



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV MATEMATIKY

INSTITUTE OF MATHEMATICS

DIFERENCIÁLNÍ ROVNICE V MODELECH POHYBU DISLOKACÍ

DIFFERENTIAL EQUATIONS IN MODELS OF MOTION OF DISLOCATIONS

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

JANA VYDROVÁ

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

doc. Ing. JIŘÍ ŠREMR, Ph.D.

BRNO 2019

Zadání bakalářské práce

Ústav:	Ústav matematiky
Studentka:	Jana Vydrová
Studijní program:	Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor:	Matematické inženýrství
Vedoucí práce:	doc. Ing. Jiří Šremr, Ph.D.
Akademický rok:	2018/19

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma bakalářské práce:

Diferenciální rovnice v modelech pohybu dislokací

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Jedním z mechanismů plastické deformace tzv. bcc kovů je teplotně aktivovaný pohyb šroubových dislokací. Použití Beltramiho identity v termodynamickém popisu dislokačního skluzu vede na obyčejnou diferenciální rovnici 1. řádu, jejíž homoklinické řešení určuje aktivační entalpii pro pohyb těchto dislokací při daném aplikovaném napětí. Získaná diferenciální rovnice je natolik "jednoduchá", že lze provést úplnou kvalitativní analýzu a její řešení lze analyticky zapsat.

Cíle bakalářské práce:

Teoretická část:

Seznámení se základy termodynamického popisu dislokačního skluzu v bcc kovech.

Doplnění znalostí z kvalitativní teorie diferenciálních rovnic, zejména otázek existence a jednoznačnosti řešení počáteční úlohy a prodloužitelnosti řešení.

Praktická část:

Aplikace Beltramiho identity v termodynamickém popisu dislokačního skluzu, odvození diferenciální rovnice pro aktivovaný tvar dislokace.

Kvalitativní analýza získané diferenciální rovnice a interpretace jejích řešení.

Seznam doporučené literatury:

DORN, J. E., RAJNAK, S. Nucleation of kink pairs and the Peierls' mechanism of plastic deformation, Trans. AIME (1964), 230, 1052-1064.

HARTMAN, P. Ordinary differential equations, John Wiley & Sons, New York - London - Sydney, 1964.

KALAS, J., RÁB, M. Obyčejné diferenciální rovnice, Masarykova univerzita, Brno, 1995, ISBN 80-21-1130-0.

Termín odevzdání bakalářské práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2018/19

V Brně, dne

L. S.

prof. RNDr. Josef Šlapal, CSc.
ředitel ústavu

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.
děkan fakulty

Abstrakt

Tato práce se zabývá diferenciální rovnicí, která se objevuje v matematickém modelu teplotně aktivovaného pohybu dislokací. Zaměřuje se na šroubové dislokace v kubicky prostorově středěných mřížkách. Řeší především odvození příslušné diferenciální rovnice a následně zkoumá vlastnosti jejích řešení. K vyšetřování těchto vlastností se využívají poznatky a techniky kvalitativní teorie diferenciálních rovnic.

Summary

This thesis deals with the differential equation which appears in the mathematical model by thermally activated motion of dislocations. It's focused on screw dislocations in body-centred cubic metals. Especially solves derivation of the pertinent differential equation and then explores properties of their solutions. To research these properties are used knowledges and techniques of qualitative theory of differential equations.

Klíčová slova

Diferenciální rovnice, dislokace, okrajová úloha.

Keywords

Differential equation, dislocation, boundary value problem.

VYDROVÁ, J. *Diferenciální rovnice v modelech pohybu dislokací*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2019. 34 s. Vedoucí doc. Ing. Jiří Šremr, Ph.D.

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci *Diferenciální rovnice v modelech pohybu dislokací* vypracovala samostatně pod vedením doc. Ing. Jiřího Šremra, Ph.D. a s užitím zdrojů uvedených v seznamu literatury.

Jana Vydrová

Ráda bych poděkovala svému vedoucímu doc. Ing. Jiřímu Šremrovi, Ph.D. za vedení, konzultace a pomoc při tvorbě této práce. Děkuji také doc. Ing. Romanu Grögrovi, Ph.D. et Ph.D. z Ústavu fyziky materiálů AV ČR za uvedení do problematiky modelování pohybu dislokací a za vysvětlení odvození matematického modelu.

Jana Vydrová

Obsah

Úvod	12
1 Teoretický základ	13
2 Odvození rovnice	16
3 Analýza okrajové úlohy pro aktivovaný tvar dislokace	19
Závěr	33
Literatura	34

Úvod

K popisu mnoha procesů v technických vědách se využívá diferenciálních rovnic. Jinak tomu není ani v případě popisu pohybu dislokací. Ke studiu diferenciálních rovnic lze použít různé metody. V případě, kdy se z dané rovnice získává přímo funkční předpis řešení, mluvíme o analytické metodě. Tu lze bohužel využít pouze u některých jednoduchých typů rovnic. Pokud tuto metodu nelze použít, přichází v úvahu například numerické řešení. Tato metoda je založena na získávání pouze přibližných hodnot řešení rovnic v určitých bodech. Další možností, a zde použitou metodou, je kvalitativní analýza diferenciální rovnice. Tato metoda se zaměřuje na vyšetřování určitých vlastností řešení, aniž by byl znám jejich přesný funkční předpis.

Práce je členěna do tří částí. První část je zaměřena na stručný teoretický základ, kde je uveden základní aparát potřebný k řešení naší úlohy, jako jsou existenční věty, věty o prodloužitelnosti řešení a podobně.

V druhé části se nachází seznámení s problematikou šíření dislokací. Krátce jsou zmíněny příčiny vzniku dislokace a jaké faktory ovlivňují její pohyb. Následně je odvozen vztah pro aktivační entalpii z termodynamického popisu dislokačního skluzu. Minimalizací tohoto funkcionálu se získá hledaný aktivovaný tvar dislokace. Využití Beltramiho identity na lagrangeán aktivační entalpie vede na okrajovou úlohu pro obyčejnou diferenciální rovnici 1. řádu.

Poslední, třetí část, se zabývá již zmíněnou kvalitativní analýzou získané diferenciální rovnice. Pomocí matematického aparátu popsaného v první části se vyšetřuje otázka existence řešení dané okrajové úlohy, jeho jednoznačnost/nejednoznačnost a v neposlední řadě jeho kvalitativní vlastnosti. Na závěr je pro získaný aktivovaný tvar dislokace nalezena hodnota aktivační entalpie v závislosti na aplikovaném zatížení, která hraje důležitou roli v teorii plasticity.

1. Teoretický základ

Definice 1.1. Necht $G \subseteq \mathbb{R}^2$ je neprázdná množina a $F : G \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je spojitá funkce. Pak

$$F(x, y, y') = 0 \quad (1.1)$$

nazýváme obyčejnou diferenciální rovnicí 1. řádu.

Definice 1.2. Řešením rovnice (1.1) na intervalu $I \subseteq \mathbb{R}$ nazýváme takovou funkci $y : I \rightarrow \mathbb{R}$, která je spojitě diferencovatelná na intervalu I a platí

$$\begin{aligned} [x, y(x)] &\in G \quad \text{pro každé } x \in I, \\ F(x, y(x), y'(x)) &= 0 \quad \text{pro každé } x \in I. \end{aligned}$$

Poznámka 1.3. Speciálním případem rovnice (1.1) je diferenciální rovnice 1. řádu v takzvaném normálním tvaru

$$y' = f(x, y), \quad (1.2)$$

kde $f : G \rightarrow \mathbb{R}$ je spojitá funkce.

Definice 1.4. Bud $[x_0, y_0]$ libovolný bod v G . Úloha určit řešení rovnice (1.2), které splňuje počáteční podmínku

$$y(x_0) = y_0, \quad (1.3)$$

se nazývá počáteční úloha (počáteční problém).

Pomocí následujících dvou vět lze vyšetřovat existenci a jednoznačnost počáteční úlohy (1.2), (1.3).

Věta 1.5 (Peanova věta, [2, Věta 1.1]). Necht funkce f definovaná na otevřené množině $G \subseteq \mathbb{R}^2$ je spojitá na okolí bodu $[x_0, y_0] \in G$. Potom existuje $\delta > 0$ taková, že počáteční úloha (1.2), (1.3) má řešení y na intervalu $(x_0 - \delta, x_0 + \delta)$.

Druhá věta je silnější a zaručuje navíc i jednoznačnost řešení. Budeme potřebovat následující pojem.

Definice 1.6. Necht $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ je neprázdná množina. Řekneme, že funkce $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ je Lipschitzovská v druhé proměnné na Ω , jestliže existuje konstanta $L > 0$ taková, že

$$|f(x, y_2) - f(x, y_1)| \leq L|y_2 - y_1| \quad \text{pro každé } [x, y_1], [x, y_2] \in \Omega.$$

Věta 1.7 (Picardova věta, [2, Věta 1.2]). Necht funkce f definovaná na otevřené množině $G \subseteq \mathbb{R}^2$ je spojitá a navíc Lipschitzovská v druhé proměnné na nějakém okolí bodu $[x_0, y_0] \in G$.

Potom existuje okolí I bodu x_0 , na kterém existuje právě jedno řešení počáteční úlohy (1.2), (1.3).

Důkazy obou vět spočívají v konstrukci posloupnosti přibližných řešení. Dále se dokáže její konvergence a skutečnost, že její limita je řešením zkoumané úlohy. Podrobné důkazy jsou uvedené v [4].

Poznámka 1.8 ([4, kapitola IV, Poznámka 2.3(iii)]). Užitím věty o střední hodnotě lze dokázat následující tvrzení: Funkce $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, kde $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ je otevřená konvexní množina, je lipschitzovská v druhé proměnné na Ω , jestliže existuje konstanta $M > 0$ tak, že platí

$$\left| \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \right| \leq M \quad \text{pro každé } [x, y] \in \Omega.$$

Definice 1.9 ([4, kapitola IV, část 5]). Nechť y_1 je řešení rovnice (1.2) na intervalu I_1 . Existuje-li řešení y_2 rovnice (1.2) na intervalu $I_2 \supset I_1$ takovém, že $I_2 \setminus \bar{I}_1 \neq \emptyset^1$ a platí-li

$$y_2(x) = y_1(x) \quad \text{pro } x \in I_1,$$

nazývá se řešení y_2 prodloužením řešení y_1 . Mají-li navíc intervaly I_1, I_2 stejné levé (resp. pravé) krajní body, mluvíme o prodloužení řešení y_1 napravo (resp. nalevo).

Řešení y rovnice (1.2) se nazývá neprodloužitelné (resp. napravo neprodloužitelné, resp. nalevo neprodloužitelné), jestliže neexistuje řešení rovnice (1.2), které by bylo jeho prodloužením (resp. prodloužením napravo, resp. prodloužením nalevo).

Poznámka 1.10. Neprodloužitelným (resp. napravo neprodloužitelným, resp. nalevo neprodloužitelným) řešením počáteční úlohy (1.2), (1.3) rozumíme neprodloužitelné (resp. napravo neprodloužitelné, resp. nalevo neprodloužitelné) řešení rovnice (1.2) splňující počáteční podmínku (1.3).

Poznámka 1.11. Místo pojmu neprodloužitelné řešení se často používá také pojem úplné řešení.

Věta 1.12 (Věta o existenci úplného řešení, [4, Věta 5.2]). Buď $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ funkce spojitá na oblasti $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$. Je-li y řešení rovnice (1.2), pak je buď úplné, nebo existuje úplné řešení z , které je prodloužením řešení y .

Z důkazu této věty a úvah uvedených v [4, kapitola IV, část 5] je patrné následující tvrzení.

Tvrzení 1.13. Nechť $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ je oblast a $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ je spojitá funkce. Řešení y rovnice (1.2) definované na intervalu $\langle x_0, X \rangle$ je napravo neprodloužitelné právě tehdy, když nastane jeden z těchto případů:

1. $X = \infty$.
2. $X < \infty$ a existuje posloupnost $\{x_k\}_{k=1}^{\infty} \subseteq \langle x_0, X \rangle$, kde $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = X$, taková, že platí

$$\lim_{k \rightarrow \infty} |y(x_k)| = \infty.$$

3. $X < \infty$ a existuje posloupnost $\{x_k\}_{k=1}^{\infty} \subseteq \langle x_0, X \rangle$, kde $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = X$ taková, že platí

$$\lim_{k \rightarrow \infty} d([x_k, y(x_k)], \partial\Omega) = 0,$$

kde d značí vzdálenost v \mathbb{R}^2 a $\partial\Omega$ značí hranici množiny Ω .

¹ \bar{I}_1 značí uzávěr intervalu I_1 .

Podobně, pro nalevo neprodloužitelné řešení rovnice (1.2) dostaneme následující tvrzení.

Tvrzení 1.14. *Nechť $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ je oblast a $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ je spojitá funkce. Řešení y rovnice (1.2) definované na intervalu (X, x_0) je nalevo neprodloužitelné právě tehdy, když nastane jeden z těchto případů:*

1. $X = -\infty$.

2. $X > -\infty$ a existuje posloupnost $\{x_k\}_{k=1}^{\infty} \subseteq (X, x_0)$, kde $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = X$, taková, že platí

$$\lim_{k \rightarrow \infty} |y(x_k)| = \infty.$$

3. $X > -\infty$ a existuje posloupnost $\{x_k\}_{k=1}^{\infty} \subseteq (X, x_0)$, kde $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = X$ taková, že platí

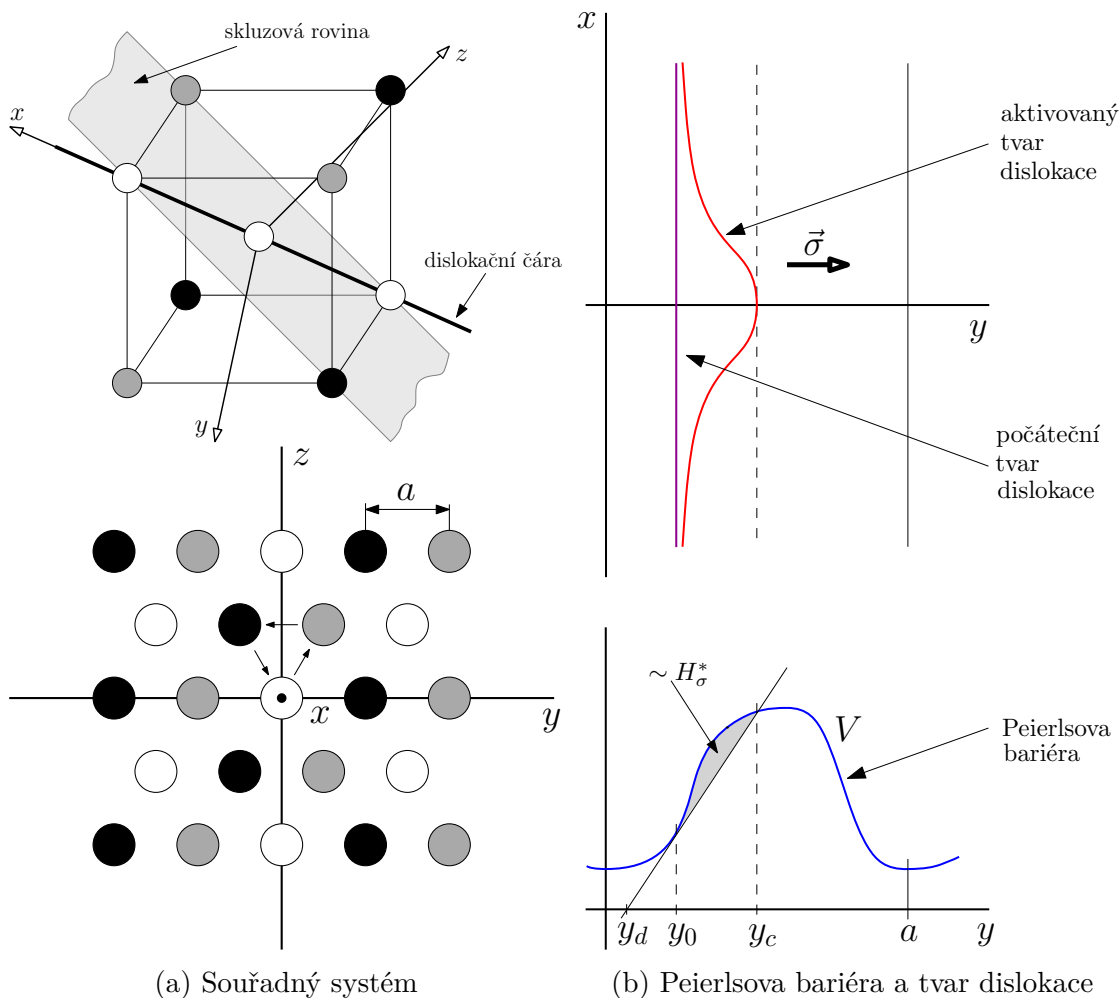
$$\lim_{k \rightarrow \infty} d([x_k, y(x_k)], \partial\Omega) = 0,$$

kde d značí vzdálenost v \mathbb{R}^2 a $\partial\Omega$ značí hranici množiny Ω .

2. Odvození rovnice

Většina technologicky důležitých materiálů je tvořena krystaly, ve kterých jsou atomy uspořádány v krystalické mřížce symetricky, jako například v kubické, hexagonální, tetragonální apod. Atomy v ideálních mřížkách jsou na místech s nejmenší potenciální energií a jejich vychýlení z těchto poloh vede ke zvýšení mřížkové energie. Je známo, že plastická deformace u kovů s kubickou prostorově středěnou mřížkou je řízena teplotně aktivovaným pohybem šroubových dislokací. Dislokace jsou defekty v krystalech způsobeny konečnou rychlostí tuhnutí, atomy totiž nemají při tuhnutí dostatek času získat dokonalé mřížkové polohy. Každá dislokace je charakterizována takzvaným Burgersovým vektorem \vec{b} a směrovým vektorem \vec{u} . Rozlišujeme dva druhy dislokací: hranová dislokace, kde $\vec{b} \perp \vec{u}$ a šroubová dislokace, kde $\vec{b} \parallel \vec{u}$. Pokud ani jedna z těchto podmínek není splněna, hovoříme o smíšené dislokaci.

Tato práce se zabývá takzvanou $1/2\langle 111 \rangle$ šroubovou dislokací v kubické prostorově středěné mřížce. V tomto případě má směrový vektor \vec{u} dislokační čáry směr tělesové úhlopříčky. Zvolíme skluzovou rovinu (viz obrázek 2.1a) a zavedeme vhodný souřadný systém. Pohyb šroubových dislokací v rovině skluzu je aktivován teplotně. Pohybují se vlivem aplikovaného zatížení reprezentovaného smykovým napětím $\vec{\sigma}$ ve skluzové rovině a tento pohyb je podporován teplotními fluktuacemi.



Obrázek 2.1: Volba souřadného systému, Peierlsova bariéra a tvar dislokace

Dislokace se nejprve pohybuje vlivem smykového napětí $\vec{\sigma}$ jako přímka z polohy $y = 0$ do pozice $y = y_0$, kde hodnota y_0 je dána vztahem

$$V'(y_0) = \sigma b.$$

Funkce V zde označuje takzvanou Peierlsovu bariéru, která představuje odpor mřížky proti pohybu dislokace (viz obrázek 2.1b) a σ (resp. b) značí velikost smykového napětí (resp. Burgersova vektoru). Energie systému v pozici $y = y_0$ je dána vztahem

$$E_1 = \int_{-\infty}^{\infty} V(y_0) dx.$$

Vlivem tepelné energie atomy kmitají kolem rovnovážných poloh a dislokace tedy nezůstane přímou, ale snaží se zaujmout vhodný tvar $y = y(x)$. Při tvaru dislokace $y = y(x)$ je energie systému rovna

$$E_2 = \int_{-\infty}^{\infty} V(y(x)) \sqrt{1 + [y'(x)]^2} dx.$$

Práce vykonaná při přemístění dislokace ze stavu s energií E_1 do stavu s energií E_2 je

$$W_{12} = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma b(y(x) - y_0) dx.$$

Aktivační entalpie odpovídající tvaru dislokace $y = y(x)$ je tedy dána vztahem $H = E_2 - E_1 - W_{12}$ a po dosažení získáváme tvar

$$H_\sigma(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[V(y(x)) \sqrt{1 + [y'(x)]^2} - V(y_0) - \sigma b(y(x) - y_0) \right] dx \quad (2.1)$$

(viz [1], případně [3, 5]). Aktivovaným tvarem dislokace (viz obrázek 2.1b) se rozumí tvar dislokace odpovídající minimu aktivační entalpie H_σ a určuje tak hodnotu H_σ^* aktivační entalpie pro pohyb dislokace při dané velikosti napětí σ .

Budeme tedy řešit variační úlohu s pevnými konci, tj. minimalizovat funkcionál H_σ daný vztahem (2.1) za podmínek $y(\infty) = y_0$, $y(-\infty) = y_0$. Lagrangián je v tomto případě tvaru

$$L(x, y, y') = V(y) \sqrt{1 + [y']^2} - V(y_0) - \sigma b(y - y_0)$$

a použijeme-li Beltramiho identitu $L - y' \frac{\partial L}{\partial y'} = konst$, dostaneme po úpravě

$$\frac{V(y)}{\sqrt{1 + [y']^2}} - V(y_0) - \sigma b(y - y_0) = konst.$$

Hledáme spojitě diferencovatelnou funkci $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ splňující

$$\frac{V(y(x))}{\sqrt{1 + [y'(x)]^2}} - V(y_0) - \sigma b(y(x) - y_0) = c \quad \text{pro } x \in \mathbb{R}, \quad (2.2)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} y(x) = y_0, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} y(x) = y_0, \quad (2.3)$$

kde $c \in \mathbb{R}$.

Ukažme nyní, že musí být splněna rovnost $c = 0$. Vskutku, nechť $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je spojitě diferencovatelná funkce splňující (2.2) a (2.3). Přejdeme-li v (2.2) k limitám pro $x \rightarrow \pm\infty$ a použijeme-li okrajové podmínky (2.3), získáme

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{1}{\sqrt{1 + [y'(x)]^2}} = \frac{c + V(y_0)}{V(y_0)}.$$

Odtud plyne, že existují (konečné, nebo nekonečné) limity $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} [y'(x)]^2$. Proto existují také limity $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} y'(x)$ a vzhledem k okrajovým podmínkám (2.3) dostaneme

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} y'(x) = 0.$$

Přejdeme-li znovu v (2.2) k limitám pro $x \rightarrow \pm\infty$, zjistíme, že nutně musí být $c = 0$.

Aktivovaný tvar dislokace budeme tedy hledat jako nekonstantní řešení diferenciální rovnice

$$[y']^2 = \left[\frac{V(y)}{V(y_0) + \sigma b(y - y_0)} \right]^2 - 1$$

splňující okrajové podmínky (2.3).

3. Analýza okrajové úlohy pro aktivovaný tvar dislokace

V předchozí kapitole jsme ukázali, že aktivovaný tvar dislokace budeme hledat jako nekonstantní řešení okrajové úlohy

$$[y']^2 = \left[\frac{V(y)}{V(y_0) + \sigma b(y - y_0)} \right]^2 - 1, \quad (3.1)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} y(x) = y_0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} y(x) = y_0. \quad (3.2)$$

Vzhledem k vlastnostem Peierlsovy bariéry diskutované v článku [1] budeme v celé této části předpokládat, že $a, b, \sigma > 0$ a funkce V splňuje

$$\left. \begin{aligned} V : \mathbb{R} \rightarrow (0, \infty) \text{ je } a\text{-periodická funkce spojitá včetně derivací 1. a 2. řádu,} \\ \text{existují } y_0 \in (0, a), y_c \in (y_0, a) \text{ taková, že} \\ V'(y_0) = \sigma b, V'(y_c) < \sigma b, \\ V(y) > V(y_0) + \sigma b(y - y_0) \text{ pro každé } y \in \langle 0, y_c \rangle \setminus \{y_0\}, \\ V(y) < V(y_0) + \sigma b(y - y_0) \text{ pro každé } y \in (y_c, a). \end{aligned} \right\} \quad (3.3)$$

Dokážeme zejména následující dvě tvrzení. První se týká otázky existence nekonstantního řešení úlohy (3.1), (3.2).

Věta 3.1. *Pro každé $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$, $x_1 \leq x_2$, existuje řešení y úlohy (3.1), (3.2) takové, že*

$$y'(x) > 0 \quad \text{pro } x < x_1, \quad (3.4)$$

$$y(x) = y_c \quad \text{pro } x \in \langle x_1, x_2 \rangle, \quad (3.5)$$

$$y'(x) < 0 \quad \text{pro } x > x_2. \quad (3.6)$$

Odtud vidíme, že nekonstantní řešení úlohy (3.1), (3.2) není jediné, avšak všechna řešení jsou si v jistém smyslu podobná, jak vyplývá z následujícího tvrzení.

Věta 3.2. *Nechť y je nekonstantní řešení úlohy (3.1), (3.2). Pak existují $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$, $x_1 \leq x_2$, taková, že řešení y splňuje podmínky (3.4)–(3.6). Navíc:*

A) y je na intervalu $(-\infty, x_1)$ řešením diferenciální rovnice

$$y' = \sqrt{\left[\frac{V(y)}{V(y_0) + \sigma b(y - y_0)} \right]^2 - 1}. \quad (3.7)$$

B) y je na intervalu (x_2, ∞) řešením diferenciální rovnice

$$y' = -\sqrt{\left[\frac{V(y)}{V(y_0) + \sigma b(y - y_0)} \right]^2 - 1}. \quad (3.8)$$

C) $y(x) = y(x_1 + x_2 - x)$ pro $x \leq x_1$.

Důkazy vět 3.1 a 3.2 odložíme na konec kapitoly, vyšetříme nejprve některé vlastnosti diferenciální rovnice (3.7).

Položme $y_d := y_0 - \frac{V(y_0)}{\sigma b}$ a

$$h(t) := \left[\frac{V(t)}{V(y_0) + \sigma b(t - y_0)} \right]^2 \quad \text{pro } t \in (y_d, y_c). \quad (3.9)$$

Rovnici (3.7) pak můžeme zapsat ve tvaru

$$y' = \sqrt{h(y) - 1}. \quad (3.10)$$

Tvrzení 3.3. *Diferenciální rovnice (3.10) má konstantní řešení $y(x) = y_0$ a $y(x) = y_c$ definovaná na \mathbb{R} .*

Důkaz. Ověříme přímým dosazením do (3.10). Z předpokladu (3.3) totiž plyne, že $h(y_0) = h(y_c) = 1$. \square

Tvrzení 3.4. *Pro každé $[x_0, \alpha_0] \in \mathbb{R} \times [(y_d, y_0) \cup (y_0, y_c)]$ existuje $\delta > 0$ taková, že počáteční úloha*

$$y' = \sqrt{h(y) - 1}, \quad y(x_0) = \alpha_0 \quad (3.11)$$

má na intervalu $(x_0 - \delta, x_0 + \delta)$ jediné řešení.

Důkaz. Lokální existenci a jednoznačnost řešení počáteční úlohy lze vyšetřit pomocí Peanovy a Picardovy věty (viz věty 1.5 a 1.7). Všimněme si nejprve, že funkce h daná vztahem (3.9) je spojitě diferencovatelná na intervalu (y_d, y_c) a $h(t) \geq 1$ pro $t \in (y_d, y_c)$.

Abychom dokázali existenci řešení, stačí posoudit spojitost funkce $f(x, y) := \sqrt{h(y) - 1}$ v okolí počáteční podmínky. Ta je zřejmě spojitá na množině $\mathbb{R} \times (y_d, y_c)$.

K důkazu jednoznačnosti nám stačí ukázat lipschitzovskost funkce f v druhé proměnné na nějakém okolí počáteční podmínky. Zřejmě

$$\left| \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \right| = \left| \frac{h'(y)}{2\sqrt{h(y) - 1}} \right| \quad \text{pro } [x, y] \in \mathbb{R} \times [(y_d, y_0) \cup (y_0, y_c)].$$

Funkce $\frac{\partial f}{\partial y}$ je v okolí počáteční podmínky omezená, je tam totiž spojitá, a proto lipschitzovskost funkce f v druhé proměnné plyne z poznámky 1.8. \square

Tvrzení 3.5. *Nechť $\alpha_0 \in (y_0, y_c)$. Pak má počáteční úloha*

$$y' = \sqrt{h(y) - 1}, \quad y(0) = \alpha_0 \quad (3.12)$$

řešení y definované na \mathbb{R} takové, že

$$y_0 \leq y(x) \leq y_c \quad \text{pro } x \in \mathbb{R}. \quad (3.13)$$

Důkaz. Uvažujme diferenciální rovnici

$$y' = g(x, y),$$

kde $g(x, y) := \sqrt{h(y) - 1}$ pro $[x, y] \in \Omega := \mathbb{R} \times (y_0, y_c)$. Vzhledem k tvrzení 3.4 existuje $\delta > 0$ taková, že úloha

$$y' = g(x, y), \quad y(0) = \alpha_0$$

má na intervalu $(-\delta, \delta)$ jediné řešení y . Z věty 1.12 plyne, že existuje úplné prodloužení řešení y , které je definováno na intervalu (X_1, X_2) , kde $-\infty \leq X_1 < 0$ a $0 < X_2 \leq \infty$ (označme ho opět y). Všimněme si, že předpoklad (3.3) zaručí

$$h(t) > 1 \quad \text{pro } t \in (y_0, y_c), \quad (3.14)$$

a proto

$$y'(x) > 0 \quad \text{pro } x \in (X_1, X_2).$$

Vzhledem k tvrzení 1.13 je tedy splněna právě jedna z následujících možností:

1. $X_2 = \infty$,
2. $X_2 < \infty$ a $\lim_{x \rightarrow X_2^-} y(x) = y_c$.

Je zřejmé, že y je řešením diferenciální rovnice (3.10) na intervalu (X_1, X_2) .

Podle tvrzení 3.3 je však funkce $\tilde{y}(x) = y_c$ pro $x \in \mathbb{R}$ také řešením rovnice (3.10), a tudíž v případě 2 je funkce

$$\bar{y}(x) = \begin{cases} y(x) & \text{pro } x \in (X_1, X_2), \\ y_c & \text{pro } x \in (X_2, \infty) \end{cases}$$

řešením diferenciální rovnice (3.10) splňujícím $y_0 < \bar{y}(x) \leq y_c$ pro $x \in (X_1, \infty)$.

Podobně lze ukázat, že v případě $X_1 > -\infty$ existuje řešení $\hat{y} : (-\infty, X_2) \rightarrow \mathbb{R}$ rovnice (3.10) takové, že $\hat{y}(x) = y(x)$ pro $x \in (X_1, X_2)$ a

$$y_0 \leq \hat{y}(x) < y_c \quad \text{pro } x \in (-\infty, X_2).$$

Tím je tvrzení dokázáno. □

Lemma 3.6. *Platí*

$$\int_{y_0}^{\frac{y_0+y_c}{2}} \frac{1}{\sqrt{h(t)-1}} dt = \infty, \quad \int_{\frac{y_0+y_c}{2}}^{y_c} \frac{1}{\sqrt{h(t)-1}} dt < \infty,$$

$$\int_{\frac{y_d+y_0}{2}}^{y_0} \frac{1}{\sqrt{h(t)-1}} dt = \infty,$$

kde h je dána vztahem (3.9).

Důkaz. Využijí se vlastnosti Peierlsovy bariéry (3.3) a jednotlivé integrály se srovnají s vhodnými konvergentními a divergentními integrály. Důkaz je technický a převyšuje rámec této práce, proto jej zde neuvádíme. □

Věta 3.7. *Nechť $\alpha_0 \in (y_0, y_c)$. Pak počáteční úloha (3.12) má jediné neprodloužitelné řešení y . Toto řešení je definované na \mathbb{R} a existuje $x_1 > 0$ takové, že*

$$y_0 < y(x) < y_c, \quad y'(x) > 0 \quad \text{pro } x < x_1, \quad (3.15)$$

$$y(x) = y_c \quad \text{pro } x \geq x_1, \quad (3.16)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} y(x) = y_0. \quad (3.17)$$

Důkaz. Vzhledem k tvrzení 3.5 existuje řešení y počáteční úlohy (3.12) definované na \mathbb{R} a splňující (3.13). Z (3.9) a předpokladu (3.3) plyne (3.14), $h(y_0) = 1$ a $h(y_c) = 1$, a proto

$$y'(x) \geq 0 \quad \text{pro } x \in \mathbb{R} \quad (3.18)$$

a

$$y'(x) > 0 \quad \text{pro } x \in \mathbb{R}, y(x) \in (y_0, y_c). \quad (3.19)$$

Ukažme nyní, že existuje $\hat{x} > 0$ takové, že $y(\hat{x}) = y_c$. Vskutku, připustme, že

$$y(x) < y_c \quad \text{pro } x \geq 0.$$

Potom, vzhledem k (3.18) a (3.19), máme

$$y'(x) > 0 \quad \text{pro } x \geq 0$$

a existuje $\hat{y} \in (\alpha_0, y_c)$ takové, že

$$\lim_{x \rightarrow \infty} y(x) = \hat{y}.$$

Z rovnice (3.10) plyne

$$y'(x) = \sqrt{h(y(x)) - 1} \quad \text{pro } x \geq 0,$$

odkud, vzhledem k (3.14), dostaneme

$$\int_0^x \frac{y'(s)}{\sqrt{h(y(s)) - 1}} ds = \int_0^x ds \quad \text{pro } x \geq 0$$

a lze tedy psát

$$\int_{\alpha_0}^{y(x)} \frac{1}{\sqrt{h(t) - 1}} dt = x \quad \text{pro } x \geq 0.$$

Přejdeme-li k limitě pro $x \rightarrow \infty$, získáme

$$\int_{\alpha_0}^{\hat{y}} \frac{1}{\sqrt{h(t) - 1}} dt = \infty,$$

což je spor s (3.14) (je-li $\hat{y} < y_c$) a tvrzením lemma 3.6 (je-li $\hat{y} = y_c$). Dosažený spor dokazuje, že existuje $\hat{x} > 0$ takové, že $y(\hat{x}) = y_c$.

Položme

$$x_1 = \inf\{x > 0 : y(x) = y_c\}.$$

Z podmínek (3.13), (3.18), (3.19) a počáteční podmínky $y(0) = \alpha_0$ okamžitě plyne, že platí (3.16) a

$$y_0 < y(x) < y_c, \quad y'(x) > 0 \quad \text{pro } x \in (0, x_1).$$

Dále ukážeme, že

$$y(x) > y_0 \quad \text{pro } x \leq 0. \quad (3.20)$$

Připustme, že (3.20) neplatí. Pak, vzhledem k (3.18) a (3.19), existuje $x_2 < 0$ takové, že

$$y_0 < y(x) \leq \alpha_0, \quad y'(x) > 0 \quad \text{pro } x \in (x_2, 0),$$

$$y(x_2) = y_0.$$

Z rovnice (3.10) plyne

$$y'(x) = \sqrt{h(y(x)) - 1} \quad \text{pro } x \in \langle x_2, 0 \rangle,$$

a proto podobně jako výše dostaneme

$$\int_{y(x)}^{\alpha_0} \frac{1}{\sqrt{h(t) - 1}} dt = -x \quad \text{pro } x \in \langle x_2, 0 \rangle.$$

Přejdeme-li k limitě pro $x \rightarrow x_2+$, dostaneme

$$\int_{y_0}^{\alpha_0} \frac{1}{\sqrt{h(t) - 1}} dt = |x_2| < \infty,$$

což je spor s tvrzením lemma 3.6. Dosažený spor dokazuje, že platí (3.20). Z podmínek (3.18) a (3.19) proto plyne

$$y'(x) > 0 \quad \text{pro } x \leq 0$$

a existuje tedy $\bar{y} \in \langle y_0, \alpha_0 \rangle$ takové, že

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} y(x) = \bar{y}.$$

Navíc

$$y'(x) = \sqrt{h(y(x)) - 1} \quad \text{pro } x \leq 0,$$

odkud

$$\int_{y(x)}^{\alpha_0} \frac{1}{\sqrt{h(t) - 1}} dt = -x \quad \text{pro } x \leq 0.$$

Přejdeme-li k limitě pro $x \rightarrow -\infty$, získáme

$$\int_{\bar{y}}^{\alpha_0} \frac{1}{\sqrt{h(t) - 1}} dt = \infty$$

a z nerovnosti (3.14) tudíž vyplývá, že $\bar{y} = y_0$, tj. platí (3.17).

Jednoznačnost neprodloužitelného řešení y plyne z tvrzení 3.4 a výše dokázaných vlastností (3.15)–(3.17). \square

Tvrzení 3.8. *Nechť $\alpha_0 \in (y_d, y_0)$. Pak má počáteční úloha (3.12) neprodloužitelné řešení y definované na intervalu (x_3, ∞) takové, že*

$$y_d < y(x) \leq y_0 \quad \text{pro } x \in (x_3, \infty) \quad (3.21)$$

a

$$\text{buď } x_3 = -\infty, \text{ nebo } -\infty < x_3 < 0 \text{ a } \lim_{x \rightarrow x_3+} y(x) = y_d. \quad (3.22)$$

Důkaz. Uvažujme diferenciální rovnici

$$y' = q(x, y),$$

kde $q(x, y) := \sqrt{h(y) - 1}$ pro $[x, y] \in \Omega := \mathbb{R} \times (y_d, y_0)$. Vzhledem k tvrzení 3.4 existuje $\delta > 0$ taková, že úloha

$$y' = q(x, y), \quad y(0) = \alpha_0$$

má na intervalu $(-\delta, \delta)$ jediné řešení y . Z věty 1.12 plyne, že existuje úplné prodloužení řešení y , které je definováno na intervalu (X_3, X_4) , kde $-\infty \leq X_3 < 0$ a $0 < X_4 \leq \infty$ (označme ho opět y). Všimněme si, že předpoklad (3.3) zaručí

$$h(t) > 1 \quad \text{pro } t \in (y_d, y_0), \quad (3.23)$$

a proto

$$y'(x) > 0 \quad \text{pro } x \in (X_3, X_4).$$

Vzhledem k tvrzení 1.13 je tedy splněna právě jedna z následujících možností:

1. $X_4 = \infty$,
2. $X_4 < \infty$ a $\lim_{x \rightarrow X_4^-} y(x) = y_0$.

Je zřejmé, že y je řešením diferenciální rovnice (3.10) na intervalu (X_3, X_4) .

Podle tvrzení 3.3 je však funkce $\tilde{y}(x) = y_0$ pro $x \in \mathbb{R}$ také řešením rovnice (3.10), a tudíž v případě 2 je funkce

$$\tilde{y}(x) = \begin{cases} y(x) & \text{pro } x \in (X_3, X_4), \\ y_0 & \text{pro } x \in \langle X_4, \infty \rangle \end{cases}$$

napravo neprodloužitelným řešením diferenciální rovnice (3.10) splňujícím $y_d < \tilde{y}(x) \leq y_0$ pro $x \in (X_3, \infty)$. Navíc, vzhledem k tvrzení 1.14, X_3 splňuje právě jednu z následujících možností :

1. $X_3 = -\infty$,
2. $X_3 > -\infty$ a $\lim_{x \rightarrow X_3^+} y(x) = y_d$.

Odtud plyne, že y je nalevo neprodloužitelné řešení rovnice (3.10). Položíme $x_3 := X_3$ a tím je tvrzení zcela dokázáno. \square

Věta 3.9. *Nechť $\alpha_0 \in (y_d, y_0)$. Pak počáteční úloha (3.12) má jediné neprodloužitelné řešení y . Toto řešení je definované na intervalu (x_3, ∞) a platí*

$$y_d < y(x) < y_0, \quad y'(x) > 0 \quad \text{pro } x \in (x_3, \infty), \quad (3.24)$$

$$\lim_{x \rightarrow x_3^+} y(x) = y_d, \quad \lim_{x \rightarrow x_3^+} y'(x) = \infty, \quad (3.25)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} y(x) = y_0, \quad (3.26)$$

přičemž

$$x_3 = - \int_{y_d}^{\alpha_0} \frac{1}{\sqrt{h(t) - 1}} dt. \quad (3.27)$$

Důkaz. Vzhledem k tvrzení 3.8 existuje neprodloužitelné řešení y počáteční úlohy (3.12) definované na intervalu (x_3, ∞) a splňující (3.21) a (3.22). Z (3.9) a předpokladu (3.3) plyne (3.23), $h(y_0) = 1$, a proto

$$y'(x) \geq 0 \quad \text{pro } x \in (x_3, \infty) \quad (3.28)$$

a

$$y'(x) > 0 \quad \text{pro } x \in (x_3, \infty), y(x) \in (y_d, y_0). \quad (3.29)$$

Ukažme nyní, že

$$y(x) < y_0 \quad \text{pro } x \geq 0. \quad (3.30)$$

Připustíme, že (3.30) neplatí. Pak, vzhledem k (3.28) a (3.29), existuje $\hat{x} > 0$ takové, že

$$\begin{aligned} \alpha_0 \leq y(x) < y_0, \quad y'(x) > 0 \quad \text{pro } x \in \langle 0, \hat{x} \rangle, \\ y(\hat{x}) = y_0. \end{aligned}$$

Z rovnice (3.10) plyne

$$y'(x) = \sqrt{h(y(x)) - 1} \quad \text{pro } \langle 0, \hat{x} \rangle,$$

odkud, vzhledem k (3.23), dostaneme

$$\int_0^x \frac{y'(s)}{\sqrt{h(y(s)) - 1}} ds = \int_0^x ds \quad \text{pro } x \in \langle 0, \hat{x} \rangle$$

a lze tedy psát

$$\int_{\alpha_0}^{y(x)} \frac{1}{\sqrt{h(t) - 1}} dt = x \quad \text{pro } x \in \langle 0, \hat{x} \rangle.$$

Přejdeme-li k limitě pro $x \rightarrow \hat{x}-$, dostaneme

$$\int_{\alpha_0}^{y_0} \frac{1}{\sqrt{h(t) - 1}} dt = \hat{x} < \infty,$$

což je spor s tvrzením lemma 3.6. Dosažený spor dokazuje, že platí (3.30) a z podmínek (3.28) a (3.29) proto plyne

$$y'(x) > 0 \quad \text{pro } x \geq 0.$$

Existuje tedy $\tilde{y} \in (\alpha_0, y_0)$ takové, že

$$\lim_{x \rightarrow \infty} y(x) = \tilde{y}.$$

Navíc

$$y'(x) = \sqrt{h(y(x)) - 1} \quad \text{pro } x \geq 0,$$

odkud

$$\int_{\alpha_0}^{y(x)} \frac{1}{\sqrt{h(t) - 1}} dt = x \quad \text{pro } x \geq 0.$$

Přejdeme-li k limitě pro $x \rightarrow \infty$ získáme

$$\int_{\alpha_0}^{\tilde{y}} \frac{1}{\sqrt{h(t) - 1}} dt = \infty$$

a z nerovnosti (3.23) tudíž vyplývá, že $\tilde{y} = y_0$, tj. platí (3.26).

Dále ukážeme, že

$$x_3 > -\infty. \quad (3.31)$$

Nejprve si všimněme, že

$$\int_{y_d}^{\frac{y_d+y_0}{2}} \frac{1}{\sqrt{h(t)-1}} dt < \infty. \quad (3.32)$$

Vskutku, dosadíme za $h(t)$ ze vztahu (3.9), tj.

$$\int_{y_d}^{\frac{y_d+y_0}{2}} \frac{1}{\sqrt{h(t)-1}} dt = \int_{y_d}^{\frac{y_d+y_0}{2}} \frac{1}{\sqrt{\left[\frac{V(t)}{V(y_0)+\sigma b(t-y_0)}\right]^2 - 1}} dt$$

a po úpravě, vzhledem k (3.3), získáme

$$\int_{y_d}^{\frac{y_d+y_0}{2}} \frac{V(y_0) + \sigma b(t-y_0)}{\sqrt{V(t)^2 - [V(y_0) + \sigma b(t-y_0)]^2}} dt < \infty,$$

čímž je (3.32) dokázáno. Připustme nyní, že $x_3 = -\infty$. Pak, vzhledem k (3.28) a (3.29), existuje $\hat{y} \in \langle y_d, \alpha_0 \rangle$ takové, že

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} y(x) = \hat{y}.$$

Z rovnice (3.10) plyne

$$y'(x) = \sqrt{h(y(x)) - 1} \quad \text{pro } x \leq 0,$$

odkud podobně jako výše dostaneme

$$\int_{y(x)}^{\alpha_0} \frac{1}{\sqrt{h(t)-1}} dt = -x \quad \text{pro } x \leq 0.$$

Přejdeme-li k limitě pro $x \rightarrow -\infty$, získáme

$$\int_{\hat{y}}^{\alpha_0} \frac{1}{\sqrt{h(t)-1}} dt = \infty,$$

což je ve sporu s (3.23) (je-li $\hat{y} > y_d$) a (3.32) (je-li $\hat{y} = y_d$). Dosažený spor dokazuje, že platí (3.31). Z (3.22) proto plyne

$$\lim_{x \rightarrow x_3^+} y(x) = y_d.$$

Navíc

$$y'(x) = \sqrt{h(y(x)) - 1} \quad \text{pro } x \in (x_3, 0),$$

odkud

$$\int_{y(x)}^{\alpha_0} \frac{1}{\sqrt{h(t)-1}} dt = -x \quad \text{pro } x \in (x_3, 0).$$

Přejdeme-li k limitě pro $x \rightarrow x_3+$, získáme

$$\int_{y_d}^{\alpha_0} \frac{1}{\sqrt{h(t)} - 1} dt = -x_3, \quad (3.33)$$

a x_3 je proto jednoznačně určeno vztahem (3.27).

Zbývá ukázat, že platí

$$\lim_{x \rightarrow x_3+} y'(x) = \infty. \quad (3.34)$$

Vskutku, z (3.3) a (3.9) plyne

$$\lim_{t \rightarrow y_d+} h(t) = \lim_{t \rightarrow y_d+} \left[\frac{V(t)}{V(y_0) + \sigma b(t - y_0)} \right] = \infty, \quad (3.35)$$

a proto

$$\lim_{x \rightarrow x_3+} y'(x) = \lim_{x \rightarrow x_3+} \sqrt{h(y(x)) - 1} = \lim_{t \rightarrow y_d+} \sqrt{h(t) - 1} = \infty.$$

Tím je dokázáno, že platí (3.34).

Jednoznačnost neprodloužitelného řešení y plyne z tvrzení 3.4 a výše dokázaných vlastností (3.24)–(3.26). \square

Důsledek 3.10. *Rovnice (3.7) má právě dvě, až na posunutí, nekonstantní neprodloužitelná řešení $y_1 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ a $y_2 : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$, přičemž*

$$y_0 < y_1(x) < y_c, \quad y_1'(x) > 0 \quad \text{pro } x < 0, \quad (3.36)$$

$$y_1(x) = y_c \quad \text{pro } x \geq 0, \quad (3.37)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} y_1(x) = y_0, \quad (3.38)$$

$$y_d < y_2(x) < y_0, \quad y_2'(x) > 0 \quad \text{pro } x > 0, \quad (3.39)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0+} y_2(x) = y_d, \quad \lim_{x \rightarrow 0+} y_2'(x) = \infty, \quad (3.40)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} y_2(x) = y_0. \quad (3.41)$$

Důkaz. Nejprve zvolme $\alpha_0 \in (y_0, y_c)$. Potom z věty 3.7 plyne, že existuje neprodloužitelné řešení $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ úlohy (3.12) a $x_1 > 0$ splňující (3.15)–(3.17). Pak funkce

$$y_1(x) := y(x + x_1) \quad \text{pro } x \in \mathbb{R}$$

je neprodloužitelné řešení rovnice (3.7) splňující (3.36)–(3.38).

Nyní zvolme $\alpha_0 \in (y_d, y_0)$. Pak z věty 3.9 vyplývá, že existuje $x_3 < 0$ a neprodloužitelné řešení $y : (x_3, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ úlohy (3.12) splňující (3.24)–(3.26). Pak funkce

$$y_2(x) := y(x + x_3) \quad \text{pro } x > 0$$

je neprodloužitelné řešení rovnice (3.7) splňující (3.39)–(3.41).

Dále nechť \tilde{y} je libovolné nekonstantní neprodloužitelné řešení rovnice (3.7) definované na intervalu I . Potom existuje $\hat{x} \in I$ takové, že $\tilde{y}(\hat{x}) \in (y_d, y_0) \cup (y_0, y_c)$.

Je-li $\tilde{y}(\hat{x}) \in (y_0, y_c)$, pak z vlastností (3.36)–(3.38) vyplývá, že existuje $x_4 < 0$ takové, že

$$y_1(x_4) = \tilde{y}(\hat{x}).$$

Potom funkce

$$\begin{aligned} u_1(x) &:= \tilde{y}(x + \hat{x}) \quad \text{pro } x \in \{z - \hat{x} : z \in I\}, \\ u_2(x) &:= y_1(x + x_4) \quad \text{pro } x \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

jsou neprodloužitelná řešení úlohy $y' = \sqrt{h(y) - 1}$, $y(0) = \tilde{y}(\hat{x})$. Věta 3.7 potom zaručí, že $I = \mathbb{R}$ a

$$\tilde{y}(x + \hat{x}) = y_1(x + x_4) \quad \text{pro } x \in \mathbb{R},$$

\tilde{y} je tedy posunutím řešení y_1 .

Je-li $\tilde{y}(\hat{x}) \in (y_d, y_0)$, potom, vzhledem k vlastnostem (3.39)–(3.41) existuje $x_5 > 0$ tak, že

$$y_2(x_5) = \tilde{y}(\hat{x}).$$

Pak funkce

$$\begin{aligned} v_1(x) &:= \tilde{y}(x + \hat{x}) \quad \text{pro } x \in \{z - \hat{x} : z \in I\}, \\ v_2(x) &:= y_2(x + x_5) \quad \text{pro } x > -x_5 \end{aligned}$$

jsou neprodloužitelná řešení úlohy $y' = \sqrt{h(y) - 1}$, $y(0) = \tilde{y}(\hat{x})$. Z věty 3.9 plyne, že $I = (\hat{x} - x_5, \infty)$ a

$$\tilde{y}(x + \hat{x}) = y_2(x + x_5) \quad \text{pro } x > -x_5,$$

\tilde{y} je tedy posunutím řešení y_2 . □

Důsledek 3.11. *Rovnice (3.8) má právě dvě, až na posunutí, nekonstantní neprodloužitelná řešení $y_3 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ a $y_4 : (-\infty, 0) \rightarrow \mathbb{R}$, přičemž*

$$y_0 < y_3(x) < y_c, \quad y_3'(x) < 0 \quad \text{pro } x > 0, \quad (3.42)$$

$$y_3(x) = y_c \quad \text{pro } x \leq 0, \quad (3.43)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} y_3(x) = y_0, \quad (3.44)$$

$$y_d < y_4(x) < y_0, \quad y_4'(x) < 0 \quad \text{pro } x < 0, \quad (3.45)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0^-} y_4(x) = y_d, \quad \lim_{x \rightarrow 0^-} y_4'(x) = -\infty, \quad (3.46)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} y_4(x) = y_0. \quad (3.47)$$

Důkaz. Důkaz tohoto důsledku plyne z důsledku 3.10 a faktu, že y je řešením rovnice (3.7) na (a, b) právě tehdy, když funkce $\tilde{y}(x) := y(-x)$ je řešením rovnice (3.8) na $(-b, -a)$. Tím tedy získáme, že

$$y_1(x) = y_3(-x) \quad \text{pro } x \in \mathbb{R}$$

a

$$y_2(x) = y_4(-x) \quad \text{pro } x \in (0, \infty).$$

□

Dokažme nyní větu 3.1.

Důkaz věty 3.1. Z důsledku 3.10 plyne, že existuje řešení y_1 rovnice (3.7) splňující (3.36)–(3.38) a důsledek 3.11 zaručí existenci řešení y_3 rovnice (3.8) splňujícího (3.42)–(3.44). Pak funkce

$$y(x) = \begin{cases} y_1(x - x_1) & \text{pro } x \in (-\infty, x_1), \\ y_c & \text{pro } x \in \langle x_1, x_2 \rangle, \\ y_3(x - x_2) & \text{pro } x \in (x_2, \infty), \end{cases}$$

je řešením úlohy (3.1), (3.2) splňující (3.4)–(3.6). \square

Dále uvedeme důkaz věty 3.2.

Důkaz věty 3.2. Funkce y je nekonstantní řešení úlohy (3.1), (3.2), existuje proto $\hat{x} \in \mathbb{R}$ takové, že buď

$$y(\hat{x}) \in (y_d, y_0), \quad (3.48)$$

nebo

$$y(\hat{x}) \in (y_0, y_c). \quad (3.49)$$

Připustme nejprve, že platí (3.48). Potom z (3.2) plyne, že existuje $x_0 \in \mathbb{R}$ takové, že $y(x_0) = \min\{y(x) : x \in \mathbb{R}\}$. Funkce y je spojitě diferencovatelná, a proto

$$y'(x_0) = 0 \quad \text{a} \quad y(x_0) \in (y_d, y_0). \quad (3.50)$$

Avšak y je řešením rovnice (3.1), což znamená mimo jiné, že

$$[y'(x_0)]^2 = h(y(x_0)) - 1,$$

kde funkce h je dána vztahem (3.9), což je vzhledem k (3.23) ve sporu s (3.50). Dosažený spor dokazuje, že platí (3.49).

Z (3.2) nyní plyne, že existují $\hat{x}_1 < \hat{x} < \hat{x}_2$ takové, že

$$y(\hat{x}_1) \in (y_0, y_c), \quad y'(\hat{x}_1) > 0, \quad (3.51)$$

$$y(\hat{x}_2) \in (y_0, y_c), \quad y'(\hat{x}_2) < 0. \quad (3.52)$$

Položme

$$a = \inf\{x < \hat{x}_1 : y'(t) > 0 \text{ pro } t \in \langle x, \hat{x}_1 \rangle\}, \\ x_1 = \sup\{x > \hat{x}_1 : y'(t) > 0 \text{ pro } t \in \langle \hat{x}_1, x \rangle\}.$$

Vzhledem k (3.51) a (3.52) platí $-\infty \leq a < x_1 < \infty$ a

$$y'(x) > 0 \text{ pro } x \in (a, x_1). \quad (3.53)$$

Navíc, funkce y je spojitě diferencovatelná, a proto platí

$$y'(x_1) = 0,$$

jinak se dostaneme do sporu s definicí hodnoty x_1 . Z rovnice (3.1) a vztahu (3.9) plyne $h(y(x_1)) = 1$, čímž vzhledem k (3.14) získáme, že $y(x_1) = y_c$. Vezmeme-li nyní v úvahu (3.53), z rovnice (3.1) vyplývá, že funkce y je na (a, x_1) řešením rovnice (3.7).

Ukažme, že $a = -\infty$. Vskutku, připuštěme, že $a > -\infty$. Pak ze skutečnosti, že funkce y je spojitě diferencovatelná plyne $y'(a) = 0$, neboť jinak se dostaneme do sporu s definicí hodnoty a . Z rovnice (3.1) a vztahu (3.9) plyne $h(y(a)) = 1$, čímž vzhledem k (3.14) získáme

$$y(a) = y_0,$$

což je spor s tvrzením důsledku 3.10. Řešení y tedy splňuje (3.4) a $y(x_1) = y_c$. Navíc je dokázána platnost tvrzení A).

Položme

$$\begin{aligned} x_2 &= \inf\{x < \hat{x}_2 : y'(t) < 0 \text{ pro } t \in \langle x, \hat{x}_2 \rangle\}, \\ b &= \sup\{x > \hat{x}_2 : y'(t) < 0 \text{ pro } t \in \langle \hat{x}_2, x \rangle\}. \end{aligned}$$

Potom, vzhledem k (3.51) a (3.52) platí $-\infty < x_2 < b \leq \infty$ a

$$y'(x) < 0 \text{ pro } x \in (x_2, b). \quad (3.54)$$

Funkce y je navíc spojitě diferencovatelná, a platí tedy

$$y'(x_2) = 0,$$

jinak se totiž dostaneme do sporu s definicí hodnoty x_2 . Opět, podobně jako výše, z rovnice (3.1) plyne $h(y(x_2)) = 1$, čímž vzhledem k (3.14) dostaneme $y(x_2) = y_c$. Vezmeme-li v úvahu (3.54), z rovnice (3.1) vyplývá, že funkce y je na (x_2, b) řešením rovnice (3.8).

Ukažme nyní, že $b = \infty$. Pripuštěme, že $b < \infty$. Pak z faktu, že funkce y je spojitě diferencovatelná, plyne $y'(b) = 0$, neboť jinak se dostaneme do sporu s definicí hodnoty b . Tím opět podobně jako výše získáme

$$y(b) = y_0,$$

což je spor s důsledkem 3.11. Řešení y tedy splňuje (3.6) a $y(x_2) = y_c$. Navíc je dokázána platnost tvrzení B).

Nyní z výše uvedených úvah plyne, že $y'(x) = 0$ pro každé $x \in (x_1, x_2)$. Odtud a z výše dokázané vlastnosti, že $y(x_1) = y(x_2) = y_c$, plyne platnost (3.5).

Zbývá dokázat tvrzení C). Z tvrzení B) a vlastností (3.6) a (3.5) vyplývá, že funkce

$$\bar{y}(x) := y(x_1 + x_2 - x) \text{ pro } x \in (-\infty, x_1) \quad (3.55)$$

je řešením rovnice (3.7) na intervalu $(-\infty, x_1)$ splňující

$$\bar{y}'(x) > 0 \text{ pro } x \in (-\infty, x_1), \quad \bar{y}(x_1) = y_c.$$

Avšak y je také řešením rovnice (3.7) a splňuje

$$y'(x) > 0 \text{ pro } x \in (-\infty, x_1), \quad y(x_1) = y_c.$$

Z důsledku 3.10 tedy dostaneme

$$y(x) = \bar{y}(x) \text{ pro } x \in (-\infty, x_1),$$

z čehož, vzhledem k (3.55), plyne platnost tvrzení C). □

Aktivovaný tvar dislokace není okrajovou úlohou (3.1), (3.2) daný jednoznačně, avšak každé řešení úlohy (3.1),(3.2) určuje stejnou hodnotu aktivační entalpie H_σ^* .

Tvrzení 3.12. *Hodnota minima aktivační entalpie při daném $\sigma > 0$ je rovna*

$$H_\sigma^* = 2 \int_{y_0}^{y_c} \sqrt{[V(t)]^2 - [V(y_0) + \sigma b(t - y_0)]^2} dt. \quad (3.56)$$

Důkaz. Označme y_A aktivovaný tvar dislokace, tj. necht y_A je řešení úlohy (3.1), (3.2). Z věty 3.2 plyne, že existují $x_1 \leq x_2$ tak, že y_A splňuje (3.5) a A)–C). Potom integrál

$$H_\sigma^* = H_\sigma(y_A) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[V(y_A(x)) \sqrt{1 + [y_A'(x)]^2} - V(y_0) - \sigma b(y_A(x) - y_0) \right] dx$$

lze rozdělit na dva samostatné integrály

$$\begin{aligned} H_\sigma^* &= \int_{x_1}^{x_2} \left[V(y_A(x)) \sqrt{1 + [y_A'(x)]^2} - V(y_0) - \sigma b(y_A(x) - y_0) \right] dx + \\ &+ 2 \int_{-\infty}^{x_1} \left[V(y_A(x)) \sqrt{1 + [y_A'(x)]^2} - V(y_0) - \sigma b(y_A(x) - y_0) \right] dx. \end{aligned}$$

Po dosazení vlastnosti (3.5) do prvního integrálu získáme

$$\int_{x_1}^{x_2} [V(y_c) - V(y_0) - \sigma b(y_c - y_0)] dx.$$

Z vlastnosti Peierlsovy bariéry a definice hodnoty y_c plyne, že $V(y_0) + \sigma b(y_c - y_0) = V(y_c)$, a tím dostaneme

$$\int_{x_1}^{x_2} [V(y_c) - (V(y_0) + \sigma b(y_c - y_0))] dx = \int_{x_1}^{x_2} [V(y_c) - V(y_c)] dx = 0.$$

Hodnota minima aktivační entalpie je tedy rovna

$$H_\sigma^* = 2 \int_{-\infty}^{x_1} \left[V(y_A(x)) \sqrt{1 + [y_A'(x)]^2} - (V(y_0) + \sigma b(y_A(x) - y_0)) \right] dx.$$

Za $y_A'(x)$ dosadíme ze vztahu (3.7), tj.

$$H_\sigma^* = 2 \int_{-\infty}^{x_1} \left[V(y_A(x)) \frac{V(y_A(x))}{V(y_0) + \sigma b(y_A(x) - y_0)} - (V(y_0) + \sigma b(y_A(x) - y_0)) \right] dx,$$

a provedeme několik úprav

$$\begin{aligned} H_\sigma^* &= 2 \int_{-\infty}^{x_1} [V(y_0) + \sigma b(y_A(x) - y_0)] \left\{ \left[\frac{V(y_A(x))}{V(y_0) + \sigma b(y_A(x) - y_0)} \right]^2 - 1 \right\} dx = \\ &= 2 \int_{-\infty}^{x_1} [V(y_0) + \sigma b(y_A(x) - y_0)] \left\{ \sqrt{\left[\frac{V(y_A(x))}{V(y_0) + \sigma b(y_A(x) - y_0)} \right]^2 - 1} \right\}^2 dx. \end{aligned}$$

Funkce y_A je řešením rovnice (3.7) na $(-\infty, x_1)$, a proto dostáváme

$$H_\sigma^* = 2 \int_{-\infty}^{x_1} [V(y_0) + \sigma b(y_A(x) - y_0)] \left\{ \sqrt{\left[\frac{V(y_A(x))}{V(y_0) + \sigma b(y_A(x) - y_0)} \right]^2 - 1} \right\} y_A'(x) dx.$$

Lze tedy psát

$$H_\sigma^* = 2 \int_{y_0}^{y_c} [V(y_0) + \sigma b(t - y_0)] \sqrt{\left[\frac{V(t)}{V(y_0) + \sigma b(t - y_0)} \right]^2 - 1} dt,$$

neboť y_A splňuje (3.2) a (3.5), odkud po úpravě získáme

$$H_\sigma^* = 2 \int_{y_0}^{y_c} \sqrt{[V(t)]^2 - [V(y_0) + \sigma b(t - y_0)]^2} dt,$$

tj. platí (3.56). □

Závěr

Cílem této práce bylo seznámit se se základy termodynamického popisu dislokačního skluzu v BCC kovech. Dále také s použitím Beltramiho identity v termodynamickém popisu dislokačního skluzu a odvozením okrajové úlohy pro aktivovaný tvar dislokace. Hlavním cílem práce je však kvalitativní analýza získané okrajové úlohy a interpretace jejích řešení v souvislosti s aktivovaným tvarem dislokace.

Nejprve bylo potřeba odvodit vztah pro aktivační entalpii z termodynamického popisu dislokačního skluzu. Z něj jsme následně pomocí Beltramiho identity získali obyčejnou diferenciální rovnici doplněnou o dvě okrajové podmínky. Kvalitativní analýza získané diferenciální rovnice přirozeně vede na vyšetřování vlastností dvou obyčejných diferenciálních rovnic 1. řádu v normálním tvaru, o kterých jsme dokázali, že mají právě dvě, až na posunutí, nekonstantní řešení. Dále jsme dokázali, že tyto dvě rovnice mají v jistém smyslu symetrická řešení.

Hlavní výsledky dokázané v bakalářské práci jsou věty 3.1 a 3.2. Věta 3.1 se týká existence řešení studované okrajové úlohy. Mimo jiné z ní vyplývá, že hledané řešení není jediné. Věta 3.2 však ukazuje, že všechna řešení studované okrajové úlohy jsou si v jistém smyslu podobná. Na závěr, v tvrzení 3.12, je odvozen výraz pro hodnotu minima aktivační entalpie při daném smykovém napětí.

Literatura

- [1] DORN, John E. a Stanley RAJNAK. Nucleation of kink pairs and the Peierls' mechanism of plastic deformation, Trans. AIME, 1964.
- [2] FRANČŮ, Jan. Obyčejné diferenciální rovnice [online]. 2015 [cit. 2019-05-11]. Dostupné z: <http://www.mat.fme.vutbr.cz/Home/francu/soubory-ke-stazeni>
- [3] GRÖGER, Roman. Multiscale modeling of plasticity of BCC metals: Víceúrovňové modelování plasticity BCC kovů : zkrácená verze habilitační práce pro obor materiálové vědy a inženýrství. Brno: VUTIUM, 2015. ISBN 978-80-214-5256-5.
- [4] KALAS, Josef a Miloš RÁB. Obyčejné diferenciální rovnice. Brno: Vydavatelství Masarykovy univerzity, 1995. ISBN 80-210-1130-0.
- [5] ŠREMR, Jiří. Differential equations in modelling motion of dislocations. International Workshop QUALITDE-2018: Abstract [online]. 2018, 179-182 [cit. 2019-05-12]. ISSN 1512-3391. Dostupné z: http://www.rmi.tsu.ge/eng/QUALITDE-2018/Abstracts_workshop_2018.pdf