat{S}(R) = \int_D dx dy = 8 \int_{D_8} dx dy.$$

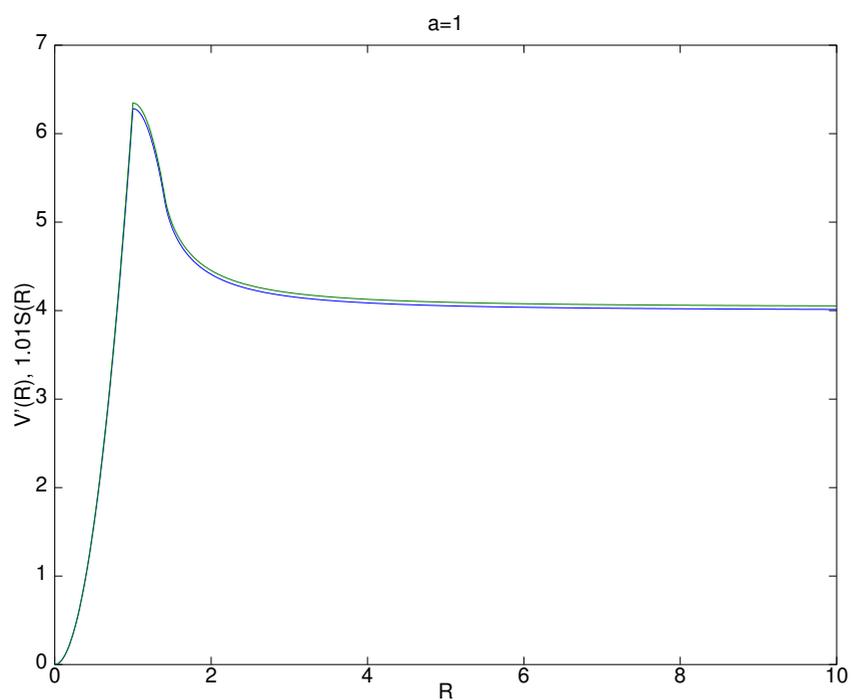


Рис. 3.

В полярных координатах $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$, $dx dy = r dr d\varphi$:

$$\begin{aligned} \hat{S}(R) &= 8 \int_{D_8} r dr d\varphi = 8 \int_0^{\frac{\pi}{4}} d\varphi \int_0^{\hat{r}(R,\varphi)} r dr = 4 \int_0^{\frac{\pi}{4}} \hat{r}^2(R, \varphi) d\varphi = \\ &= 4 \int_0^{\arccos(\frac{a}{R})} \frac{a^2}{\cos^2 \varphi} d\varphi + 4 \int_{\arccos(\frac{a}{R})}^{\frac{\pi}{4}} R^2 d\varphi = 4R^2 \left(\frac{\pi}{4} - \arccos\left(\frac{a}{R}\right) \right) + \\ &+ 4a^2 \operatorname{tg} \arccos\left(\frac{a}{R}\right) = 4R^2 \left(\frac{\pi}{4} - \arccos\left(\frac{a}{R}\right) \right) + 4a\sqrt{R^2 - a^2}. \end{aligned}$$

Запишем формулы компактно для $R \leq a$, $a \leq R \leq a\sqrt{2}$, $R \geq a\sqrt{2}$:

$$\hat{S}(R) = \pi R^2; \quad (13)$$

$$\hat{S}(R) = \pi R^2 + 4a\sqrt{R^2 - a^2} - 4R^2 \arccos\left(\frac{a}{R}\right); \quad (14)$$

$$\hat{S}(R) = 4a^2. \quad (15)$$

Очевидно, (14) переходит в (13) и (15) при $R = a$ и $R = a\sqrt{2}$ соответственно, причем производная $\hat{S}'(R)$ также непрерывна. На рис. 4 приведен график $\hat{S}(R)$ при $a = 1$.

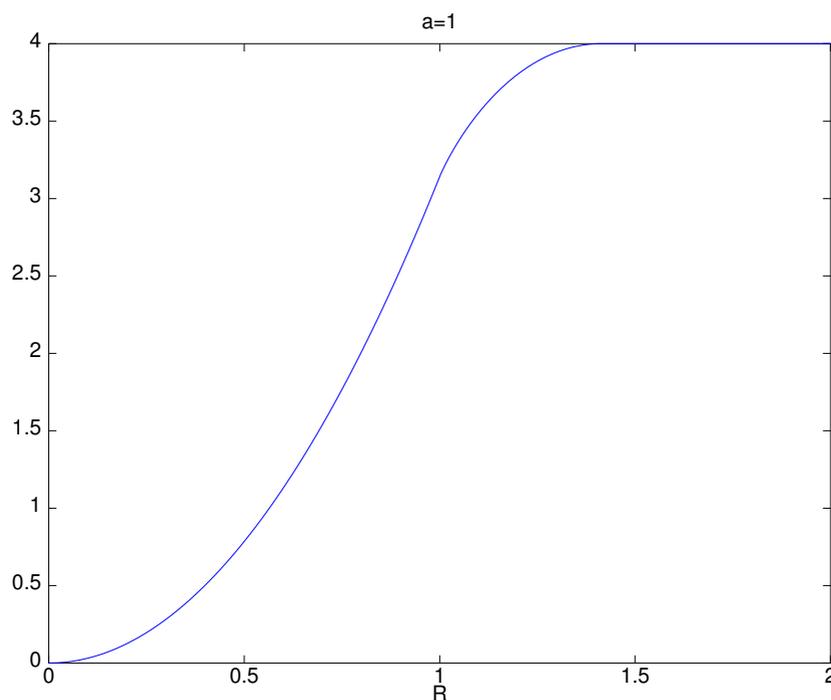


Рис. 4.

§ 6. Пример модели

Пусть на поверхности кубической частицы порошка гидроида металла имеются зародыши фазы металла с растворенным в нем водоро-

дом (растущие в ходе реакции разложения гидрида). Концентрация водорода в зародышах постоянна и равна \bar{c} . Плотности потоков десорбции с поверхности металла и гидрида тоже постоянны, обозначим их J_m и J_h . Число зародышей N на поверхности частицы известно, причем предполагаем, что зародыши развиваются во всех периодах решетки, то есть расположены регулярно — расстояние между центрами соседних зародышей равно $2a$ — и потенциально накрывают всю поверхность частицы: при $R \geq a\sqrt{2}$ общая площадь оснований $N\hat{S}$ равна площади частицы \mathbf{S} , откуда следует $\mathbf{S} = 4Na^2$.

Тогда в произвольный момент времени имеем для каждого зародыша $R = R(t)$, $S = S(R)$, $V = V(R)$. В зародышах в каждый момент времени содержится $N\bar{c}V(R)$ водорода, а поток десорбции с поверхности зародышей, очевидно, равен $NJ_mS(R)$.

Площадь поверхности гидрида $S_h = 4Na^2 - N\hat{S}(R)$, а поток водорода с нее равен J_hS_h . Из закона сохранения следует

$$N(c_h - c_m)V'(R)dR = (NJ_mS(R) + J_hS_h)dt.$$

Окончательно уравнение запишем так (с учетом $V' = S$):

$$(c_h - c_m)\frac{dR}{dt} = J_m + J_h\frac{4a^2 - \hat{S}(R)}{V'(R)}.$$

Отметим, что функция $R(t)$ при $R \geq a\sqrt{2}$ (то есть после исчезновения поверхности гидрида) является линейной функцией времени. При $R < a\sqrt{2}$ имеется десорбция с гидрида (второе слагаемое), нелинейно зависящая от R , причем, как нетрудно убедиться, зависимость вогнутая. Это вполне соответствует физическому смыслу. Несколько неожиданно зависимости $S(R)$ и $V(R)$ не требуются для вычислений, если имеет место $S(R) \equiv V'(R)$. Начальные данные следует задавать $R(0) = R_0 > 0$ во избежание сингулярности. На практике это приемлемо, поскольку зародыш не может быть произвольно мал и возникает, как правило, конечных размеров — таких, чтобы выигрыш объемной энергии при фазовом переходе компенсировал проигрыш поверхностной энергии на новой границе контакта двух фаз. Тем не менее, уравнение может быть, теоретически, записано для величины V , поскольку функция $V(R)$ строго возрастает, определена для всех $R \geq 0$ и принимает все (и только за исключением $R = 0$) положительные значения, то есть обратима при $R \geq 0$. Обратная функция $R(V)$ (хотя ее и затруднительно получить в виде явной формулы) существует,

принимает только неотрицательные значения, а следовательно:

$$(c_h - c_m) \frac{dV}{dt} = J_m S(R(V)) + J_h \cdot (4a^2 - \hat{S}(R(V))).$$

В такой записи уравнение имеет решение $V(t)$ при $V(0) = 0$ (теорема Пеано), которое определяет зависимость $R(t)$, удовлетворяющую исходному уравнению, но не имеющую производной в точке $t = 0$ (касательная вертикальна). Подобные «устранимые» сингулярности типичны для моделей, основанных на законах сохранения, поскольку удобной переменной является, как правило, величина, имеющая размерность длины, а в балансовых соотношениях фигурируют объемы и площади поверхностей, имеющие размерности в форме степеней длины. Так, если объем $\ell^3(t)$ куба имеет постоянную производную по времени, то ребро куба $\ell(t)$ не дифференцируемо при $t = 0$.

§ 7. Обобщение задачи

Исследуемое в работе тело соответствует модели зародыша на плоской кристаллографической грани. Представляют интерес также модели зародышей на искривленных поверхностях. Простейшим случаем является шар некоторого радиуса ρ . Квадратом на его поверхности назовем фигуру, состоящую из четырех точек, соединенных дугами больших кругов (геодезическими) равной длины $2a$, причем геодезические пересекаются под равными углами. Центр квадрата равноудален от вершин. Рассмотрим коническое тело, образованное всеми радиусами шара с концами в пределах построенного квадрата, а также тело, полученное пересечением этого конуса с шаром с центром в центре квадрата и радиусом R . Эта задача будет предметом отдельной работы. Возможны и дальнейшие обобщения задачи на случаи тел в римановых трехмерных пространствах.

Работа поддержана грантом Санкт-Петербургского государственного университета № 11.38.68.2012.

Автор выражает благодарность проф. И. Е. Габису (СПбГУ) за постановку исходной задачи.

Список литературы

- [1] *Gabis I., Dobrotvorskiy M., Evard E., Voyt. A.* Kinetics of dehydrogenation of MgH_2 and AlH_3 // *Journal of Alloys and Compounds*. 2011. V. 509S. P. 671–674.

- [2] *Gabis I. E., Voyt A. P., Chernov I. A., Kuznetsov V. G., Baraban A. P., Elets D. I., Dobrotvorsky M. A.* Ultraviolet activation of thermal decomposition of α -alane // International Journal of Hydrogen Energy. 2012. V. 37. is. 19. P. 13895–14982.
- [3] *Смолянский М. Л.* Таблицы неопределенных интегралов. М., 1963.
- [4] *Маничева С. В., Чернов И. А.* Математическая модель гидридного фазового перехода в частице порошка симметричной формы // Компьютерные исследования и моделирование. 2012. Т. 4. № 3. С. 569–584.

Институт прикладных математических исследований
Карельского Научного Центра РАН
185000, Петрозаводск, ул. Пушкинская, 11.
E-mail: iachernov@yandex.ru