

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

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

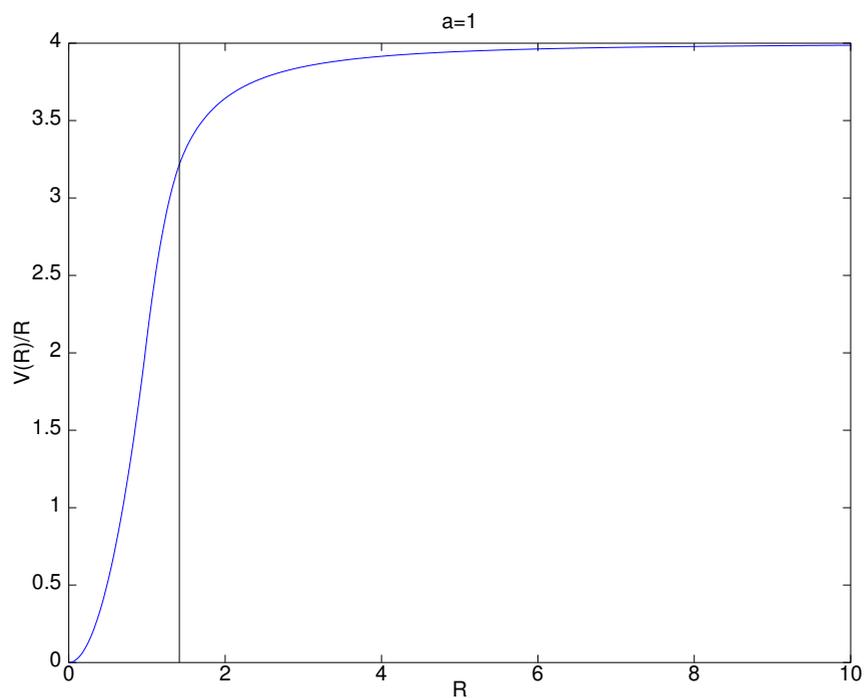


Рис. 1.

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 $R = 10a$.

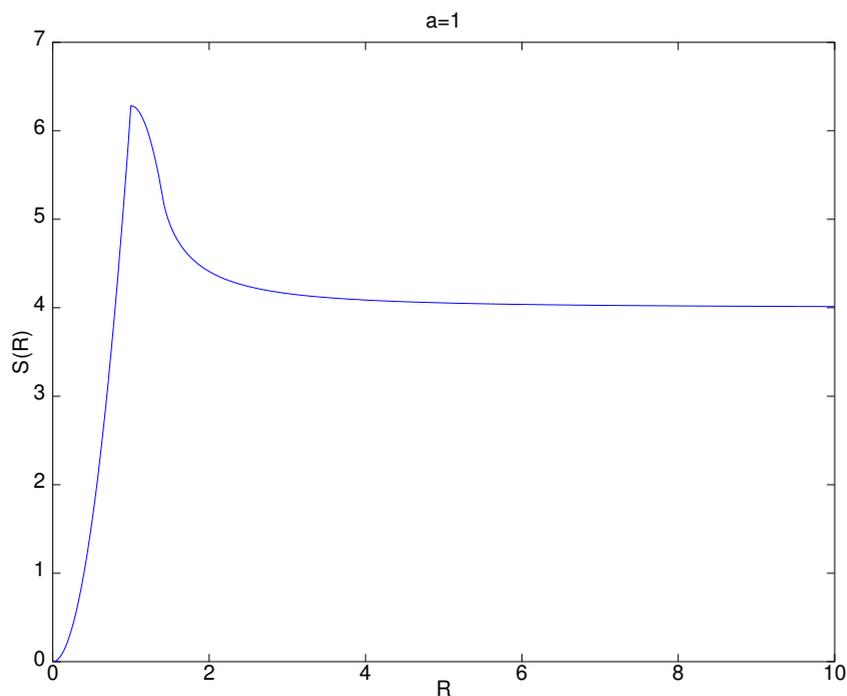


Рис. 2.

§ 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 $a \leq R \leq a\sqrt{2}$

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

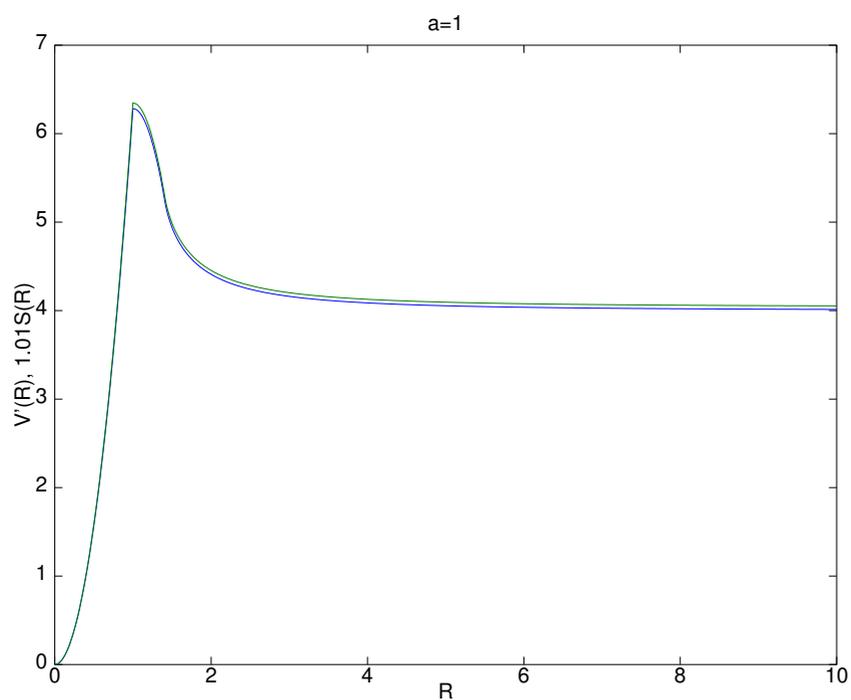


Рис. 3.

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 $a = 1$.

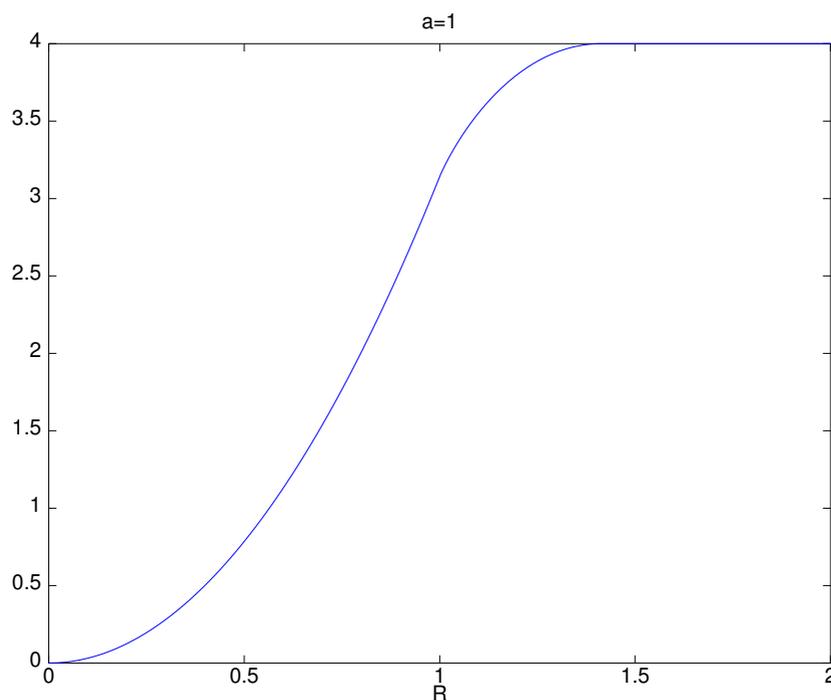


Рис. 4.

§ 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