

# ВЕСТНИК



**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО  
ГОСУДАРСТВЕННОГО  
УНИВЕРСИТЕТА**

**2022  
Т. 14, № 4**

ISSN 2075-809X (Print)  
ISSN 2409-6547 (Online)

**СЕРИЯ**

## **«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»**

Решением ВАК России включен в Перечень рецензируемых научных изданий

**Учредитель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Южно-Уральский государственный университет  
(национальный исследовательский университет)»**

Основной целью серии «Математика. Механика. Физика» является публикация и распространение оригинальных результатов научных исследований в области математики, механики и физики, а также их приложений в естественных, технических и экономических науках.

### **Редакционная коллегия**

д.ф.-м.н., профессор **Загребина С.А.** (гл. редактор)  
к.ф.-м.н., доцент **Голубев Е.В.** (отв. секретарь)  
д.ф.-м.н., профессор **Бескачко В.П.** (ЮУрГУ)  
к.ф.-м.н., профессор **Заляпин В.И.** (ЮУрГУ)  
д.ф.-м.н., профессор **Ковалев Ю.М.** (ЮУрГУ)

### **Редакционный совет**

д.т.н., профессор **Богомолов А.В.** (Государственный научный центр Российской Федерации – Федеральный медицинский биофизический центр имени А.И. Бурназяна, г. Москва)  
д.ф.-м.н., профессор **Бровко Г.Л.** (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва)  
д.ф.-м.н., профессор **Бучельников В.Д.** (Челябинский государственный университет, г. Челябинск)  
профессор **Гундетти Д.** (Болонский университет, г. Болонья, Италия)  
д.ф.-м.н., профессор **Жуковский В.И.** (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва)  
к.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Заляпин И.В.** (Университет Невады, г. Рино, США)  
д.ф.-м.н., профессор **Зелик С.В.** (Университет Суррея, г. Гилфорд, Великобритания)  
д.ф.-м.н., профессор **Короткий А.И.** (Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, г. Екатеринбург)  
Ph. D., профессор **Ким Джейван** (Корейский институт передовых исследований KIAS, г. Сеул, Южная Корея)  
Ph. D., профессор **Ким Кишик** (INHA-Университет, г. Инчон, Южная Корея)  
д.ф.-м.н., профессор **Кундикова Н.Д.** (Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург)  
д.ф.-м.н., профессор **Меньших В.В.** (Воронежский институт МВД Российской Федерации, г. Воронеж)  
д.ф.-м.н., профессор **Пинчук С.И.** (Университет штата Индиана, г. Блумингтон, США)  
Ph. D., ассистент-профессор **Пузырев Е.С.** (Университет Вандербильта, г. Нэшвилл, США)  
д.т.н., профессор **Равшанов Н.К.** (Ташкентский университет информационных технологий, г. Ташкент, Узбекистан)  
д.т.н., профессор **Уткин Л.В.** (Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург)  
Prof. dr. ir. **Ферпуст И.** (Католический университет, г. Лёвен, Бельгия)  
д.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Штраус В.А.** (Университет Симона Боливара, г. Каракас, Венесуэла)



# BULLETIN

OF THE SOUTH URAL  
STATE UNIVERSITY

2022

Vol. 14, no. 4

SERIES

“MATHEMATICS.  
MECHANICS. PHYSICS”

ISSN 2075-809X (Print)  
ISSN 2409-6547 (Online)

---

Vestnik Yuzhno-Ural'skogo Gosudarstvennogo Universiteta.  
Seriya “Matematika. Mekhanika. Fizika”

---

## South Ural State University

The main purpose of the series “Mathematics. Mechanics. Physics” is to promote the results of research in mathematics, mechanics and physics, as well as their applications in natural, technical and economic sciences.

### Editorial Board

- S.A. Zagrebina**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**E.V. Golubev**, Candidate of Physics and Mathematics, Associated Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**V.P. Beskachko**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**V.I. Zalyapin**, Candidate of Physics and Mathematics, Associated Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**Yu.M. Kovalev**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

### Editorial Council

- A.V. Bogomolov**, Doctor of Engineering, Professor, State Scientific Center of the Russian Federation – A.I. Burnazyan Federal Medical Biophysical Center, the Russian Federal Medical-Biological Agency, Moscow, Russian Federation  
**G.L. Brovko**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow State University, Moscow, Russian Federation  
**V.D. Buchelnikov**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**D. Guidetti**, Full Professor of Mathematical Analysis, University of Bologna, Bologna, Italy  
**V.I. Zhukovsky**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow State University, Moscow, Russian Federation  
**I.V. Zalyapin**, Candidate of Physics and Mathematics, Ph. D., Professor, University of Nevada, Reno, United States of America  
**S.V. Zelik**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, University of Surrey, Guildford, United Kingdom  
**A.I. Korotkii**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation  
**Jaewan Kim**, Ph. D., Professor, Korea Institute for Advanced Study KIAS, Seoul, South Korea  
**Kisik Kim**, Ph. D., Professor, INHA-University, Incheon, South Korea  
**N.D. Kundikova**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Institute of Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation  
**V.V. Menshikh**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Voronezh Institute of Russian Ministry of Internal Affairs, Voronezh, Russian Federation  
**S.I. Pinchuk**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Indiana University, Bloomington, United States of America  
**Y.S. Puzyrev**, Ph. D., Assistant Professor, Vanderbilt University, Nashville, United States of America  
**N.K. Ravshanov**, Doctor of Engineering, Professor, Tashkent University of Information Technologies, Tashkent, Uzbekistan  
**L.V. Utkin**, Doctor of Engineering, Professor, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation  
**I. Verpoest**, Dr. ir., Professor, Catholic University, Leuven, Belgium  
**V.A. Strauss**, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, University of Simon Bolivar, Caracas, Venezuela

## СОДЕРЖАНИЕ

### Математика

ДЕРКУНОВА Е.А. Асимптотическое разложение и асимптотическая формула для корня трансцендентного уравнения с параметром.....	5
МАЙЕР Ф.Ф., ТАСТАНОВ М.Г., УТЕМИСОВА А.А. Геометрические свойства интегрального оператора Бернацкого.....	12
МЕНЬШИХ В.В., НИКИТЕНКО В.А. Минимизация представлений логических функций в базисах Шеффера и Пирса.....	20
ПЕРЕВОЗЧИКОВА К.В., МАНАКОВА Н.А. Исследование задачи граничного управления и финального наблюдения для математической модели нелинейной фильтрации.....	28
СЕДОВ А.И. Определение непрерывного запаздывания в спектральной задаче для оператора Чебышёва первого рода.....	34
СУХИНОВ А.И., ПРОЦЕНКО С.В., ПРОЦЕНКО Е.А. Фильтрация натуральных данных для численного моделирования трехмерных турбулентных течений с применением подхода LES.....	40

### Физика

БЕЛЕНКОВ М.Е., ГРЕШНЯКОВ В.А., ЧЕРНОВ В.М. Моделирование полиморфных разновидностей функционализированного гидроксильной группой L4-6-12 графена.....	52
СОЗЫКИНА Е.Р., СОЗЫКИН С.А. Атомная и электронная структуры хиральных золотых нанотрубок.....	59
ЧЕРНОВОЛ П.И., МИРЗОЕВ А.А. Молекулярно-динамическое моделирование структуры и свойств стеклообразной подложки SiO <sub>2</sub> в широком диапазоне температур.....	65

### Персоналии

Ковалев Юрий Михайлович – к 70-летию со дня рождения.....	74
Мирзоев Александр Аминулаевич – к 70-летию со дня рождения.....	77

# CONTENTS

## Mathematics

DERKUNOVA E.A. Asymptotic Decomposition and Asymptotic Formula for the Root of the Transcendental Equation with a Parameter.....	5
MAYER F.F., TASTANOV M.G., UTEMISOVA A.A. Geometric Properties of the Bernatsky Integral Operator.....	12
MENSHIKH V.V., NIKITENKO V.A. Minimization of Representations of the Logical Function in Schaeffer and Pierce Bases .....	20
PEREVOZCHIKOVA K.V., MANAKOVA N.A. Study of the Objectives of Boundary Control and Final Observation for the Mathematical Model of Non-Linear Filtration .....	28
SEDOV A.I. Determining of Continuous Delay in a Spectral Problem for Chebyshev Operator of the First Kind.....	34
SUKHINOV A.I., PROTSENKO S.V., PROTSENKO E.A. Field Data Filtering for the Digital Simulation of Three-Dimensional Turbulent Flows using the LES Approach.....	40

## Physics

BELENKOV M.E., GRESHNYAKOV V.A., CHERNOV V.M. Modeling the Polymorphic Varieties of L4-6-12 Graphene Functionalized by Hydroxyl Group.....	52
SOZYKINA E.R., SOZYKIN S.A. Atomic and Electronic Structures of Chiral Gold Nanotubes.....	59
CHERNOVOL P.I., MIRZOEV A.A. Molecular Dynamic Modeling of Structure and Properties of SiO <sub>2</sub> Glass Substrate in a Broad Temperature Range.....	65

## Personalia

Yuriy Kovalev – to the 70th Birthday Anniversary.....	74
Aleksandr Mirzoev – to the 70th Birthday Anniversary.....	77

## АСИМПТОТИЧЕСКОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ И АСИМПТОТИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ КОРНЯ ТРАНСЦЕНДЕНТНОГО УРАВНЕНИЯ С ПАРАМЕТРОМ

**Е.А. Деркунова**

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация  
E-mail: [derkunovaea@susu.ru](mailto:derkunovaea@susu.ru)

**Аннотация.** Рассмотрено классическое конечное уравнение, содержащее параметр. При некотором условии на левую часть этого уравнения, после замены переменной она сводится к такому виду, что нетрудно провести классификацию случаев соотношений между составляющими ее частями. Каждый случай влечет за собой определенную ситуацию с существованием решения исследуемого уравнения, и показано, что оно может иметь, по сути, один и тот же стандартный вид. Для последнего приведен фундаментальный результат построения асимптотического разложения. Далее проводится доказательство формулы для вида коэффициентов искомого разложения, использующее индуктивный прием. Другой подход к поиску решения указанного уравнения связан с возможностью получения асимптотической формулы, с виду напоминающей бесконечную цепную дробь. Сначала естественным образом строятся рекуррентно приближения как последовательно уточняющиеся неравенства для решения, затем строго доказывается сходимость этих приближений. Поточечная сходимость отдельно четных и нечетных приближений вызвана их монотонностью и ограниченностью, а дополнительное условие непрерывной дифференцируемости входящих данных уравнения гарантирует и равномерную сходимость приближений к решению. В заключении приведен простой пример такой цепной дроби.

**Ключевые слова:** трансцендентное уравнение; формула обращения Лагранжа; асимптотическое разложение; асимптотическая формула; малый и большой параметры; признак Вейерштрасса.

**1. Постановка задачи.** Рассмотрим конечное уравнение ( $\varepsilon$  – малый параметр) [1]:

$$\frac{x}{f(x)} = \varepsilon. \quad (1)$$

Не ограничивая общности, будем считать параметр  $\varepsilon > 0$ , переменную  $x$  и функцию  $f(x)$  вещественными, причем  $f(x)$  достаточное число раз дифференцируемой. Подчиним функцию следующему условию.

*Условие 1.*  $\lim_{x \rightarrow 0} f(x) \neq 0$ . Уравнение (1) – частный вид следующего уравнения:

$$F(x) = \varepsilon. \quad (2)$$

Решаем это уравнение графически. Очевидно, при условии, что  $F(x) > t$  для всех  $x$  из области определения, где величина постоянной  $t$  не зависит от малого  $\varepsilon$ , решений уравнения (2) нет. В противном случае, если параметр  $\varepsilon$  малый, то решения (2) – корни этого конечного уравнения – зависят от параметра:  $x = x_i(\varepsilon)$ . Тогда точки с координатами  $(x_i(\varepsilon); \varepsilon)$  будут находиться на плоскости  $xOy$  вблизи точек с координатами  $(x_i; 0)$ , где

$$F(x_i) = 0 \quad (3)$$

– уравнение, вырожденное к уравнению (2). Вблизи каждого из корней (3) можно проделать замену переменной  $x = x_i + t(\varepsilon)$ , сводящую (2) к виду:

$$\frac{\varphi(t)}{\psi(t)} = \varepsilon. \quad (4)$$

При этом имеют место следующие ситуации соотношений числителя и знаменателя дроби из левой части уравнения (4):

		1	2	3
		$\lim_{t \rightarrow 0} \psi(t) = 0$	$\lim_{t \rightarrow 0} \psi(t) = A \begin{matrix} \neq 0 \\ \neq \infty \end{matrix}$	$\lim_{t \rightarrow \infty} \psi(t) = \infty$
1	$\lim_{t \rightarrow 0} \varphi(t) = 0$	случай (1,1)	случай (1,2)	случай (1,3)
2	$\lim_{t \rightarrow 0} \varphi(t) = A \begin{matrix} \neq 0 \\ \neq \infty \end{matrix}$	решения нет	решения нет	случай (2,3)
3	$\lim_{t \rightarrow \infty} \varphi(t) = \infty$	решения нет	решения нет	случай (3,3)

Рассмотрим ситуации (1,1) и (3,3). В том и другом случаях выводы о наличии решения различаются в зависимости от того, каково поведение числителя по отношению к знаменателю. Возможно, что 1)  $\varphi(t)$  и  $\psi(t)$  – бесконечно малые (или бесконечно большие) одного порядка при  $t \rightarrow 0$ ; 2)  $\psi(t) = o(\varphi(t))$  при  $t \rightarrow 0$  и 3)  $\varphi(t) = o(\psi(t))$  при  $t \rightarrow 0$ . Корней уравнение (4) не имеет, если реализуется подслучай 1) или 2).

Пусть имеется (1,1) при наличии подслучая 3), тогда числитель  $\varphi(t)$  можно представить как  $\varphi(t) = \psi(t)\chi(t)$ , где функция  $\chi(t) = O(\psi(t))$  при  $t \rightarrow 0$ . Но тогда  $\chi(t)$  – бесконечно малая при  $t \rightarrow 0$ , и уравнение  $\chi(t) = \varepsilon$  будет иметь решение. Ясно, что бесконечно малую при  $t \rightarrow 0$  функцию  $\chi(t)$  после замены переменной всегда можно представить в виде  $\frac{x}{f(x)}$ , где  $x \rightarrow 0$  и функция  $f(x)$  подчиняется Условию 1. А значит уравнение (4) свелось к уравнению вида (1).

Пусть имеем (3,3) и одновременно подслучай 3). При этом уравнение (4) можно переписать в виде:

$$\frac{1/\psi(t)}{1/\varphi(t)} = \varepsilon, \quad (5)$$

а условие 3) для бесконечно больших  $\varphi(t)$  и  $\psi(t)$  означает также, что для соответствующих бесконечно малых при  $t \rightarrow 0$  функций  $1/\varphi(t)$  и  $1/\psi(t)$ , имеет место соотношение порядка:  $1/\psi(t) = o(1/\varphi(t))$  при  $t \rightarrow 0$ . Аналогично тому, как это сделано выше для случая (1,1), 3), уравнение (5) сведется к уравнению (1).

Рассмотрим случай (1,2). Тогда эффективной будет замена переменной  $x = \varphi(t)$ , причем окажется, что  $f(x) = \psi(\varphi^{-1}(x))$  и уравнение (4) приобретет вид (1), а выполнение Условия 1 будет гарантировано.

Рассмотрим ситуацию с (2,3). Достаточно переписать уравнение (4) в виде (5), тогда для функций  $1/\varphi(t)$  и  $1/\psi(t)$  реализуется случай (1,2). Сделаем замену переменной  $x = 1/\psi(t)$ , при этом  $f(x) = 1/\varphi[\psi^{-1}(1/x)]$ , а Условие 1 автоматически выполняется.

Рассмотрим, наконец, (1,3). Представим уравнение (4) в виде:  $\chi(t) = \varepsilon$ , где для бесконечно малой при  $t \rightarrow 0$  функции  $\chi(t)$  имеем выражение:  $\chi(t) = \varphi(t) \cdot [1/\psi(t)]$ . Ясно, что как уже отмечалось, можно произвести соответствующую замену переменной, сводящую уравнение (4) к виду (1).

Тем самым классификация типов уравнений (4), сводящихся к уравнению вида (1), завершена.

**2. Построение асимптотического разложения.** Следуя классическим результатам из [1, 2], будем искать корень уравнения (1) в виде ряда по степеням  $\varepsilon$ , а именно

$$x(\varepsilon) = c_1\varepsilon + c_2\varepsilon^2 + \dots + c_k\varepsilon^k + \dots, \quad (6)$$

где коэффициенты разложения подлежат определению.

Здесь необходимо отметить, что источники [1, 2] дают готовую формулу для коэффициентов этого разложения, а [1] ссылается на [3], в котором приводится соответствующее утверждение. Это теорема Лагранжа (1770 г.), вывод которой о существовании корня (1) и его разложении дается следующей формулировкой:

Пусть  $g(z)$  и  $f(z)$  – функции от  $z$ , аналитические на контуре  $C$ , окружающем точку  $a$ , и внутри него, и пусть  $\varepsilon$  таково, что для всех точек  $z$  внутри контура  $C$  выполняется неравенство:

$$|\varepsilon f(z)| < |z - a|;$$

тогда уравнение

$$\zeta = a + \varepsilon f(\zeta),$$

рассматриваемое как уравнение относительно  $\zeta$ , имеет один корень внутри контура  $C$ ; далее, любая функция от  $\zeta$ , аналитическая на и внутри  $C$ , может быть разложена в степенной ряд по  $\varepsilon$  по формуле

$$g(\zeta) = g(a) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\varepsilon^k}{k!} \frac{d^{k-1}}{dz^{k-1}} \left\{ g'(z)(f(z))^k \right\} \Big|_{z=a}.$$

Применительно к ряду (6) – решению уравнения (1) – получается соотношение:

$$c_k = \frac{1}{k!} \left\{ \frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} (f(x))^k \right\} \Big|_{x=0}. \quad (7)$$

Покажем, что формулу (7) можно доказать непосредственно для вещественного аргумента, исходя из вида ряда (6) и решаемого уравнения.

Во-первых, заметим, что  $c_k = \frac{1}{k!} x_\varepsilon^{(k)} \Big|_{\varepsilon=0}$ , поэтому для нахождения  $k$ -ого коэффициента потребуется определить последовательно производные вплоть до  $k$ -ого порядка по аргументу  $\varepsilon$  от неявной функции  $x(\varepsilon)$ , задаваемой уравнением (1). Во-вторых, запишем его так:

$$x = \varepsilon f(x).$$

Продифференцируем его по  $\varepsilon$ , считая  $x = x(\varepsilon)$ , имеем:  $x'_\varepsilon = f(x) + \varepsilon f'(x)x'_\varepsilon$ , откуда

$$x'_\varepsilon = \frac{f(x)}{1 - \varepsilon f'(x)}, \quad (8)$$

поскольку  $x(0) = 0$ , полагая  $\varepsilon = 0$ , получаем:  $c_1 = f(0)$ , что согласуется с формулой (7) при  $k = 1$ .

Найдем выражение для второй производной:

$$x''_{\varepsilon\varepsilon} = \frac{f'(x)x'_\varepsilon}{1 - \varepsilon f'(x)} - \frac{f(x)}{(1 - \varepsilon f'(x))^2} \left[ -f'(x) - \varepsilon f''(x)x'_\varepsilon \right], \text{ или с учетом формулы (8):}$$

$$x''_{\varepsilon\varepsilon} = \frac{2f(x)f'(x)}{(1 - \varepsilon f'(x))^2} + \varepsilon \frac{(f(x))^2 f''(x)}{(1 - \varepsilon f'(x))^3}, \quad (9)$$

и так как  $2f(x)f'(x) = \frac{d}{dx}(f(x)^2)$ , то полагая в (9)  $\varepsilon = 0$ , имеем формулу (7) при  $k = 2$ :

$$c_2 = \frac{1}{2!} \frac{d}{dx} (f(x)^2) \Big|_{x=0} = f(0)f'(0).$$

Третью производную получим в виде:

$$x'''_{\varepsilon\varepsilon\varepsilon} = \frac{\frac{d^2}{dx^2}(f(x)^2)f(x)}{(1 - \varepsilon f'(x))^3} - 2 \frac{\frac{d}{dx}(f(x)^2)}{(1 - \varepsilon f'(x))^3} \left[ -f'(x) - \varepsilon f''(x)x'_\varepsilon \right] + \frac{(f(x))^2 f''(x)}{(1 - \varepsilon f'(x))^3} + \varepsilon \frac{d}{d\varepsilon} \left[ \frac{(f(x))^2 f''(x)}{(1 - \varepsilon f'(x))^3} \right],$$

что приводит нас к следующему соотношению:

$$x_{\varepsilon\varepsilon\varepsilon}''' = \frac{\frac{d^2}{dx^2}(f(x)^3)}{(1-\varepsilon f'(x))^3} + 2\varepsilon \frac{\frac{d}{dx}(f(x)^2)f(x)f''(x)}{(1-\varepsilon f'(x))^4} + \varepsilon \frac{d}{d\varepsilon} \left[ \frac{f(x)^2 f''(x)}{(1-\varepsilon f'(x))^3} \right], \quad (10)$$

где была использована формула Лейбница:

$$\frac{d^2}{dx^2}(f(x)^2)f(x) + 2 \frac{d}{dx}(f(x)^2)f'(x) + f(x)^2 f''(x) = \frac{d^2}{dx^2}(f(x)^3).$$

Как видно из (10), при  $k=3$  приходим к формуле (7), и

$$c_3 = \frac{1}{3!} \frac{d^2}{dx^2}(f(x)^3)|_{x=0} = f(0)f'(0)^2 + \frac{1}{2} f(0)^2 f''(0).$$

Вычисляя четвертую производную, имеем:

$$\begin{aligned} x_{\varepsilon}^{IV} &= \frac{\frac{d^3}{dx^3}(f(x)^3)f(x)}{(1-\varepsilon f'(x))^4} + 3 \frac{\frac{d^2}{dx^2}(f(x)^3)}{(1-\varepsilon f'(x))^4} [f'(x) + \varepsilon f''(x)x_{\varepsilon}'] + 2 \frac{\frac{d}{dx}(f(x)^2)f(x)f''(x)}{(1-\varepsilon f'(x))^4} + \\ &+ 2\varepsilon \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ \frac{\frac{d}{dx}(f(x)^2)f(x)f''(x)}{(1-\varepsilon f'(x))^4} \right\} + \frac{2f(x)^2 f'(x)f''(x) + f(x)^3 f'''(x)}{(1-\varepsilon f'(x))^4} + 3 \frac{f(x)^2 f''(x)}{(1-\varepsilon f'(x))^4} [f'(x) + \varepsilon f''(x)x_{\varepsilon}'] + \\ &+ \varepsilon \frac{d^2}{d\varepsilon^2} \left[ \frac{f(x)^2 f''(x)}{(1-\varepsilon f'(x))^3} \right]. \end{aligned}$$

Теперь соберем слагаемые, не содержащие  $\varepsilon$ . Учитывая то обстоятельство, что

$$\frac{d^3}{dx^3}(f(x)^3)f(x) + 3 \frac{d^2}{dx^2}(f(x)^3)f'(x) + [(4+2+3)f(x)^2 f'(x)f''(x)] + f(x)^3 f'''(x) = \frac{d^3}{dx^3}(f(x)^4),$$

где учтено, что выражение в квадратных скобках равно  $3 \frac{d}{dx}(f(x)^3)f''(x)$ , и применена формула Лейбница, окончательно для четвертой производной получим:

$$\begin{aligned} x_{\varepsilon}^{IV} &= \frac{\frac{d^3}{dx^3}(f(x)^4)}{(1-\varepsilon f'(x))^4} + 3\varepsilon \frac{\frac{d^2}{dx^2}(f(x)^3)f(x)f''(x)}{(1-\varepsilon f'(x))^5} + 2\varepsilon \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ \frac{\frac{d}{dx}(f(x)^2)f(x)f''(x)}{(1-\varepsilon f'(x))^4} \right\} + \\ &+ 3\varepsilon \frac{f(x)^3 f''(x)^2}{(1-\varepsilon f'(x))^5} + \varepsilon \frac{d^2}{d\varepsilon^2} \left[ \frac{f(x)^2 f''(x)}{(1-\varepsilon f'(x))^3} \right]. \quad (11) \end{aligned}$$

Из представления (11), полагая  $\varepsilon=0$ , приходим к (7) для  $k=4$ . Из-за громоздкости формулы для коэффициента  $c_4$  мы его не выписываем.

В принципе, чтобы убедиться в справедливости формулы (7), поиски коэффициентов разложения ряда (6) можно было бы продолжить, но, как это видно уже на четвертом шаге, сложность формул стремительно растет, и, в общем, неясно, будут ли они обладать какой-то закономерностью в отношении возможности провести доказательство формулы (7) по индукции.

**3. Получение асимптотической формулы.** Здесь мы приведем другой подход к решению уравнения, подобного уравнению (1), прежде всего проделав замену переменной и введя вместо малого параметра  $\varepsilon$  большой параметр  $\lambda > 0$ . Будем решать уравнение

$$xf(x) = \lambda, \quad (12)$$

где функция  $f(x)$  теперь должна удовлетворять следующему условию.

Условие 2.  $f(x) > 0$  – возрастающая, дифференцируемая при  $x > 0$  функция.

Решаем уравнение (12) графически, получаем единственный корень  $x = x(\lambda)$ , причем  $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} x(\lambda) = \infty$ . Наша задача получить для него представление. Для этого заметим, что найдется

такое значение  $\lambda_0$ , что  $\lambda_0 < x$ , но тогда в силу монотонности функции  $f(x)$  будет иметь место неравенство:  $f(\lambda_0) < f(x)$ , а значит,  $\lambda_0 < x = \frac{\lambda}{f(x)} < \frac{\lambda}{f(\lambda_0)}$ . Получили нулевое и первое приближение для корня:

$$x_0 = \lambda_0 < x(\lambda) < \frac{\lambda}{f(\lambda_0)} = x_1.$$

Поскольку  $f(x) < f\left(\frac{\lambda}{f(\lambda_0)}\right)$ , то  $\frac{\lambda}{f(\lambda/f(\lambda_0))} < x < \frac{\lambda}{f(\lambda_0)}$ . То есть возникло второе приближение для корня:

$$x_2 = \frac{\lambda}{f(\lambda/f(\lambda_0))} < x < \frac{\lambda}{f(\lambda_0)} = x_1.$$

В силу неравенства  $f(\lambda/f(\lambda/f(\lambda_0))) < f(x)$ , приходим к третьему приближению для корня:

$$x_2 = \frac{\lambda}{f(\lambda/f(\lambda_0))} < x < \frac{\lambda}{f(\lambda/f(\lambda/f(\lambda_0)))} = x_3.$$

Этот процесс можно продолжить. При этом получаем последовательность приближений с четными индексами, являющимися оценками корня уравнения (12) снизу, и аналогичную последовательность с нечетными номерами в качестве оценки указанного корня сверху.

Докажем следующее утверждение.

**Теорема.** Корень трансцендентного уравнения (12) при Условии 2 определяется асимптотической формулой:

$$x(\lambda) = \frac{\lambda}{f(\lambda/f(\lambda/f(\lambda/\dots/f(\lambda/f(\lambda_0))))}, \quad (13)$$

справедливой при  $\lambda \rightarrow \infty$ .

**Замечание.** Чем больше значение параметра  $\lambda$ , и, вместе с тем, чем больше приближений берется, тем точнее формула (13).

**Доказательство.** Заметим, во-первых, что приближения снизу для (13), как видно из их построения, могут быть получены по рекуррентной формуле:  $x_{2n+2} = \frac{\lambda}{f(\lambda/f(x_{2n}))}$ , где

$n = 0, 1, 2, \dots$ , а  $x_0 = \lambda_0$  выбирается достаточно большой постоянной. Аналогичная формула:  $x_{2n+1} = \frac{\lambda}{f(\lambda/f(x_{2n-1}))}$ , где  $n = 1, 2, \dots$ , а  $x_1 = \lambda/f(\lambda_0)$ , справедлива и для приближений сверху.

Проследим тенденцию изменения каждого четного приближения по отношению к изменению предыдущего ему четного приближения. Для этого вычислим соответствующую производную и определим ее знак:

$$\frac{dx_{2n+2}}{dx_{2n}} = -\frac{\lambda f'(\lambda/f(x_{2n}))}{f^2(\lambda/f(x_{2n}))} \cdot \left( -\frac{\lambda f'(x_{2n})}{f^2(x_{2n})} \right) > 0, \text{ поскольку в силу Усло-}$$

вия 2  $f'(x) > 0$ . Поэтому в процессе перехода от нулевого приближения к большему второму будут возрастать все последующие четные приближения, образуя функциональную последовательность  $\{x_{2n}(\lambda)\}$ . Эта последовательность ограничена сверху заведомо существующим корнем

уравнения (12). Поэтому поточечная сходимость при каждом достаточно большом  $\lambda > \lambda_0$  гарантирована теоремой Вейерштрасса для числовых последовательностей.

Теперь убедимся в сходимости нечетных приближений. Вычисляя соответствующую производную, имеем:  $\frac{dx_{2n+1}}{dx_{2n-1}} > 0$ , то есть  $x_{2n-1}$  и  $x_{2n+1}$  увеличиваются и уменьшаются одновременно.

Теперь заметим, что соотношение, связывающее четное приближение с последующим нечетным, будет иметь вид:  $x_{2n+1} = \frac{\lambda}{f(x_{2n})}$ , и, значит, производная  $\frac{dx_{2n+1}}{dx_{2n}} = -\frac{\lambda f'(x_{2n})}{f^2(x_{2n})} < 0$ . Но мы условились считать  $dx_{2n} > 0$ , тогда  $dx_{2n+1} < 0$ . Поэтому, переходя от нулевого приближения к большему второму, имеем тенденцию убывания функциональной последовательности  $\{x_{2n+1}(\lambda)\}$  нечетных приближений. Эта последовательность ограничена снизу. По теореме Вейерштрасса такая последовательность сходится для любых достаточно больших  $\lambda > \lambda_0$ . Поскольку формула (13) может быть переписана в виде:

$$x(\lambda) = \frac{\lambda}{f(x(\lambda))},$$

то в ней усматриваем решение уравнения (12).

Теперь установим условие равномерной сходимости приближений к корню уравнения (12).

*Условие 3.*  $f(x)$  непрерывно дифференцируемая при  $x > 0$  функция.

После дифференцирования  $x(\lambda)$  из (12) по  $\lambda$  как неявную функцию получим:

$$x'_\lambda = \frac{f(x)}{f^2(x) + \lambda f'_x(x)}.$$

Если эта функция при достаточно больших  $\lambda > \lambda_0$ ,  $x(\lambda) > \lambda_0$  непрерывна, то сходимость приближений будет равномерной. Существуют примеры уравнений (12), когда это именно так. Теорема доказана.

**4. Пример асимптотической формулы.** В качестве примера уравнения (12) приведем следующее соотношение:

$$x(x-1) = \lambda, \quad \lambda \rightarrow \infty. \quad (14)$$

Ясно, что в этом случае в роли функции  $f(x)$  выступает двучлен  $(x-1)$ , и ее возрастание обеспечено. Пусть выбрано нулевое приближение  $\lambda_0$ . Тогда корень квадратного уравнения (14) будет представлять собой бесконечную цепную дробь вида:

$$x(\lambda) = \frac{\lambda}{-1 + \frac{\lambda}{-1 + \frac{\lambda}{-1 + \frac{\lambda}{-1 + \dots}}}}.$$

### Литература

1. де Брёйн, Н.Г.. Асимптотические методы в анализе / Н.Г. де Брёйн. – М.: изд-во иностранной литературы, 1961. – 247 с.
2. Федорюк, М.В. Асимптотика, интегралы и ряды / М.В. Федорюк. – М.: Наука, 1987. – 544 с.
3. Уиттекер, Э.Т. Курс современного анализа / Э.Т. Уиттекер, Дж. Н. Ватсон. – М.: Гос. изд-во физ.-мат. лит-ры, 1963. – Ч. I. – 343 с.

*Поступила в редакцию 1 июля 2022 г.*

### Сведения об авторе

Деркунова Елена Анатольевна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра «Математическое и компьютерное моделирование», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: derkunovaea@susu.ru

**ASYMPTOTIC DECOMPOSITION AND ASYMPTOTIC FORMULA FOR THE ROOT  
OF THE TRANSCENDENTAL EQUATION WITH A PARAMETER****E.A. Derkunova**

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: [derkunovaea@susu.ru](mailto:derkunovaea@susu.ru)

Abstract. We consider the classic finite equation containing a parameter. Under a certain condition on the left side of this equation after replacing the variable it is reduced to the kind that it is not difficult to classify the interrelations between its constituent parts. Every case entails a certain situation with the existence of the solution of the equation under study, and it is shown that it can have, in essence, the same standard form. For the latter one fundamental result of the construction of the asymptotic decomposition is given. Next, the proof of formula for coefficients of the desired decomposition is presented using inductive technique. Another approach to finding a solution of the specified equation is associated with the possibility of obtaining an asymptotic formula in appearance resembling an infinite continued fraction. At first, approximations are naturally constructed recursively as consistently refined inequalities for the solution, and then, the convergence of these approximations is strictly proved. The pointwise convergence of separately even and odd approximations is related to their monotony and limitations, and the additional condition of continuous differentiability of the equation's incoming data also guarantees uniform convergence of approximations to the solution. In conclusion, a simple example of such continued fraction is given.

*Keywords:* transcendental equation; Lagrange inversion formula; asymptotic decomposition; asymptotic formula; small and large parameters; Weierstrass criterion.

**References**

1. de Brijn N.G. *Asymptotic methods in analysis*. Amsterdam, North-Holland publ., 1961, 200 p.
2. Fedoryuk M.V. *Asimptotika, integraly i ryady* (Asymptotics, integrals and series). Moscow, Nauka Publ., 1987, 544 p. (in Russ.).
3. Whittaker E.T., Watson G.N. *A Course of Modern Analysis*. Cambridge, Univ. press, 1915, 560 p.

*Received July 1, 2022***Information about the author**

Derkunova Elena Anatol'evna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Mathematical and Computer Modelling, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: [derkunovaea@susu.ru](mailto:derkunovaea@susu.ru)

## ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИНТЕГРАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА БЕРНАЦКОГО

**Ф.Ф. Майер, М.Г. Тастанов, А.А. Утемисова**

Костанайский региональный университет им. А. Байтурсынова, г. Костанай,  
Республика Казахстан  
E-mail: maiyer@mail.ru

**Аннотация.** Исследование отображений классов регулярных функций с помощью различных операторов в настоящее время стало самостоятельным направлением в геометрической теории функций комплексного переменного. В этом плане известную связь  $f(z) \in S^o \Leftrightarrow g(z) = zf'(z) \in S^*$  классов  $S^o$  и  $S^*$  выпуклых и звездообразных функций можно рассматривать как отображение с помощью дифференциального оператора  $G[f](x) = zf'(z)$  класса  $S^o$  на класс  $S^*$ , то есть  $G: S^o \rightarrow S^*$  или  $G(S^o) = S^*$ .

Толчком к изучению данного круга вопросов стало предположение М. Бернацкого о том, что обратный оператор  $G^{-1}[f](x)$ , переводящий  $S^* \rightarrow S^o$  и тем самым «улучшающий» свойства функций, отображает весь класс  $S$  однолистных функций в себя.

К настоящему времени вышел целый ряд статей, в которых исследуются различные интегральные операторы, в частности, определены множества значений входящих в эти операторы показателей, при которых операторы осуществляют отображение класса  $S$  или его подклассов в себя или в другие подклассы. В настоящей работе найдены значения входящего в обобщенный интегральный оператор Бернацкого параметра, при котором данный оператор преобразует подкласс звездообразных функций, выделяемых условием  $a < \operatorname{Re} zf'(z)/f(z) < b$  ( $0 < a < 1 < b$ ), в класс  $K(\gamma)$  функций, почти выпуклой порядка  $\gamma$ . Результаты статьи обобщают или усиливают ранее известные результаты.

*Ключевые слова:* геометрическая теория функций комплексного переменного; однолистные функции; интегральный оператор Бернацкого; выпуклые; звездообразные и почти выпуклые функции.

### Введение

Пусть  $S^o$  и  $S^*$  – соответственно классы выпуклых и звездообразных функций  $f(z) = z + a_2z^2 + a_3z^3 + \dots$ , регулярных в круге  $E = \{z: |z| < 1\}$ .

Связь между выпуклыми и звездообразными функциями описывается известной схемой (например, [1]):  $f(z) \in S^o \Leftrightarrow g(z) = zf'(z) \in S^*$ , которую можно записать и в несколько иной форме:

$$f(z) = \int_0^z \frac{g(t)}{t} dt \in S^o \Leftrightarrow g(z) \in S^*.$$

М. Бернацкий [2] предположил, что оператор  $f(z) = \int_0^z \frac{g(t)}{t} dt$  сохраняет весь класс однолистных функций, что впоследствии было опровергнуто в [3].

Это послужило началом целого направления в геометрической теории функций, связанного с исследованием свойств образов подклассов однолистных функций при отображении различными операторами (например, [4–9]):

$$\Phi_1(z) = \int_0^z (f'(t))^\alpha dt, \Phi_2(z) = \int_0^z (g'(t))^\alpha \left( \frac{f(t)}{t} \right)^\beta dt, \Phi_3(z) = \frac{2}{z} \int_0^z f(t) dt$$

и другими. Основные задачи в этом направлении описаны, например, в [1, §14; 6].

В настоящей работе исследуются свойства интегрального оператора Бернацкого

$$\Phi(z) = \int_0^z \left( \frac{f(t)}{t} \right)^\alpha dt, \alpha \in \mathbb{R}. \quad (1)$$

в предположении, что  $f(z) \in S^*(a, b)$ , где  $S^*(a, b)$  – подкласс регулярных в круге  $E$  функций  $f(z) = z + a_2 z^2 + \dots + a_n z^n + \dots, z \in E$ , удовлетворяющих условию

$$a < \operatorname{Re} z \frac{f'(z)}{f(z)} < b, 0 < a < 1 < b, z \in E. \quad (2)$$

Ниже будет установлена величина  $\gamma = \gamma(a, a, b)$  такая, что если  $f(z) \in S^*(a, b)$ , то интеграл Бернацкого  $\Phi(z) \in K(\gamma)$ , где  $K(\gamma)$  – класс функций, почти выпуклой порядка  $\gamma$  [10–11].

### 1. Основной результат

Основным результатом данной статьи является следующая

**Теорема 1.** Если  $f(z) \in S^*(a, b)$ , то функция  $\Phi(z)$  из (1) является почти выпуклой порядка  $\gamma$ , где

$$\gamma = \begin{cases} \frac{-2(1-a)(1-\alpha+\alpha b)}{b-a}, & \alpha < \frac{1}{1-b} \\ 0, & \frac{1}{1-b} \leq \alpha \leq \frac{1}{1-a} \\ \frac{2(1-b)(1-\alpha+\alpha a)}{b-a}, & \alpha > \frac{1}{1-a} \end{cases} \quad (3)$$

Следуя схеме Каплана и опираясь на результаты [10–11], нетрудно получить следующее утверждение, ставшее уже классическим.

**Утверждение 1** [1]. Пусть функция  $f(z)$  регулярна в  $E$ ,  $f'(z) \neq 0$  в круге  $E$  и для любых  $\theta_1$  и  $\theta_2$ ,  $0 < \theta_2 - \theta_1 < 2\pi$ , и всех  $z = re^{i\theta}, 0 < r < 1$  выполняется условие

$$\int_{\theta_1}^{\theta_2} \left\{ 1 + \operatorname{Re} z \frac{f''(z)}{f'(z)} \right\} d\theta > -\gamma\pi. \quad (4)$$

Тогда функция  $f(z)$  является однолистной и почти выпуклой порядка  $\gamma$  в круге  $E$ .

Будем говорить [12], что функция  $S(z)$  подчинена однолистной функции  $S_0(z)$  в круге  $E$  и писать  $S(z) \prec S_0(z)$ , если  $S(E) \subset S_0(E)$  и  $S(0) = S_0(0)$ .

**Утверждение 2.** Если

$$z \frac{f'(z)}{f(z)} \prec \varphi_0(z)$$

и при некотором  $\gamma \in [0; 1]$  выполняется условие

$$\int_0^{2\pi} \left| 1 - \alpha + \alpha \operatorname{Re} \varphi_0(re^{i\theta}) \right| d\theta \leq (1 + \gamma)2\pi, 0 < r < 1, \quad (5)$$

то функция  $\Phi(z) \in K(\gamma)$ , т.е. является почти выпуклой порядка  $\gamma$ .

**Доказательство утверждения 2.** Из (1), получаем, что

$$1 + z \frac{\Phi''(z)}{\Phi'(z)} = (1 - \alpha) + \alpha z \frac{f'(z)}{f(z)}. \quad (6)$$

Поскольку

$$z \frac{f'(z)}{f(z)} \prec \varphi_0(z) \Rightarrow 1 - \alpha + \alpha z \frac{f'(z)}{f(z)} \prec \Phi_0(z),$$

где  $\Phi_0(z) = 1 - \alpha + \alpha \varphi_0(z)$ , то в силу метода подчиненности [2, с. 31] с учетом (6) имеет место неравенство:

$$\int_0^{2\pi} \left| 1 + \operatorname{Re} z \frac{\Phi''(z)}{\Phi'(z)} \right| d\theta \leq \int_0^{2\pi} |\operatorname{Re} \Phi_0(z)| d\theta, z = re^{i\theta}.$$

В силу условия теоремы

$$\int_0^{2\pi} |\operatorname{Re} \Phi_0(z)| d\theta = \int_0^{2\pi} |1 - \alpha + \alpha \operatorname{Re} \varphi_0(z)| d\theta \leq (1 + \gamma) 2\pi,$$

поэтому

$$\int_0^{2\pi} \left| 1 + \operatorname{Re} z \frac{\Phi''(z)}{\Phi'(z)} \right| d\theta \leq (1 + \gamma) 2\pi,$$

откуда в силу известных неравенств [1, с. 32], получаем:

$$\int_{\theta_1}^{\theta_2} \left[ 1 + \operatorname{Re} z \frac{\Phi''(z)}{\Phi'(z)} \right] d\theta > -\gamma\pi, 0 < \theta_2 - \theta_1 < 2\pi, z = re^{i\theta}.$$

Поэтому в силу утверждения 1 функция  $\Phi(z)$  является однолистной и почти выпуклой порядка  $\gamma$  в круге  $E$ . Утверждение 2 доказано.

Утверждение 2 дает общий подход к нахождению порядка почти выпуклости интегрального оператора (1) при условии, что известна область значений  $zf'(z)/f(z)$ .

Выбирая в качестве  $\varphi_0(z)$  отображение круга  $E$  на конкретные области, можно получить ряд частных утверждений.

**Доказательство теоремы 1.** Так как  $f(z) \in S^*(a, b)$ , то

$$z \frac{f'(z)}{f(z)} \prec \varphi_0(z) = i \frac{b-a}{\pi} \ln \frac{i + \varepsilon z}{i - \varepsilon z} + 1,$$

где

$$\varepsilon = e^{i \frac{\pi}{2} \frac{2-b-a}{b-a}}.$$

Здесь  $\varphi_0(z)$  – есть отображение круга  $E$  на полосу  $\{w: a \leq \operatorname{Re} w \leq b\}$  с нормировкой  $\varphi_0(0) = 1$ .

При этом отображении дуга  $\{e^{i\theta}: -\delta < \theta < \delta\}$  окружности  $|z|=1$  преобразуется в прямую  $\{w: \operatorname{Re} w = b\}$ , а дуга  $\{e^{i\theta}: \delta < \theta < 2\pi - \delta\}$  – в прямую  $\{w: \operatorname{Re} w = a\}$ . При этом

$$\delta = \frac{\pi}{2} + \arg \varepsilon = \frac{\pi(1-a)}{b-a}.$$

В силу утверждения 2 для нахождения порядка почти выпуклости интеграла Бернацкого необходимо вычислить выражение

$$I(\alpha, a, b) = \int_0^{2\pi} |1 - \alpha + \alpha \operatorname{Re} \varphi_0(e^{i\theta})| d\theta$$

с учетом того, что в силу свойств отображения  $w = \varphi_0(z)$

$$1 - \alpha + \alpha \operatorname{Re} \varphi_0(e^{i\theta}) = \begin{cases} 1 - \alpha + \alpha a, & \delta \leq \theta \leq 2\pi - \delta \\ 1 - \alpha + \alpha b, & -\delta \leq \theta \leq \delta. \end{cases}$$

1) Пусть  $\alpha \geq 0$ . Возможны два случая:

а)  $1 - \alpha + \alpha a \geq 0$ , то есть  $0 \leq \alpha \leq \frac{1}{1-a}$ .

В этом случае, так как  $1 - \alpha + \alpha a < 1 - \alpha + \alpha b$ , то  $1 - \alpha + \alpha b > 0$ . Из этого следует, что

$$\left| 1 - \alpha + \alpha \operatorname{Re} \varphi_0(e^{i\theta}) \right| = 1 - \alpha + \alpha \operatorname{Re} \varphi_0(e^{i\theta}) \text{ для всех } \theta.$$

Вычислим интеграл:

$$I(\alpha, a, b) = \int_{\delta}^{2\pi-\delta} (1 - \alpha + \alpha a) d\theta + \int_{-\delta}^{\delta} (1 - \alpha + \alpha b) d\theta = (1 - \alpha + \alpha a) \cdot 2\pi + \alpha(b - a) \cdot 2\delta.$$

Вспомогая, что  $\delta = \frac{\pi(1-a)}{b-a}$ , получаем

$$I(\alpha, a, b) = (1 - \alpha + \alpha a) \cdot 2\pi + \alpha(b - a) \cdot \frac{2\pi(1-a)}{b-a} = 2\pi.$$

Следовательно, в силу условия (5)  $I(\alpha, a, b) = 2\pi \leq (1 + \gamma)2\pi$ , или  $\gamma \geq 0$ .

Итак,  $\gamma \geq 0$  для  $0 \leq \alpha \leq \frac{1}{1-a}$ .

б) Пусть  $1 - \alpha + \alpha a < 0$ , то есть  $\alpha > \frac{1}{1-a}$ .

Так как  $1 - \alpha + \alpha b > 0$ , то аналогично случаю а) получаем

$$\left| 1 - \alpha + \alpha \operatorname{Re} \varphi_0(e^{i\theta}) \right| = \begin{cases} -(1 - \alpha + \alpha a), & \delta \leq \theta \leq 2\pi - \delta, \\ 1 - \alpha + \alpha b, & -\delta \leq \theta \leq \delta. \end{cases}$$

Поэтому

$$\begin{aligned} I(\alpha, a, b) &= - \int_{\delta}^{2\pi-\delta} (1 - \alpha + \alpha a) d\theta + \int_{-\delta}^{\delta} (1 - \alpha + \alpha b) d\theta = \\ &= (1 - \alpha + \alpha a + 1 - \alpha + \alpha b) \cdot 2\delta - 2\pi(1 - \alpha + \alpha a) = \\ &= \frac{2\pi}{b-a} (2 - 2\alpha + 2\alpha a + 2\alpha b - a - 2\alpha ab - b). \end{aligned}$$

То есть

$$I(\alpha, a, b) = \frac{2\pi}{b-a} (2 - 2\alpha + 2\alpha a + 2\alpha b - a - 2\alpha ab - b).$$

По условию (5)  $I(\alpha, a, b) \leq (1 + \gamma)2\pi$ , то есть  $\gamma \geq \frac{I(\alpha, a, b)}{2\pi} - 1$  или

$$\gamma \geq \frac{2 - 2\alpha + 2\alpha a + 2\alpha b - a - 2\alpha ab - b}{b-a} - 1.$$

После преобразований окончательно получаем:

$$\gamma \geq \frac{2(1-b)(1-\alpha+\alpha a)}{b-a} \text{ при } \alpha > \frac{1}{1-a}.$$

2) Пусть теперь  $\alpha < 0$ , тогда также получим 2 случая:

в)  $1 - \alpha + \alpha b < 0$ , то есть  $\frac{1}{1-b} \leq \alpha < 0$ .

Так как всегда  $1 - \alpha + \alpha b < 1 - \alpha + \alpha a$  (в силу условия  $\alpha < 1 < b$ , то для всех  $\theta$

$$\left| 1 - \alpha + \alpha \operatorname{Re} \varphi_0(e^{i\theta}) \right| = 1 - \alpha + \alpha \operatorname{Re} \varphi_0(e^{i\theta}).$$

Точно так же, как в случае а),  $I(\alpha, a, b) = 2\pi$ , то есть

$$\gamma \geq 0 \text{ для } \frac{1}{1-b} \leq \alpha < 0.$$

г)  $1 - \alpha + \alpha b < 0$ , то есть  $\alpha < \frac{1}{1-b}$ .

В этом случае

$$(1 - \alpha + \alpha \operatorname{Re} \varphi_0(e^{i\theta})) = \begin{cases} 1 - \alpha + \alpha a, & \delta \leq \theta \leq 2\pi - \delta \\ -(1 - \alpha + \alpha b), & -\delta \leq \theta \leq \delta \end{cases}$$

и интеграл

$$I(\alpha, a, b) = \int_{\delta}^{2\pi - \delta} (1 - \alpha + \alpha a) d\theta + \int_{-\delta}^{\delta} (1 - \alpha + \alpha b) d\theta = \frac{2\pi}{b-a} (-2 + 2\alpha - 2\alpha b + a - 2\alpha a + 2\alpha ab + b).$$

Аналогично случаю б), по условию (5)  $I(\alpha, a, b) \leq (1 + \gamma)2\pi$ , то есть после преобразований получаем:

$$\gamma \geq \frac{-2(1-a)(1-\alpha+\alpha b)}{b-a} \text{ при } \alpha < \frac{1}{1-b}.$$

Объединив все случаи а), б), в) и г), получили требуемый результат (3). Теорема 1 доказана.

## 2. Частные случаи

Рассмотрим частные случаи теоремы 1.

Пусть  $b \rightarrow +\infty$  и  $a = \beta$ . Тогда класс функций  $S^*(a, b)$  преобразуется в общепринятом обозначении в класс  $S^*(\beta)$  звездообразных функций порядка  $\beta$ , удовлетворяющих условию

$$\operatorname{Re} z \frac{f'(z)}{f(z)} > \beta, \quad 0 < \beta < 1, \quad z \in E,$$

и из теоремы 1 вытекает

**Следствие 1.** Если  $f(z) \in S^*(\beta)$ , то интеграл Бернацкого  $\Phi(z)$  является почти выпуклой функцией порядка  $\gamma$ , где  $\gamma$  определяется из соотношения:

$$\gamma = \begin{cases} -2\alpha(1-\beta), & \alpha < 0, \\ 0, & 0 \leq \alpha \leq 1/(1-\beta), \\ 2[\alpha(1-\beta)-1], & \alpha > 1/(1-\beta). \end{cases} \quad (7)$$

*Результат точный. Экстремальная функция имеет вид  $f(z) = z/(1-z)^{2(1-\beta)}$ .*

Отметим, что следствие 1 совпадает с теоремой 2 из [4], доказанной другим методом. Точность результата обоснована в [4].

Пусть  $\gamma = 1$ , тогда  $K(1) = K$  – класс почти выпуклых функций. Найдем область значений параметр  $\alpha$ , при которых оператор (1) переводит класс функций  $S^*(a, b)$  в класс почти выпуклых функций.

а) Пусть  $\alpha < 1/(1-b)$ . Тогда в силу (3) из условия  $-2(1-a)(1-\alpha+\alpha b)/(b-a) \leq 1$  получаем, что

$$\alpha \geq \frac{b-3a-2}{2(b-1)(1-a)}.$$

б) Если же  $\alpha > 1/(1-a)$ , то из условия  $2(1-\alpha+\alpha a)(1-b)/(b-a) \leq 1$  получаем, что

$$\alpha \leq \frac{3b-a-2}{2(1-a)(b-1)}.$$

Объединив результаты а) и б), получаем

**Следствие 2.** Пусть

$$\frac{3a-b-2}{2(1-a)(b-1)} \leq \alpha \leq \frac{3b-a-2}{2(1-a)(b-1)}. \quad (8)$$

Тогда оператор (1) отображает класс  $S^*(a, b)$  в класс  $K$  почти выпуклых функций.

Рассмотрим еще один граничный случай  $\gamma = 0$ .

Известно, что класс  $K(0)$  совпадает с классом  $S^o$  выпуклых функций. Поскольку при  $\alpha < \frac{1}{1-b}$  и  $\alpha > \frac{1}{1-a}$  показатель почти выпуклости  $\gamma > 0$  в силу условия  $a < 1 < b$ , то из (3) получаем, что  $\gamma = 0$  только при условии, что  $\frac{1}{1-b} \leq \alpha \leq \frac{1}{1-a}$ .

**Следствие 3.** Если  $\frac{1}{1-b} \leq \alpha \leq \frac{1}{1-a}$ , то оператор (1) преобразует функции  $f(z) \in S^*(a, b)$  в выпуклые функции.

Заметим, что следствие 3 распространяет условие выпуклости интеграла Бернацкого из [9] на более широкий класс функций  $f(z)$ . В случае, когда  $\alpha \notin \left[ \frac{1}{1-b}; \frac{1}{1-a} \right]$ , точные радиусы выпуклости интеграла Бернацкого при условии, что  $f(z) \in S^*(a, b)$ , найдены в [14].

Пусть в (8)  $a = 0$ ,  $b \rightarrow +\infty$ . Тогда  $S^*(0, +\infty) = S^*$ . Поэтому из следствия 2 получаем

**Следствие 4** [13]. Пусть  $f(z) \in S^*$  и  $-1/2 \leq \alpha \leq 3/2$ . Тогда интеграл Бернацкого  $\Phi(z) = \int_0^z [f(t)/t]^\alpha dt \in K$ .

#### Литература

1. Авхадиев, Ф.Г. Основные результаты в достаточных условиях однолиственности аналитических функций / Ф.Г. Авхадиев, Л.А. Аксентьев // УМН. – 1975. – Т. 30, Вып. 4(184). – С. 3–60.
2. Biernacki, M. Sur L'Integrale des Fonctions Univalentes / M. Biernacki // Bulletin Polish Acad. Sci. Math., Astron. et Phys. – 1960. – Vol. 8, no. 1. – P. 29–34.
3. Похилевич, В.А. Об одной теореме М. Бернацкого в теории однолистных функций // Укр. матем. журн. – 1965. – Т. 17, № 4. – С. 63–71.
4. Прохоров, Д.В. Интегральные преобразования в некоторых классах однолистных функций // Изв. вузов. Математика. – 1980. – № 12. – С. 45–49.
5. Pascu, N.N. On a Univalence Criterion II / N.N. Pascu // Studia Universitatis Babes-Bolyai Mathematica. 6. – 1985. – P. 153–154.
6. Прохоров, Д.В. Об областях значений систем функционалов и интегрировании однолистных функций / Д.В. Прохоров // Изв. вузов. Математика. – 1986. – № 10. – С. 33–39.
7. Сижук, Т.П. Порядок звездообразности оператора Бернарди в классе звездообразных функций / Т.П. Сижук // Вестник Ставропольского государственного университета. – 2009. – № 4. – С. 76–78.
8. Казанцев, А.В. Об уравнении Гахова для оператора Бернацкого / А.В. Казанцев // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. – 2015. – Т. 157, книга 2. – С. 79–92.
9. Кадиева, М.Р. Условие выпуклости обобщенного интеграла Бернацкого для одного подкласса звездообразных функций / М.Р. Кадиева, Ф.Ф. Майер // Вестник КазНПУ им.Абая. Серия: физико-математические науки. – 2020. – Т. 69, № 1. – С. 111–118.
10. Reade, M.O. The Coefficients of Close-to-Convex Functions / M.O. Reade // Duke Math. J. – Vol. 23, no. 3. – 1956. – P. 459–462.
11. Renyi, A. Some Remarks on Univalent Functions / A. Renyi // Bulgar. Akad. Nauk., Izv. Mat. Inst. 3. – 1959. – P. 111–119.
12. Голузин, Г.М. Геометрическая теория функций комплексного переменного. – М.: Наука, 1966. – 628 с.
13. Merkes, E.P. On the Univalence of a Certain Integral / E.P. Merkes, D.J. Wright // Proc. Amer. Math. Soc. – 1971. – Vol. 27, no. 1. – P. 97–100.

14. Майер, Ф.Ф. Радиусы выпуклости интеграла Бернацкого для одного подкласса звездообразных функций / Ф.Ф. Майер, А.А. Утемисова, Д.М. Масакбаева // Материалы международной научно-практической конференции «Байтурсыновские чтения – 2022». – Костанай: Костанайский региональный университет, 2022. – С. 317–322.

*Поступила в редакцию 18 января 2022 г.*

### Сведения об авторах

Майер Федор Федорович – профессор, кандидат физико-математических наук, кафедра математики и физики, Костанайский региональный университет им. А. Байтурсынова, г. Костанай, Республика Казахстан, e-mail: maiyer@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-2278-2723>

Тастанов Мейрамбек Габдулиевич – профессор, кандидат физико-математических наук, кафедра математики и физики, Костанайский региональный университет им. А. Байтурсынова, г. Костанай, Республика Казахстан, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-1926-8958>

Утемисова Анар Алтаевна – доцент, кандидат педагогических наук, кафедра математики и физики, Костанайский региональный университет им. А. Байтурсынова, г. Костанай, Республика Казахстан, e-mail: anar\_utemisova@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-5143-0260>

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2022, vol. 14, no. 4, pp. 12–19*

---

DOI: 10.14529/mmph220402

## GEOMETRIC PROPERTIES OF THE BERNATSKY INTEGRAL OPERATOR

**F.F. Mayer, M.G. Tastanov, A.A. Utemisova**

*Kostanay Regional University named after A. Baitursynov, Kostanay, Republic of Kazakhstan  
e-mail: maiyer@mail.ru*

Abstract. In the geometric theory of complex variable functions, the study of mapping of classes of regular functions using various operators has now become an independent trend. The connection  $f(z) \in S^\sigma \Leftrightarrow g(z) = zf'(z) \in S^*$  of the classes  $S^\sigma$  and  $S^*$  of convex and star-shaped functions can be considered as mapping using the differential operator  $G[f](x) = zf'(z)$  of class  $S^\sigma$  to class  $S^*$ , that is,  $G: S^\sigma \rightarrow S^*$  or  $G(S^\sigma) = S^*$ . The impetus for studying this range of issues was M. Bernatsky's assumption that the inverse operator  $G^{-1}[f](x)$ , which translates  $S^* \rightarrow S^\sigma$  and thereby “improves” the properties of functions, maps the entire class  $S$  of single-leaf functions into itself.

At present, a number of articles have been published which study the various integral operators. In particular, they establish sets of values of indicators included in these operators where operators map class  $S$  or its subclasses to themselves or to other subclasses.

This paper determines the values of the Bernatsky parameter included in the generalized integral operator, at which this operator transforms a subclass of star-shaped functions allocated by the condition  $a < \operatorname{Re} zf'(z)/f(z) < b$  ( $0 < a < 1 < b$ ), in the class  $K(\gamma)$  of functions, almost convex in order  $\gamma$ . The results of the article summarize or reinforce previously known effects.

*Keywords: geometric theory of functions of a complex variable; single-leaf functions; Bernatsky integral operator; convex; star-shaped and almost convex functions.*

### References

1. Avkhadiev F.G., Aksent'ev L.A. The Main Results on Sufficient Conditions for an Analytic Function to be Schlicht. *Russian Mathematical Surveys*, 1975, Vol. 30, no. 4, pp. 1–63. DOI: 10.1070/RM1975v030n04ABEH001511
2. Biernacki, M.: Sur L'Intégrale des Fonctions Univalentes. *Bull. Acad. Polon. Sci. Ser. Sci. Math. Astr. Phys.*, 1960, Vol. 8, no. 1, pp. 29–34.

3. Pokhilevich V.A. Ob odnoy teoreme M. Bernatskogo v teorii odnolistnykh funktsiy (On a Theorem of M. Bernatsky in the Theory of Single-Leaf Functions). *Ukr. matem. Zhurn.*, 1965, Vol. 17, no. 4, pp. 63–71. (in Russ.).
4. Prokhorov D.V. Integral Transformations in Some Classes of Univalent Functions. *Russian Mathematics (Izvestiya VUZ. Matematika)*, 1980, Vol. 24, no. 12, pp. 53–58.
5. Pascu N.N. On a Univalence Criterion II. *Stud. Univ. Babeş-Bolyai Math.* 6, 1985, pp. 153–154.
6. Prokhorov D.V. Ranges of Values of Systems of Functionals and Integration of Univalent Functions. *Russian Mathematics (Izvestiya VUZ. Matematika)*, 1986, Vol. 30, no. 10, pp. 44–53.
7. Sizhuk T.P. Poryadok zvezdoobraznosti operatora Bernardi v klasse zvezdoobraznykh funktsiy (The Order of the Stellarity of the Bernardi Operator in the Class of Stellate Functions). *Vestnik Stavropol'skogo gosudarstvennogo universiteta*, 2009, no. 4, pp. 76–78. (in Russ.).
8. Kazantsev A.V. Ob uravnenii Gakhova dlya operatora Bernatskogo (On the Gakhov Equation for the Biernacki Operator). *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2015, Vol. 157, Book 2, pp. 79–92.
9. Kadiyeva M.R., Mayer F.F. Convexity Condition of the Generalized Bernatsky Integral for One Subclass of Star-Like Functions. *Bulletin Abai KazNPU. Series of Physics & Mathematical Sciences*, 2020, Vol. 69, no. 1, pp. 111–118.
10. Reade M.O. The Coefficients of Close-to-Convex Functions. *DUKE MATH. J.*, 1956, Vol. 23, no. 3, pp. 459–462. DOI: 10.1215/S0012-7094-56-02342-0
11. Renyi A. Some Remarks on Univalent Functions. *Bulgar. Akad. Nauk., Izv. Mat. Inst.* 3, 1959, pp. 111–119.
12. Goluzin G.M. *Geometricheskaya teoriya funktsiy kompleksnogo peremennogo* (Geometric Theory of Functions of a Complex Variable), Moscow, Nauka Publ., 1966, 628 p. (in Russ.).
13. Merkes E.P., Wright D.J. On the Univalence of a Certain Integral. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 1971, Vol. 27, no. 1, pp. 97–100. DOI: 10.1090/S0002-9939-1971-0269825-1
14. Maiyer F.F., Utemisova A.A., Masakbaeva D.M. Radiusy vypuklosti integrala Bernatskogo dlja odnogo podklassa zvezdoobraznykh funktsiy (Radii of convexity of the Bernatsky integral for one subclass of star-shaped functions). *Materialy mezhdunarodnoj nauchno-prakticheskoy konferencii "Baitursynovskie chtenija – 2022" (Proc. International Scientific and Practical Conf. "Baitursinov readings – 2022")*, Kostanaj, *Kostanayckiy regional'nyy universitet Publ.*, 2022, pp. 317–322.

Received January 18, 2022

### Information about the authors

Maiyer Fedor Fedorovich is Professor, Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Department of Mathematics and Physics, Kostanay Regional University named after A. Baitursynov, Kostanay, Republic of Kazakhstan, e-mail: maiyer@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-2278-2723>

Tastanov Meyrambek Gabdulievich is Professor, Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Department of Mathematics and Physics, Kostanay Regional University named after A. Baitursynov, Kostanay, Republic of Kazakhstan, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-1926-8958>

Utemisova Anar Altayevna is Associate Professor, Cand. Sc. (Pedagogical), Department of Mathematics and Physics, Kostanay Regional University named after A. Baitursynov, Kostanay, Republic of Kazakhstan, e-mail: anar\_utemisova@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-5143-0260>

## МИНИМИЗАЦИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ЛОГИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ В БАЗИСАХ ШЕФФЕРА И ПИРСА

**В.В. Меньших, В.А. Никитенко**

*Воронежский институт МВД России, г. Воронеж, Российская Федерация*

*E-mail: menshikh@list.ru*

**Аннотация.** Рассмотрено представление произвольных логических функций в базисах Шеффера и Пирса. Для этого первоначально найдены рекуррентные зависимости представления дизъюнктивных и конъюнктивных одночленов в указанных базисах и сделаны обобщения на произвольные логические формулы, представленные в виде дизъюнктивных и конъюнктивных нормальных форм. Получены оценки на количество операций в логических формулах при переходе к базисам Шеффера и Пирса.

*Ключевые слова:* дизъюнктивный одночлен; конъюнктивный одночлен; базис Шеффера; базис Пирса; булева переменная; булева функция.

### Введение

Результаты, полученные в математической логике, нашли широкое применение в конструировании электронных микросхем [1–3]. В частности, важной является задача представления произвольных логических функций с помощью формул, содержащих логические операции из заданного набора. Такие наборы операций называются функционально полными. Для того чтобы набор логических операций был функционально полным, необходимо и достаточно, чтобы он удовлетворял критерию Поста [1, 3]. Также рассматривается задача сокращения количества используемых операций заданного набора в логических формулах, связанная с задачей сокращения количества логических элементов в устройствах цифровой техники.

Наиболее изученными функциональными наборами логических операций являются стандартный базис (« $\wedge$ », « $\vee$ », « $\neg$ »), в котором логические функции представляются в виде конъюнктивных и дизъюнктивных нормальных форм, и базис Жегалкина (« $\oplus$ », « $\wedge$ », « $1$ »), в котором логические функции единственным образом представляются полиномами Жегалкина [2].

Среди функционально полных наборов логических операций выделяются два набора, каждый из которых включает только одну операцию: базис Шеффера, включающий штрих Шеффера « $|$ », и базис Пирса, включающий стрелку Пирса « $\downarrow$ ». В связи с тем, что указанные наборы включают только по одной операции, логические формулы с их использованием, как правило, являются очень громоздкими.

В данной работе рассматривается вопрос сокращения количества операций в логических формулах в базисах Шеффера и Пирса.

### Представление дизъюнктивных и конъюнктивных одночленов в базисах Шеффера и Пирса

Операция «штрих Шеффера» является комбинацией конъюнкции и отрицания, а операция «стрелка Пирса» – комбинацией дизъюнкции и отрицания. Поэтому традиционный подход к переходу к базисам Шеффера и Пирса заключается в использовании законов де Моргана и двойного отрицания.

Рассмотрим логическую функцию, заданную дизъюнктивным одночленом

$$\overline{x_1 \vee \dots \vee x_n}. \quad (1)$$

и приведём примеры её представления в базисе Шеффера для случаев  $n = 3$  и  $n = 4$ .

1) Пусть  $n = 3$ . Тогда, используя законы де Моргана и двойного отрицания, получим:

$$\begin{aligned} \overline{x_1 \vee x_2 \vee x_3} &= \overline{x_1 \wedge x_2 \vee x_3} = \overline{x_1 | x_2 \vee x_3} = \overline{x_1 | x_2 \vee x_3} = \overline{x_1 | x_2 \wedge x_3} = \overline{((x_1 | x_2) | (x_1 | x_2)) |} \\ &|((x_3 | x_3) | (x_3 | x_3)). \end{aligned}$$

Данная запись является громоздкой и содержит 7 логических операций.

Количество операций можно сократить, применив, например, закон Порецкого:

$$\overline{x_1 \wedge x_2 \vee x_3} = (\overline{x_1 \wedge x_2} \wedge \overline{x_3}) \vee \overline{x_3} = (\overline{x_1 \wedge x_2} \wedge \overline{x_3}) \vee \overline{x_3} = (\overline{x_1 \wedge x_2} \wedge \overline{x_3}) \wedge x_3 = ((x_1 | x_2) | x_3) | x_3.$$

Данная запись является более компактной по сравнению с предыдущей записью и включает только 3 логические операции.

2) Пусть  $n = 4$ . Тогда, используя аналогичные рассуждения, получим:

$$\overline{x_1 \vee x_2 \vee x_3 \vee x_4} = x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \vee x_4 = x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \vee x_4,$$

применив закон Порецкого

$$(\overline{x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \wedge x_4}) \vee x_4 = (\overline{x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \wedge x_4}) \wedge x_4 = (\overline{x_1 \wedge x_2 \wedge x_3} | x_4) | x_4,$$

исходя из формулы для  $n = 3$ , получаем

$$(\overline{x_1 \wedge x_2 \wedge x_3} | x_4) | x_4 = (((x_1 | x_2) | x_3) | x_3) | x_4 | x_4.$$

Полученные результаты позволяют заметить рекурсивную зависимость при представлении одночлена (1) в базисе Шеффера.

**Теорема 1.**  $\overline{x_1 \vee x_2 \vee x_3 \vee \dots \vee x_n} = (\dots(((x_1 | x_2) | x_3) | x_3) | \dots) | x_n$ .

**Доказательство.** Для доказательства воспользуемся методом математической индукции, учитывая явно прослеживающуюся в приведённых примерах рекурсивную зависимость.

Введем функцию  $\gamma_k$  такую, что

$$\gamma_1 = x_1 | x_1; \gamma_2 = x_1 | x_2; \gamma_k = (\gamma_{k-1} | x_k) | x_k, k > 2.$$

При  $n = 1$   $\overline{x_1} = x_1 | x_1 = \gamma_1$ ; при  $n = 2$   $\overline{x_1 \wedge x_2} = x_1 | x_2 = \gamma_2$ ; при  $n = 3$

$$\overline{x_1 \wedge x_2 \vee x_3} = ((x_1 | x_2) | x_3) | x_3 = \gamma_3.$$

Полученные зависимости используем как базу индукции. Далее предположим, что для  $n = m$  выполняется равенство

$$\overline{x_1 \vee x_2 \vee x_3 \vee \dots \vee x_m} = (\dots(((x_1 | x_2) | x_3) | x_3) | \dots) | x_m = \gamma_m,$$

докажем, что утверждение верно для  $n = m + 1$ :

$$\begin{aligned} \overline{x_1 \vee x_2 \vee x_3 \vee \dots \vee x_m \vee x_{m+1}} &= \overline{x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \wedge \dots \wedge x_m \vee x_{m+1}} = (\overline{x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \wedge \dots \wedge x_m} \wedge x_{m+1}) \vee x_{m+1} = \\ &= (\overline{x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \wedge \dots \wedge x_m} \wedge x_{m+1}) \wedge x_{m+1} = (\overline{x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \wedge \dots \wedge x_m} | x_{m+1}) | x_{m+1} = (\gamma_m | x_{m+1}) | x_{m+1} = \gamma_{m+1}. \end{aligned}$$

Использование данной теоремы позволяет уменьшить количество логических операций при переходе к базису Шеффера. К примеру, при «традиционном» переходе от дизъюнктивного одночлена к базису Шеффера (с использованием только закона де Моргана и двойного отрицания) для  $n = 3$  и  $n = 4$  количество логических операций равно 7, для  $n = 5$  – 16, а при применении теоремы 1 количество операций можно сократить до 3, 5, 7 соответственно.

**Следствие.**  $\bigvee_{i=1}^n \overline{f_i} = (\dots(((f_1 | f_2) | f_3) | f_3) | \dots) | f_n$ , где  $f_i$  – произвольная булева функция.

Доказательство следствия 1 осуществляется аналогично доказательству теоремы 1, если рассматривать булеву функцию как булеву переменную. ■

Приведём аналогичные рассуждения для представления конъюнктивных одночленов

$$\overline{x_1 \wedge \dots \wedge x_n}$$

в базисе Пирса.

**Теорема 2.**  $\overline{x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \wedge \dots \wedge x_n} = (\dots(((x_1 \downarrow x_2) \downarrow x_3) \downarrow x_3) \downarrow \dots) \downarrow x_n$

Доказательство теоремы 2 проводится по аналогии с доказательством теоремы 1. ■

Аналогичное следствие выводится и для теоремы 2.

**Следствие.**  $\bigwedge_{i=1}^n \overline{f_i} = (\dots(((f_1 \downarrow f_2) \downarrow f_3) \downarrow f_3) \downarrow \dots) \downarrow f_n$ . ■

Следствия из теорем 1 и 2 используются при описании перехода от минимальной дизъюнктивной нормальной формы (МДНФ) и минимальной конъюнктивной нормальной формы (МКНФ) к базисам Шеффера и Пирса соответственно.

## Алгоритм перехода от МДНФ и МКНФ к базисам Шеффера и Пирса

Вначале разработаем алгоритм перехода от МДНФ к базису Шеффера и по аналогии построим алгоритм для МКНФ. Основанием того, что переход осуществляется именно от МДНФ к базису Шеффера, является то, что запись, полученная в результате перехода, будет содержать меньшее количество логических операций.

Рассмотрим функцию  $n$  переменных

$$f(x_1, \dots, x_n) = \bigvee_{i=1}^k \psi_i,$$

где  $\psi_i = \bigwedge_{t=1}^n \alpha_t g_t$ ,  $\alpha_t = \begin{cases} 0, & \text{если } g_t \text{ не содержится в } \psi_i, \\ 1, & \text{если } g_t \text{ содержится в } \psi_i, \end{cases}$   $g_t$  – литерал (переменная или её отрицание).

$$f(x_1, \dots, x_n) = \psi_1 \vee \dots \vee \psi_k = \overline{\overline{\psi_1} \wedge \dots \wedge \overline{\psi_k}} = \overline{\psi_1} \wedge \dots \wedge \overline{\psi_k}.$$

Применяя следствие из теоремы 1, получаем

$$\overline{\psi_1} \wedge \dots \wedge \overline{\psi_k} = \left( \left( \left( \left( \overline{\psi_1} \mid \overline{\psi_2} \right) \mid \overline{\psi_3} \right) \mid \dots \right) \mid \overline{\psi_k} \right) \mid \overline{\psi_k}.$$

Для перевода  $\overline{\psi_i}$  в базис Шеффера также воспользуемся теоремой 1. Введем обозначение:

$$\overline{\psi_i} = \overline{\bigwedge_{t=1}^n \alpha_t g_t} = \gamma_{\psi_i},$$

тогда с учетом обозначения получаем

$$\left( \left( \left( \left( \overline{\psi_1} \mid \overline{\psi_2} \right) \mid \overline{\psi_3} \right) \mid \dots \right) \mid \overline{\psi_k} \right) \mid \overline{\psi_k} = \left( \left( \left( \left( \gamma_{\psi_1} \mid \gamma_{\psi_2} \right) \mid \gamma_{\psi_3} \right) \mid \dots \right) \mid \gamma_{\psi_k} \right) \mid \gamma_{\psi_k}$$

Полученные выкладки положены в основу алгоритма перехода от МДНФ в базис Шеффера, представленный ниже.

**Шаг 1.** Рассматриваем  $\psi_i$  как переменные и осуществляем переход в базис Шеффера, но при этом сохраняем инверсию  $\psi_i$ .

$$f(x_1, \dots, x_n) = \left( \left( \left( \left( \overline{\psi_1} \mid \overline{\psi_2} \right) \mid \overline{\psi_3} \right) \mid \dots \right) \mid \overline{\psi_k} \right) \mid \overline{\psi_k}.$$

**Шаг 2.** Осуществляем преобразование  $\overline{\psi_1}, \dots, \overline{\psi_k}$  применяя теорему 1. Если есть инверсия  $x_i$ , то преобразование осуществляется по формуле  $\overline{x_i} = x_i \mid x_i$ .

**Шаг 3.** Записываем окончательный результат.

**Замечание.** Для уменьшения количества логических операций необходимо сдвинуть на первые места переменные  $\overline{x_i}$  в конъюнктивном одночлене ( $x_1 \wedge x_2 \wedge \overline{x_3} \wedge \overline{x_4} = \overline{x_3} \wedge \overline{x_4} \wedge x_1 \wedge x_2$ ).

По аналогии получаем алгоритм для МКНФ с аналогичным замечанием.

**Шаг 1.** Рассматриваем  $\psi_i$  как переменные и осуществляем переход в базис Пирса, но при этом сохраняем инверсию  $\psi_i$ .

$$f(x_1, \dots, x_n) = \left( \left( \left( \left( \overline{\psi_1} \downarrow \overline{\psi_2} \right) \downarrow \overline{\psi_3} \right) \downarrow \dots \right) \downarrow \overline{\psi_k} \right) \downarrow \overline{\psi_k}$$

**Шаг 2.** Осуществляем преобразование  $\overline{\psi_1}, \dots, \overline{\psi_k}$ , при помощи теоремы 2. Если есть инверсия  $x_i$ , то преобразование осуществляется по формуле  $\overline{x_i} = x_i \downarrow x_i$ .

**Шаг 3.** Записываем окончательный результат.

## Численный пример

Рассмотрим логическую функцию

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1 \wedge x_2 \wedge x_4) \vee (x_1 \wedge \bar{x}_2 \wedge x_3) \vee (\bar{x}_1 \wedge x_3 \wedge \bar{x}_4) = (x_1 \wedge x_2 \wedge x_4) \vee (x_1 \wedge \bar{x}_2 \wedge x_3) \vee (\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_4 \wedge x_3)$$

$$\psi_1 = (x_1 \wedge x_2 \wedge x_4), \psi_2 = (x_1 \wedge \bar{x}_2 \wedge x_3), \psi_3 = (\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_4 \wedge x_3).$$

Опишем результаты реализации алгоритма.

**Шаг 1.**

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = \psi_1 \vee \psi_2 \vee \psi_3 = \overline{\overline{\psi_1} \vee \overline{\psi_2} \vee \overline{\psi_3}} = \overline{\overline{\psi_1} \wedge \overline{\psi_2} \wedge \overline{\psi_3}} = (\overline{\overline{\psi_1} | \overline{\psi_2} | \overline{\psi_3}}) | \overline{\psi_3}.$$

**Шаг 2.**

$$\overline{\psi_1} = \overline{x_1 \wedge x_2 \wedge x_4} = ((x_1 | x_2) | x_4) | x_4;$$

$$\overline{\psi_2} = \overline{x_1 \wedge \bar{x}_2 \wedge x_3} = ((x_1 | (x_2 | x_2)) | x_3) | x_3;$$

$$\overline{\psi_3} = \overline{\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_4 \wedge x_3} = (((x_1 | x_1) | (x_4 | x_4)) | x_3) | x_3;$$

**Шаг 3.**

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = [(((x_1 | x_2) | x_4) | x_4) | x_4] | [(((x_1 | (x_2 | x_2)) | x_3) | x_3) | x_3] | [(((x_1 | x_1) | (x_4 | x_4)) | x_3) | x_3] | [(((x_1 | x_1) | (x_4 | x_4)) | x_3) | x_3].$$

Полученная функция в базисе Шеффера имеет 20 логических операций. Стоит заметить, если бы мы не последовали замечанию алгоритма, то функция имела бы 22 логические операции.

**Замечание**

Одним из недостатков перехода в рассматриваемые базисы является то, что, как правило, увеличивается количество логических операций. Однако следует отметить, что при переходе в данные базисы количество операций может и уменьшиться. Примером может быть функция

$$f(x_1, x_2, x_3) = (x_1 | x_2) | x_3. \quad (2)$$

При переходе в стандартный базис она будет иметь вид

$$f(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \wedge x_2) \vee \bar{x}_3. \quad (3)$$

### Расчет количества логических операций в базисах Шеффера и Пирса

На основе анализа приведённых выше алгоритмов была получена зависимость для количества логических операций. Обозначим:

$$f_{\wedge}(x_1, \dots, x_n) = \overline{x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \wedge \dots \wedge x_n} = f_{\wedge}^n - \text{конъюнктивный одночлен};$$

$f_1(x_1, \dots, x_n) = f_1^n = (\dots(((x_1 | x_2) | x_3) | x_3) | \dots) | x_n$  – запись  $f_{\wedge}^n$  в базисе Шеффера (используя теорему 1);

$$\lambda_n - \text{количество операций «|» в } f_1^n;$$

$$k - \text{количество конъюнктивных одночленов в формуле};$$

$$n_i - \text{количество переменных в } \psi_i;$$

$$N_i = \begin{cases} 1, & \text{если } n_i = 1, \\ 2n_i - 3, & \text{если } n_i \geq 2, \end{cases} - \text{количество «|», возникающих при переходе от конъюнктивных}$$

одночленов к базису Шеффера;

$$j_i \leq n_i - \text{количество инверсий переменных в } \psi_i;$$

$$I_i = \begin{cases} 0, & \text{если } j_i = 0, \\ 1, & \text{если } j_i = 1, \\ 2j_i - 2, & \text{если } j_i \geq 2, \end{cases} - \text{количество «|», возникающих при переходе от инверсии к «|»};$$

$$G_{n_1, \dots, n_k}^{j_1, \dots, j_k} - \text{количество «|» при переходе в базис Шеффера.}$$

**Лемма 1.** Пусть был осуществлен переход  $f_{\wedge}^n$  в  $f_1^n$ , тогда  $\lambda_n$  имеет вид:

$$\lambda_n = \begin{cases} 1, & \text{если } n = 1, \\ 2n - 3, & \text{если } n \geq 2. \end{cases}$$

**Доказательство.** Для доказательства воспользуемся методом математической индукции. База индукции

При  $n = 1$

$$\overline{x_1} = x_1 | x_1, \lambda_1 = 1.$$

При  $n = 2$

$$\overline{x_1 \vee x_2} = x_1 | x_2, \lambda_2 = 1 = 2 \cdot 2 - 3.$$

При  $n = 3$

$$\overline{x_1 \vee x_2 \vee x_3} = ((x_1 | x_2) | x_3) | x_3, \lambda_3 = 3 = 2 \cdot 3 - 3.$$

Предположим, что для  $n = m$  выполняется равенство

$$\overline{x_1 \vee x_2 \vee x_3 \vee \dots \vee x_m} = (\dots(((x_1 | x_2) | x_3) | x_3) | \dots) | x_m, \lambda_m = 2m - 3,$$

докажем, что выполняется для  $n = m + 1$ , имеем равенство

$$\overline{x_1 \vee x_2 \vee x_3 \vee \dots \vee x_m \vee x_{m+1}} = (\dots(((x_1 | x_2) | x_3) | x_3) | \dots) | x_m | x_{m+1}. \quad (4)$$

Количество операций для функции  $f_1^{m+1}$  получается путем прибавления к  $\lambda_m$  двух логических операций, как видно из равенства (4). Тогда имеем рекуррентное соотношение  $\lambda_{m+1} = \lambda_m + 2$ . По предположению индукции, что  $\lambda_m = 2m - 3$ , получаем  $\lambda_{m+1} = \lambda_m + 2 = 2m - 3 + 2 = 2m + 2 - 3 = 2(m + 1) - 3 = \lambda_{m+1}$ . ■

**Лемма 2.** Поставим в соответствие каждому  $x_i$  из выражения  $f_\wedge^n$  литерал  $g_i$ . Пусть количество литерал, которые являются инверсией  $x_i$ , равно  $n'$ , тогда количество логических операций «|» при переходе от инверсии к «|»  $\mu_{n'}$  имеет вид:

$$\mu_{n'} = \begin{cases} 0, & \text{если } n' = 0, \\ 1, & \text{если } n' = 1, \\ 2n' - 2, & \text{если } n' \geq 2. \end{cases}$$

**Доказательство.** По аналогии с леммой 1 воспользуемся методом математической индукции для доказательства. Для случая  $n' = 0$  очевидно, что  $\mu_0 = 0$ . База индукции

$n' = 1$ . Рассмотрим  $f_\wedge^n$  вида

$$\overline{g_1} \wedge \overline{g_2} \wedge \dots \wedge x_i \wedge \dots \wedge \overline{g_n}.$$

Так как количество литералов, которые являются инверсией  $x_i$ , равно 1, то согласно замечанию переместим его на первое место, в силу коммутативности операции « $\wedge$ »

$$x_i \wedge \overline{g_2} \wedge \dots \wedge \overline{g_1} \wedge \dots \wedge \overline{g_n}.$$

При переходе к базису Шеффера получаем

$$((\dots(\overline{x_i} | g_2) | \dots) | g_n) | g_n = ((\dots((x_i | x_i) | g_2) | \dots) | g_n) | g_n \Rightarrow \mu_1 = 1.$$

$n' = 2$ . По аналогии с шагом для  $n' = 1$  рассмотрим  $f_\wedge^n$  с двумя инверсиями  $x_{i_1}$  и  $x_{i_2}$  без ограничения общности  $i_1 < i_2$ , получаем

$$x_{i_1} \wedge x_{i_2} \wedge \dots \wedge \overline{g_n} = ((\dots(\overline{x_{i_1}} | \overline{x_{i_2}}) | \dots) | g_n) | g_n = ((\dots((x_{i_1} | x_{i_1}) | (x_{i_2} | x_{i_2})) | \dots) | g_n) | g_n \Rightarrow \mu_2 = 2 = 2 \cdot 2 - 2.$$

$n' = 3$ ,  $x_{i_1}, x_{i_2}, x_{i_3}$ ,  $i_1 < i_2 < i_3$

$$\begin{aligned} x_{i_1} \wedge x_{i_2} \wedge x_{i_3} \wedge \dots \wedge \overline{g_n} &= ((\dots((\overline{x_{i_1}} | \overline{x_{i_2}}) | \overline{x_{i_3}}) | \overline{x_{i_3}} \dots) | g_n) | g_n = \\ &= ((\dots(((x_{i_1} | x_{i_1}) | (x_{i_2} | x_{i_2})) | (x_{i_3} | x_{i_3})) | (x_{i_3} | x_{i_3}) \dots) | g_n) | g_n \\ &\Rightarrow \mu_3 = 4 = 2 \cdot 3 - 2. \end{aligned}$$

Предположим, что для  $n = m$  выполняется равенство



2')  $2 \sum_{i=3}^k (I_i + N_i)$  выполняются для скобок  $3, \dots, k$ ;

3')  $2k - 3$  дополнительное слагаемое.

1') Смотрите доказательство пункта 1 теоремы 3.

2') Скобки  $3, \dots, k$  порождают  $(I_{n_3} + \dots + I_{n_k}) + (N_{n_3} + \dots + N_{n_k})$ , как было показано в пункте 1 доказательства теоремы 3. Когда количество конъюнктивных одночленов  $k \geq 3$ , то каждая скобка, начиная с 3-й повторяется 2 раза, следовательно, количество логических операций «|» удваивается  $2 \cdot [(I_{n_3} + \dots + I_{n_k}) + (N_{n_3} + \dots + N_{n_k})]$ .

3') Обозначим  $(g_{1^v} \wedge \dots \wedge g_{n^v}) = \sigma_v$ , тогда выражение (9) будет иметь вид

$$\sigma_1 \vee \sigma_2 \vee \dots \vee \sigma_3,$$

переходя к базису Шеффера получаем

$$(\dots(((\sigma_1 | \sigma_2) | \sigma_3) | \dots) | \sigma_k) | \sigma_k,$$

где количество символов согласно лемме 1 равно  $2k - 3$ . ■

Полученные формулы (6) и (7) справедливы при выполнении замечания алгоритма. Однако предложенная формула не срабатывает при малом количестве переменных в дизъюнктивных одночленах. Примером может служить случай, который рассматривался в начале раздела (2), (3). Применяя формулу, получаем  $G_{2,1}^{0,1} = 4$ , хотя логических операций всего 2. Аналогичная формула и для перехода к базису Пирса.

### Заключение

При осуществлении перехода от стандартного базиса к базисам Шеффера и Пирса «традиционным» образом количество операций возрастает нелинейно. Анализ полученных формул для количества логических операций  $G_k$  показывает, что в случае использования предложенных алгоритмов количество логических операций, а в свою очередь и количество логических элементов в устройствах цифровой техники, будет увеличиваться линейно в зависимости от количества переменных подаваемых на вход микросхемы, что определяет практическую ценность полученных результатов.

### Литература

1. Горбатов, В.А. Фундаментальные основы дискретной математики / В.А. Горбатов. – М.: Наука, 2000. – 540 с.
2. Кузнецов, О.П. Дискретная математика для инженера / О.П. Кузнецов. – СПб.: Изд-во «Лань», 2009. – 394 с.
3. Меньших, В.В. Дискретная математика: учебник / В.В. Меньших, А.Н. Копылов, В.А. Кучер, С.А. Телкова. – Воронеж: Воронежский институт МВД России, 2016. – 228 с.

*Поступила в редакцию 18 июля 2022 г.*

### Сведения об авторах

Меньших Валерий Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры математики и моделирования систем, Воронежский институт МВД России, г. Воронеж, Российская Федерация, e-mail: menshikh@list.ru

Никитенко Виталий Алексеевич – адъюнкт, Воронежский институт МВД России, г. Воронеж, Российская Федерация, e-mail: vitalijnikitenko82043@gmail.com

## MINIMIZATION OF REPRESENTATIONS OF THE LOGICAL FUNCTION IN SCHAEFFER AND PIERCE BASES

V.V. Menshikh, V.A. Nikitenko

Voronezh Institute of the Ministry of Internal Affairs of Russia, Voronezh, Russian Federation  
E-mail: menshikh@list.ru

**Abstract.** The paper studies the representation of arbitrary logical functions in Schaeffer and Pierce bases. For this purpose, recurrent dependencies of the representation of disjunctive and conjunctive monomials in these bases were initially established. Then generalizations were made to the arbitrary logical formulas presented in the form of disjunctive and conjunctive normal forms. Estimates were obtained for the number of operations in logical formulas during the transition to the Schaeffer and Pierce bases.

**Keywords:** *disjunctive monomial; conjunctive monomial; Schaeffer's basis; Pierce's basis; Boolean variable; Boolean function.*

### References

1. Gorbatov V.A. *Fundamental'nye osnovy diskretnoy matematiki* (Fundamental foundations of discrete mathematics). Moscow, Nauka Publ., 2000, 540 p. (in Russ.).
2. Kuznetsov O.P. *Diskretnaya matematika dlya inzhenera* (Discrete mathematics for an engineer). Saint-Petersburg, Lan' Publ, 2009, 394 p. (in Russ.).
3. Men'shikh V.V., Kopylov A.N., Kucher V.A., Telkova S.A. *Diskretnaya matematika* (Discrete mathematics). Voronezh, Voronezhskiy institut MVD Rossii Publ., 2016, 228 p.

*Received July 18, 2022*

### Information about the authors

Menshikh Valery Vladimirovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Professor of the Mathematical and Modeling System Department, Voronezh Institute of the Ministry of Internal Affairs of Russia, Voronezh, Russian Federation, e-mail: menshikh@list.ru

Nikitenko Vitaly Alekseevich is Post-graduate Student, Voronezh Institute of the Ministry of Internal Affairs of Russia, Voronezh, Russian Federation, e-mail: vitalijnikitenko82043@gmail.com

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАДАЧИ ГРАНИЧНОГО УПРАВЛЕНИЯ И ФИНАЛЬНОГО НАБЛЮДЕНИЯ ДЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ НЕЛИНЕЙНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ

**К.В. Перевозчикова, Н.А. Манакова**

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: perevozhchikovakv@susu.ru, manakovana@susu.ru

**Аннотация.** Статья посвящена исследованию задачи граничного управления и финального наблюдения для одной вырожденной математической модели нелинейной фильтрации, основанной на уравнении Осколкова, с начальным условием Шоултера–Сидорова. Данная модель относится к классу полулинейных моделей соболевского типа, в которых нелинейный оператор является  $p$ -коэрцитивным и  $s$ -монотонным. Впервые рассмотрена задача граничного управления и финального наблюдения для полулинейной модели соболевского типа и найдены условия существования пары управление–состояние изучаемой задачи.

*Ключевые слова:* задача граничного управления и финального наблюдения; математическая модель нелинейной фильтрации; уравнения соболевского типа.

## Введение

Целью работы является исследование задачи граничного управления и финального наблюдения

$$J(x(T), u) \rightarrow \inf \quad (1)$$

для математической модели нелинейной фильтрации, которая базируется на уравнении Осколкова

$$\frac{\partial}{\partial t}(\lambda - \Delta)x - \alpha \Delta x + |x|^{p-2} x = y, \quad (s, t) \in \Omega \times R_+, \quad \Omega \subset R^n, \quad (2)$$

с начальным условием Шоултера–Сидорова

$$(\lambda - \Delta)(x(s, 0) - x_0(s)) = 0, \quad s \in \Omega, \quad (3)$$

и неоднородным условием Неймана

$$\frac{\partial x}{\partial \mathbf{n}} = u, \quad (s, t) \in \partial\Omega \times R_+. \quad (4)$$

Уравнение (2) впервые описано в работе [1]. Под физическим смыслом уравнения (1) понимается зависимость давления вязкоупругой несжимаемой жидкости от внешней нагрузки. Предполагается, что жидкость фильтруется в пористом пласте. Искомая функция  $x = x(s, t)$  в уравнении (2) описывает изменение давления фильтрующейся жидкости под внешним воздействием  $y = y(s, t)$ . Параметры модели  $\alpha \in R_+$ ,  $\lambda \in R$  описывают вязкие и упругие свойства жидкости. Основываясь на экспериментальных данных показано, что  $\lambda$  может принимать и отрицательные значения [1]. Исследование невырожденного и вырожденного уравнения нелинейной фильтрации (2) было проведено ранее [2, 3], в качестве начально-краевых условий рассматривались начальные условия Коши или Шоултера–Сидорова и однородное условие Дирихле, были найдены условия однозначной разрешимости изучаемых задач в классическом и слабом обобщенном случае. При моделировании различных процессов на основе неклассических вырожденных уравнений в частных производных рассматриваются различные краевые условия: Дирихле [3] или Неймана [4] и начальные условия: Коши [3], Шоултера–Сидорова или многоточечное начально-конечное условие [4]. В данной работе будет рассмотрено неоднородное условие Неймана, что соответствует случаю, когда каждая точка границы пористого пласта постоянно поддерживается при определенном градиенте давления фильтрующейся жидкости (может быть разным в разных концах границы), с течением времени в каждой точке пласта установится свое давление, которое и является решением задачи Неймана при заданных граничных значениях. Модель нелинейной фильтрации (2), (4) принадлежит классу моделей, основанных на полулинейных уравнениях соболевского типа с  $p$ -коэрцитивным и  $s$ -

монотонным оператором [3]. Результаты исследования данного класса моделей и задач управления для них с однородным условием Дирихле, начальным условием Коши или Шоуолтера–Сидорова представлены в обзорной статье [5].

При математическом моделировании различных физических процессов возникает необходимость в управлении компонентами системы, в которой и протекает данный процесс. Предполагается, что динамические системы (системы, которые подвергаются постоянной эволюции во времени) могут находиться в одном из определенного (конечного или бесконечного) числа возможных состояний в каждый момент времени. Управление в данном случае относится к воздействию на изменение текущего состояния и последующее развитие системы. Воздействие, способное изменить состояние и последующее развитие системы, в данной ситуации называется управлением. Что приводит к задаче нахождения «наилучшего» управления процессом.

Целью данной статьи является исследование задачи граничного управления и финального наблюдения для вырожденной математической модели нелинейной фильтрации с условием Шоуолтера–Сидорова. Под граничным управлением понимается поиск функции, заданной на границе, которая переводит систему из заданного начального состояния в требуемое состояние, заданное в конечный момент времени  $T$ . Граничное управление чаще всего применяется для задач колебания стержня и тепломассопереноса. Результаты исследования граничного управления для параболических и гиперболических систем представлены в [6].

### 1. Математическая модель нелинейной фильтрации

Пусть  $N = W_2^1(\Omega)$ ,  $V = L_p(\Omega)$ ,  $H = L_2(\Omega)$ , где  $\Omega$  – ограниченная область с границей класса  $C^\infty$ , определим операторы:

$$\langle Ax, y \rangle = \int_{\Omega} (\lambda xy + \nabla x \cdot \nabla y) ds \quad \forall x, y \in N;$$

$$\langle Cx, y \rangle = \int_{\Omega} \alpha \nabla x \cdot \nabla y ds \quad \forall x, y \in N;$$

$$\langle D(x), y \rangle = \int_{\Omega} |x|^{p-2} xy ds \quad \forall x, y \in V.$$

Пусть  $N^*$  и  $V^*$  являются сопряженными пространствами к  $N$  и  $V$  относительно скалярного произведения  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  в  $N$ . Отметим, что в случае  $n \geq 3$  и  $2 \leq p \leq 2 + \frac{4}{n-2}$  вложения

$$N \subset V \subset H \subset V^* \subset N^* \quad (5)$$

плотны и непрерывны, а вложение  $N \subset H$  компактно.

Рассмотрим однородную задачу Неймана для оператора  $(-\Delta)$  в области  $\Omega$ . Через  $\{\varphi_i\}$  и  $\{\lambda_i\}$  обозначим последовательности собственных функций и значений оператора  $(-\Delta)$ . При этом будем считать, что последовательность собственных значений занумерована по неубыванию с учетом кратности. Операторы, введенные выше, обладают следующими свойствами: оператор  $A: N \rightarrow N^*$  линейный и непрерывный, причем при  $\lambda > -\lambda_1$  оператор  $A$  является неотрицательно определенным; оператор  $C: N \rightarrow N^*$  также линеен и непрерывен, а оператор  $D: V \rightarrow V^*$  обладает свойством гладкости. Рассмотрим проектор

$$Q = \begin{cases} I, & \lambda > -\lambda_1; \\ I - \langle \cdot, \varphi_1 \rangle, & \lambda = -\lambda_1, \end{cases}$$

построим множество

$$\text{coim } A = \begin{cases} N, & \lambda > -\lambda_1; \\ \{x \in N: \langle x, \varphi_1 \rangle = 0\}, & \lambda = -\lambda_1, \end{cases}$$

пространство  $X = \{x \mid x \in L_\infty(0, T; \text{coim } A) \cap L_p(0, T; L_p(\Omega)), x^1 \in L_2(0, T; \text{coim } A)\}$ , здесь  $x^1 = Qx$ ,  
множество

$$M = \begin{cases} N, & \text{при } \lambda > -\lambda_1; \\ \left\{ x \in N: \int_{\Omega} (\alpha \lambda_1 + |x|^{p-2} x - y) \varphi_1 ds - \alpha \int_{\partial\Omega} u \varphi_1 dS = 0 \right\}, & \text{при } \lambda = -\lambda_1. \end{cases}$$

Опираясь на абстрактную схему, представленную в [7], получим, что множество  $M$  является банаховым  $C^1$ -многообразием, которое диффеоморфно подпространству  $\{x \in \mathbf{N} : \int_{\Omega} x \varphi_1 ds = 0\}$ .

В качестве слабого обобщенного решения уравнения (2) будем рассматривать такую вектор-функцию  $x \in X$ , которая удовлетворяет следующему равенству:

$$\int_0^T \int_{\Omega} (-\lambda x \omega_t - \nabla x \cdot \nabla \omega_t + \alpha \nabla x \cdot \nabla \omega + |x|^{p-2} x \omega - y \omega) ds - \alpha \int_{\partial \Omega} u \omega dS \Bigg] dt = \\ = \int_{\Omega} (\lambda x(s,0) \omega(s,0) + \nabla x(s,0) \cdot \nabla \omega(s,0)) ds - \int_{\partial \Omega} u(s,0) \omega(s,0) dS, \\ \omega \in W_2^{1,1}(\Omega \times (0,T)), \omega(s,T) = 0, s \in \Omega; \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{n}}(s,t) = 0, (s,t) \in \partial \Omega \times (0,T).$$

В дальнейшем будем рассматривать приближенное решение задачи (2)–(4) и, согласно проекционному методу, данное решение представим в виде

$$x_m(s,t) = \sum_{i=1}^m a_i(t) \varphi_i(s), \quad m > \dim \ker A, \quad (6)$$

где коэффициенты  $a_i = a_i(t)$ ,  $i = 1, \dots, m$ , определяются как решения системы уравнений

$$\int_{\Omega} (\lambda x_m \varphi_i + \lambda_i x_m \varphi_i + \alpha \lambda_i x_m \varphi_i + |x|^{p-2} x_m \varphi_i) ds = \int_{\Omega} y \varphi_i ds + \alpha \int_{\partial \Omega} u \varphi_i dS, \quad i = 1, \dots, m$$

с начальными условиями

$$\int_{\Omega} (\lambda + \lambda_i)(x_m(s,0) - x_0(s)) \varphi_i(s) ds = 0, \quad i = 1, \dots, m.$$

**Теорема 1.1.** Пусть значения параметров уравнения (2) удовлетворяют условиям  $\lambda \geq -\lambda_1$ ,  $\alpha \in \mathbf{R}_+$ ,  $n \geq 3$ ,  $2 \leq p \leq 2 + \frac{4}{n-2}$ , тогда для любых  $x_0 \in \mathbf{N}$ ,  $u \in L_2(0,T; L_2(\partial \Omega))$ ,  $y \in L_q(0,T; \mathbf{B}^*)$ , таких что выражение  $\int_{\Omega} y \varphi_1 ds + \alpha \int_{\partial \Omega} u \varphi_1 dS$  не зависит от  $t$  в случае  $\lambda = -\lambda_1$ ,  $T \in \mathbf{R}_+$  существует единственное слабое обобщенное решение  $x \in X$  задачи (2)–(4), причем

$$|x|^2 + \|x\|_{L_2(0,T;\mathbf{N})}^2 + \|x\|_{L_p(0,T;\mathbf{B})}^p \leq C(\|y\|_{L_q(0,T;\mathbf{B}^*)}^q + |x_0|^2 + \|u\|_{L_2(0,T;L_2(\partial \Omega))}^2), \quad (7)$$

здесь  $|\cdot|$  – норма, определенная в  $\text{coim } A$ .

Заметим, что доказательство теоремы 1.1 основано на построении априорных оценок, методе фазового пространства, методе монотонности, теореме Банаха–Алаоглу, переходу к слабому пределу и существенно не отличается от схемы доказательства в случае однородной задачи Дирихле [5].

## 2. Задача граничного управления и финального наблюдения

Далее перейдем к исследованию задачи граничного управления и финального наблюдения (1) решениями математической модели нелинейной фильтрации (2), (4) с начальным условием (3). Для рассмотрения вопроса существования решения задачи (1)–(4) необходимо построить пространство управления

$$U = \{u \in L_2(0,T; L_2(\partial \Omega)) : \int_{\Omega} y \varphi_1 ds + \alpha \int_{\partial \Omega} u \varphi_1 dS \text{ не зависит от } t \text{ в случае } \lambda = -\lambda_1\},$$

а также выбрать в нем замкнутое и выпуклое подмножество  $U_{ad} \subset U$ . Для рассматриваемой модели задача граничного управления и финального наблюдения (1) примет вид:

$$J(x(T), u) = \mathcal{G} \|x(T) - x_d\|_{L_p(\Omega)}^p + (1 - \mathcal{G}) \|u - u_{\partial}\|_{L_2(0,T;L_2(\partial \Omega))}^2 \rightarrow \inf, \quad \mathcal{G} \in (0,1), \quad (8)$$

где  $x_d = x_d(s)$  – заданное состояние системы в конечный момент времени  $t = T$ ,  $u_{\partial} = u_{\partial}(s,t)$  – заданное значение производной по направлению вектора нормали, заданное на  $\partial \Omega$ . Также заметим, что решение задачи (2)–(4), (8) заключается в поиске пары функций  $(\tilde{x}(T), \tilde{u})$ , которая удовлетворяет следующему условию:

$$J(\tilde{x}(T), \tilde{u}) = \inf_{(x(T), u)} J(x(T), u),$$

где пара  $(\tilde{x}, \tilde{u}) \in X \times U_{ad}$  удовлетворяет задаче (2)–(4) в слабом обобщенном смысле.

**Замечание 2.1.** Под множеством допустимых пар  $W$  задачи (2)–(4), (8) будем понимать совокупность таких пар  $(x(T), u)$ , которые удовлетворяют задаче (2)–(4) и  $J(x(T), u) < +\infty$ . Если  $U_{ad} = \emptyset$ , то для всех  $u \in U_{ad} \subset U$  множество допустимых пар  $(x(T), u)$  не пусто.

После введения всех необходимых определений и пространств сформулируем и докажем теорему существования решения задачи граничного управления и финального наблюдения распределения давления фильтрующейся жидкости.

**Теорема 2.1.** Пусть значения параметров уравнения (2) удовлетворяют условиям  $\lambda \geq -\lambda_1$ ,  $\alpha \in \mathbb{R}_+$ ,  $n \geq 3$ ,  $2 \leq p \leq 2 + \frac{4}{n-2}$ , тогда для любых  $x_0 \in \mathbb{N}$ ,  $y \in L_q(0, T; \mathbb{B}^*)$ ,  $T \in \mathbb{R}_+$  существует решение  $(\tilde{x}(T), \tilde{u})$  задачи (2)–(4), (8).

**Доказательство.** Доказательство теоремы основано на методе монотонности, методе компактности, теореме Мазура, переходу к слабому пределу и существенно не отличается от схемы доказательства в случае задачи оптимального управления [5]. Приведем краткое изложение докозательства.

1. Поскольку множество допустимых пар  $W$  не пусто, то существует такая последовательность  $\{(x_m(T), u_m)\} \in \mathbb{N} \times U_{ad}$ , что

$$\lim_{m \rightarrow \infty} J(x_m(T), u_m) = \inf_{(x(T), u)} J(x(T), u),$$

тогда из (8) следует ограниченность  $\{u_m\}$  в  $U$ :

$$\|u_m\|_U \leq \text{const}, \quad \forall m. \quad (9)$$

В силу оценки (9) выберем слабо сходящуюся подпоследовательность последовательности  $\{u_m\}$ :  $u_m \rightharpoonup \tilde{u}$ . Согласно теореме Мазура точка  $\tilde{u} \in U_{ad}$ . Пусть  $x_m = x(u_m)$  слабое обобщенное решение задачи

$$A \frac{d}{dt} x_m + Cx_m + D(x_m) = y, \quad A(x_m(0) - x_0) = 0, \quad (10)$$

$$\frac{\partial x_m}{\partial \mathbf{n}} = u_m, \quad (s, t) \in \partial\Omega \times (0, T). \quad (11)$$

В силу выполнения априорной оценки (7) и свойства  $p$ -коэрцитивности оператора  $D$  получим  $\|x_m\|_{L_p(0, T; \mathbb{B})} \leq \text{const} \quad \forall m$ .

2. Переходя к пределу в уравнении состояния и используя методы компактности и монотонности, получим, что слабый предел последовательности  $\{(x_m, u_m)\}$  удовлетворяет уравнению состояния, начальному и граничному условиям:

$$A \frac{d\tilde{x}}{dt} + C\tilde{x} + D(\tilde{x}) = y, \quad A(\tilde{x}(0) - \tilde{x}_0) = 0, \quad \frac{\partial \tilde{x}}{\partial \mathbf{n}} = \tilde{u} \text{ на } \partial\Omega.$$

3. Доказательство равенства  $D(\tilde{x}) = \mu$  основано на методе монотонности вследствие  $s$ -монотонности оператора  $D$  [5, 7].

4. Тогда  $\tilde{x} = \tilde{x}(\tilde{u})$  и  $\liminf J(u_m) \geq J(\tilde{u})$ . Следовательно, граничное управление решениями задачи (2)–(4) существует.

*Работа проводилась при поддержке гранта Минобрнауки РФ № FENU-2020-0022 (2020072GZ).*

### Литература

1. Осколков, А.П. Начально-краевые задачи для уравнений движения нелинейных вязкоупругих жидкостей / А.П. Осколков // «Краевые задачи математической физики и смежные вопросы теории функций. 17», Зап. научн. сем. ЛОМИ. – 1985. – Т. 147. – С. 110–119.
2. Амфилохийев, В.Б. Течения полимерных растворов при наличии конвективных ускорений / В.Б. Амфилохийев, Я.И. Войткунский, Н.П. Мазаева // Труды Ленинградского кораблестроительного института. – 1975. – Т. 96. – С. 3–9.

3. Свиридюк, Г.А. Фазовое пространство одной обобщенной модели Осколкова / Г.А. Свиридюк, В.О. Казак // Сибирский математический журнал. – 2003. – Т. 44, № 5. – С. 1124–1131.

4. Kovaleva, L.A. Stochastic Barenblatt–Zheltoz–Kochina Model with Neumann Condition and Multipoint Initial-Final Value Condition / L.A. Kovaleva, A.S. Konkina, S.A. Zagrebina // Journal of Computational and Engineering Mathematics. – 2022. – Vol. 9, no. 1. – С. 24–34.

5. Манакова, Н.А. Математические модели и оптимальное управление процессами фильтрации и деформации / Н.А. Манакова // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2015. – Т. 8, № 3. – С. 5–24.

6. Лионс, Ж.-Л. Управление сингулярными распределенными системами / Ж.-Л. Лионс. – М.: Наука, 1987. – 367 с.

7. Свиридюк, Г.А. Разрешимость неоднородной задачи для обобщенного фильтрационного уравнения Буссинеска / Г.А. Свиридюк, И.Н. Семенова // Дифференциальные уравнения. – 1988. – Т. 24, № 9. – С. 1607–1611.

*Поступила в редакцию 11 октября 2022 г.*

### Сведения об авторах

Перевозчикова Ксения Владимировна – старший преподаватель, кафедра уравнений математической физики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: perevozchikovakv@susu.ru

Манакова Наталья Александровна – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой, кафедра уравнений математической физики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: manakovana@susu.ru

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2022, vol. 14, no. 4, pp. 28–33*

---

DOI: 10.14529/mmph220404

## STUDY OF THE OBJECTIVES OF BOUNDARY CONTROL AND FINAL OBSERVATION FOR THE MATHEMATICAL MODEL OF NON-LINEAR FILTRATION

**K.V. Perevozchikova, N.A. Manakova**

*South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
E-mail: perevozchikovakv@susu.ru, manakovana@susu.ru*

**Abstract.** The article is devoted to studying the problem of boundary control and final observation for a degenerate mathematical model of non-linear filtration, based on the Oskolkov equation, with the initial condition of Showalter–Sidorov. This model belongs to the class of semilinear models of the Sobolian type, in which the nonlinear operator is  $p$ -coercive and  $s$ -monotonic. The paper for the first time considers the problem of boundary control and final observation for the semilinear model of the Sobolian type and establishes the conditions of the existence of the control-state pair of the matter being studied.

**Keywords:** *problem of boundary control and final observation; mathematical model of non-linear filtration; Sobolev-type equations.*

### References

1. Oskolkov A.P. Initial-Boundary Value Problems for the Equations of Motion of Nonlinear Viscoelastic Fluids. *Zap. Nauchn. Semin. Leningr. Otd. Mat. Inst. Steklova*, 1985, Vol. 147, pp. 110–119. (in Russ.).

2. Amfilokhiev V.B., Voytkunskiy Ya.I., Mazaeva N.P. *Techeniya polimernykh rastvorov pri nalichii konvektivnykh uskoreniy (The Flow of Polymer Solutions in the Presence of Convective Accelerations)*. *Trudy Leninigradskogo korablestroitel'nogo instituta*, 1975, vol. 96, pp. 3–9. (In Russ.).

3. Sviridyuk G.A., Kazak V.O. The Phase Space of One Generalized Model by Oskolkov. *Siberian Mathematical Journal*, 2003, Vol. 44, no.5, pp. 877–882. DOI: 10.1023/A:1026080506657

4. Kovaleva L.A. , Konkina A.S. , Zagrebina S.A. Stochastic Barenblatt–Zheltov–Kochina Model with Neumann Condition and Multipoint Initial-Final Value Condition. *Journal of Computational and Engineering Mathematics*, 2022, Vol. 9, no. 1, pp. 24–34. DOI: 10.14529/jcem220103

5. Manakova N.A. Mathematical Models and Optimal Control of the Filtration and Deformation Processes. *Bulletin of the South Ural State University. Series “Mathematical Modelling, Programming and Computer Software”*, 2015, Vol. 8, no. 3, pp. 5–24. DOI: 10.14529/mmp150301

6. Lions J.-L. *Contrôle Optimal de Systèmes Gouvernés par des Equations aux Dérivées Partielles*. Paris, Dunod, 1968, 426 p. (in French).

7. Sviridyuk G.A., Semenova I.N. Solvability of an Inhomogeneous Problem for the Generalized Boussinesq Filtration Equations. *Differential Equations*, 1988, Vol. 24, no. 9, pp. 1065–1069.

*Received October 11, 2022*

### **Information about the authors**

Perevozchikova Ksenia Vladimirovna is Senior Lecturer, Department of Mathematical Physics Equations, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: perevozchikovakv@susu.ru

Manakova Natalia Aleksandrovna is Doctor Physics and Mathematics, head of the department, Department of Mathematical Physics Equations, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: manakovana@susu.ru

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕПРЕРЫВНОГО ЗАПАЗДЫВАНИЯ В СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАДАЧЕ ДЛЯ ОПЕРАТОРА ЧЕБЫШЁВА ПЕРВОГО РОДА

**А.И. Седов**

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: sedovai@susu.ru

**Аннотация.** Рассматривается возмущенный сингулярный обыкновенный дифференциальный оператор Чебышёва первого рода с непрерывным запаздыванием. Для произвольной числовой последовательности мало отличающейся от последовательности собственных чисел невозмущенного оператора, ставится задача нахождения оператора возмущения, содержащего непрерывное запаздывание. Доказывается теорема существования такого оператора. Построен и обоснован алгоритм нахождения функции запаздывания в виде ряда Фурье. Обоснование алгоритма опирается на теорию регуляризованных следов.

*Ключевые слова:* регуляризованный след; сингулярный обыкновенный дифференциальный оператор; собственные числа.

### Введение

Рассматривается обратная спектральная задача для сингулярного дифференциального оператора Чебышёва первого рода с запаздыванием специального вида. Обратные спектральные задачи часто возникают в естественных науках и инженерии (см., например, монографию [1] и ссылки в ней). Обратные спектральные задачи заключаются в построении операторов с заданными спектральными характеристиками. Для классических операторов Штурма–Лиувилля обратные задачи изучены достаточно полно, основные результаты можно найти в [2, 3]. Однако дифференциальные операторы с задержкой по существу труднее для исследования, так как основные методы в обратной проблемной теории (метод оператора преобразования и метод спектральных отображений [2, 3]) не работают для операторов с задержкой. В настоящей работе метод регуляризованных следов применяется при решении обратной задачи для сингулярного обыкновенного дифференциального оператора с непрерывным запаздыванием успешно применённый в [4] для оператора Штурма–Лиувилля.

### Постановка задачи

Рассмотрим дифференциальный оператор  $T$ :

$$Ty(x) = -(1-x^2)y''(x) + 2xy'(x),$$

действующий в пространстве  $L_2 = L_2^\omega[-1,1]$ ,  $\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ . Известно [5], что его собственным

числам  $\lambda_n = n^2$  соответствуют ортонормированные в  $L_2$  собственные функции  $v_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} T_n(x)$ ,  $T_n$  – многочлены Чебышёва первого рода степени  $n$  со старшим коэффициентом  $2^{n-1}$ ,

$$T_n(\cos \theta) = \cos(n\theta), \theta \in [0, \pi], n = 1, 2, \dots$$

Пусть  $P$  – оператор, действующий в  $L_2$ :

$$Py(x) = \left(2 + p'(x)\sqrt{1-x^2}\right)y(\cos(\arccos x - p(x))) - y(1).$$

Поставим следующую обратную задачу спектрального анализа: для заданной возрастающей последовательности чисел  $\{\xi_n\}$  найти функцию  $p$ , такую, что спектр оператора  $\sigma(T+P) = \{\mu_n\}$  совпадал бы с заданной последовательностью  $\{\xi_n\}$ .

Дополнительно будем предполагать, что строго убывающая функция  $p$  с непрерывной производной удовлетворяет условиям:

$$p(1) = 0, p(-1) = \pi, \left\| \frac{p'}{\omega} \right\|_{L_2} \leq \|p\|_{L_2}.$$

Будем решать эту задачу, используя метод обратной спектральной задачи рассмотренный в [4].

### Основные результаты

Поскольку оператор  $T$  – самосопряженный, а  $P$  – ограниченный, то имеет место равенство (см. напр. [6])

$$\mu_n = \lambda_n + (Pv_n, v_n) + \alpha_n(p),$$

где  $\alpha_n(p)$  поправка теории возмущений

$$\alpha_n(p) = \frac{-1}{2\pi i} \int_{\gamma_n} \lambda Sp[R(\lambda)(PR_0(\lambda))]^2 d\lambda,$$

$\lambda \in \gamma_n = \left\{ \lambda : (\lambda - \lambda_n) = \frac{1}{2}(\lambda_{n+1} + \lambda_n) \right\}$ ,  $Sp$  – след оператора,  $R$  и  $R_0$  – резольвенты операторов  $T$  и  $T+P$  соответственно. Можно показать (см. напр. [4, 7]), что для поправок справедлива

**Теорема 1.** Если  $\|P_j\| < r$ , то выполнено неравенство

$$|\alpha_n(p_1) - \alpha_n(p_2)| \leq \frac{r r_n}{1 - \frac{r}{r_n}} \max_{\lambda \in \gamma_n} \|R_0(\lambda)\|_2^2 \|P_1 - P_2\|.$$

Здесь  $\|\cdot\|_2$  – норма Гильберта–Шмидта,  $r_n = \frac{1}{2}(\lambda_{n+1} - \lambda_n)$ .

Преобразуем выражение  $(Pv_n, v_n)$ .

$$\begin{aligned} (Pv_n, v_n) &= \int_{-1}^1 \left[ \left( 2 + p'(x)\sqrt{1-x^2} \right) v_n(\cos(\arccos x - p(x))) - v_n(1) \right] v_n(x) \omega(x) dx = \\ &= \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \left[ \left( 2 + p'(x)\sqrt{1-x^2} \right) \cos(n(\arccos x - p(x))) - v_n(1) \right] v_n(x) \omega(x) dx. \end{aligned}$$

Сделаем замену переменной  $x = \cos \theta$ .

$$\begin{aligned} (Pv_n, v_n) &= \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \left[ \left( 2 + \left( p'(x) \right)_{x=\cos \theta} \sin \theta \right) \cos(n(\theta - p(\cos \theta))) - v_n(1) \right] \cos(n\theta) d\theta = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \left( 2 + \left( p'(x) \right)_{x=\cos \theta} \sin \theta \right) \left[ \cos(n(2\theta - p(\cos \theta))) + \cos(np(\cos x)) \right] d\theta - \frac{2v_n(1)}{\pi} \int_0^\pi \cos(n\theta) d\theta = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \left( 2 + \left( p'(x) \right)_{x=\cos \theta} \sin \theta \right) \cos(n(2\theta - p(\cos \theta))) d\theta + \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \cos(np(\cos x)) d\theta + \\ &= \frac{+1}{\pi} \int_0^\pi \left( p'(x) \right)_{x=\cos \theta} \sin \theta \cos(np(\cos x)) d\theta = \end{aligned}$$

Сделаем замены: в первом интеграле  $z = 2\theta - p(\cos \theta)$ , в третьем  $u = p(\cos \theta)$  и, учитывая, что  $p(1) = 0, p(-1) = \pi$ , получим

$$(Pv_n, v_n) = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \cos(np(x)) dx = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi (p-1(t))' \cos(nt) dt.$$

Или  $(Pv_n, v_n) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} p_n$ , где  $p_n$  коэффициент разложения производной функции  $(p^{-1})'$  обратной к функции  $p$  в ряд Фурье по косинусам  $\sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos nx$ .

Таким образом

$$\mu_n = \lambda_n + \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_n + \alpha_n(p). \quad (1)$$

Умножим это тождество на  $\cos nx$  и просуммируем по  $n$ , добавив слагаемое  $c$  для образования базиса пространства  $L_2^\omega[-1, 1]$ , получим

$$(p^{-1}(x))' = \sum_{n=1}^{\infty} (\mu_n - \lambda_n - \alpha_n(p)) \cos nx + c.$$

Наконец, проинтегрируем от 0 до  $x$ , учитывая  $p(1) = 0$ :

$$p^{-1}(x) - 1 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n - \lambda_n - \alpha_n(p))}{n} \sin nx + cx.$$

Воспользуемся вторым условием  $p(-1) = \pi$  и найдем  $c = \frac{-2}{\pi}$

**Теорема 2.** Если для последовательности  $\xi_n$  выполняются неравенства:

$$\gamma^2 := \frac{\sqrt{\pi} r^2}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{r_n}{n \left(1 - \frac{r}{r_n}\right)} \max_{\lambda \in \gamma_n} \|R_0(\lambda)\|_2^2 \right)^2 < 1,$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\xi_n - \lambda_n|^2}{n^2} < (1 - \gamma)^2 r^2,$$

то существует функция  $p \in U(0, r) \subset L_2(0, \pi)$  такая, что для спектра оператора  $\sigma(T + P) = \{\mu_n\}$  имеют место равенства  $\mu_n = \xi_n$ .

Доказательство. В пространстве  $L_2(0, \pi)$  рассмотрим уравнение относительно  $p$ :

$$p^{-1} = \alpha_0 - \alpha(p), \quad (2)$$

где

$$\alpha_0 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\xi_n - \lambda_n)}{n} \sin nx - \frac{2}{\pi} x + 1, \quad \alpha(p) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha_n(p)}{n} \sin nx.$$

Введем операторы  $A: U(0, r) \subset L_2(0, \pi) \rightarrow L_2(0, \pi)$

$$Ap = \alpha_0 - \alpha(p)$$

и  $B: L_2(0, \pi) \rightarrow L_2(0, \pi)$

$$Bp = p^{-1}.$$

Так как  $B^2 p = p$ , то уравнение  $Bp = Ap$  эквивалентно уравнению  $p = A^2 p$ . Покажем, что  $A$  сжимающий оператор. Имеем

$$\|Ap_1 - Ap_2\|^2 = \|\alpha(p_1) - \alpha(p_2)\|^2 =$$

$$\frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\alpha_n(p_1) - \alpha_n(p_2)|^2}{n^2} \leq \frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{rr_n}{n \left(1 - \frac{r}{r_n}\right)} \max_{\lambda \in \gamma_n} \|R_0(\lambda)\|_2 \right)^2 \|P_1 - P_2\|^2 \leq$$

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{rr_n}{n \left(1 - \frac{r}{r_n}\right)} \max_{\lambda \in \gamma_n} \|R_0(\lambda)\|_2 \right)^2 \|p_1 - p_2\|^2 = \gamma^2 \|p_1 - p_2\|^2.$$

Таким образом,  $A$  является сжимающим оператором. Уравнение имеет единственное решение по комбинированному принципу сжимающих отображений.

Для доказательства того, что решение этого уравнения является решением поставленной задачи, очевидно, достаточно продифференцировать уравнение (2), затем умножить полученное тождество на  $\sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos nx$  и проинтегрировать в пределах от 0 до  $\pi$ . Получим тождество

$$\xi_n = \lambda_n + \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_n + \alpha_n(p).$$

Сравнивая его с (1) получим равенства  $\mu_n = \xi_n$ . Теорема доказана.

### Алгоритм

Используем известную [8] вторую поправку теории возмущений для конструирования алгоритма.

$$\alpha_n^2(p) = \frac{1}{2} \sum_{k \neq n} \frac{(Pv_k, v_n)(Pv_n, v_k)}{\lambda_n - \lambda_k}.$$

Приведем алгоритм поиска приближённого решения, вытекающего из доказательства теоремы.

Зададим точность  $\delta$ .

1. Выберем число слагаемых ряда  $m$  чем больше оно, тем более точным будет приближительное решение. Если числа  $\xi_n$  конечное множество, то  $m$  определяется естественным образом.

2. Положим  $p_0 \equiv 0$ .

3. Далее

$$\hat{p}_1 = \sum_{n=1}^m \frac{(\xi_n - \lambda_n)}{n} \sin nx - \frac{2}{\pi} x + 1.$$

$$p_1 = \sum_{n=1}^m \frac{(\xi_n - \lambda_n)}{n} \sin nx - \frac{2}{\pi} x + 1 + \sum_{n=1}^m \sum_{i \neq n}^m \frac{(\hat{P}_1 v_n, v_i)(v_n, \hat{P}_1 v_i)}{2n(\lambda_n - \lambda_i)} \sin nx.$$

4. Начнем итерации

$$\hat{p}_{j+1} = \sum_{n=1}^m \frac{(\xi_n - \lambda_n)}{n} \sin nx - \frac{2}{\pi} x + 1 + \sum_{n=1}^m \sum_{i \neq n}^m \frac{(P_j v_n, v_i)(v_n, P_j v_i)}{2n(\lambda_n - \lambda_i)} \sin nx,$$

$$p_{j+1} = \sum_{n=1}^m \frac{(\xi_n - \lambda_n)}{n} \sin nx - \frac{2}{\pi} x + 1 + \sum_{n=1}^m \sum_{i \neq n}^m \frac{(\hat{P}_{j+1} v_n, v_i)(v_n, \hat{P}_{j+1} v_i)}{2n(\lambda_n - \lambda_i)} \sin nx.$$

5. Вычислим

$$\mu_n = \lambda_n + (P_{j+1} v_n, v_n) + \sum_{i \neq n}^m \frac{(P_{j+1} v_n, v_i)(v_n, P_{j+1} v_i)}{2(\lambda_n - \lambda_i)}.$$

6. Сравним числа  $\xi_n$  и  $\mu_n$  по какому-либо критерию, например  $\sum_{n=1}^m |\xi_n - \mu_n|^2 < \delta$ . Если значение критерия уменьшилось по сравнению с предыдущим, то переходим к следующей итерации, т. е. к шагу 4. Если значение увеличилось и требуемая точность была достигнута при предыдущей итерации, то найдено приближительное решение  $p \approx p_{j+1}$ . Если значение увеличилось, но необходимая точность не была достигнута на предыдущей итерации, то увеличим  $m$  и перейдем к шагу 1.

### Литература

1. Hale, J. Theory of functional-differential equations / J. Hale. – New York, Springer-Verlag, 1977. – 366 p.
2. Freiling, G. Inverse Sturm–Liouville Problems and Their Applications / G. Freiling, V. Yurko. – Huntington, NY: Nova Science Publishers, 2001. – 305 p.
3. Yurko, V. Method of Spectral Mappings in the Inverse Problem Theory. Inverse and Ill-posed Problems Series / V. Yurko. – Utrecht, VSP, 2002. – 303 p.
4. Sedov, A.I. About one problem of identification of delay by spectral data / A.I. Sedov, G.A. Kameneva, T.A. Bondarenko // Lecture Notes in Electrical Engineering. – 2021. – Vol. 729 LNEE. – P. 306–315.
5. Бейтмен, Г. Высшие трансцендентные функции: в 2 т. / Г. Бейтмен, А. Эрдейи. – М.: Наука, 1974. – Т. 2. – 295 с.
6. Садовничий, В.А. Теория операторов / В.А. Садовничий. – М.: Высшая школа, 1999. – 367 с.
7. Седов, А.И. Об обратной задаче спектрального анализа / А.И. Седов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2011. – № 4(221), Вып. 7. – С. 91–99.
8. Рид, М. Методы современной математической физики: Т.4. Анализ операторов / М. Рид, Б. Саймон. – М.: Мир, 1982. – 430 с.

*Поступила в редакцию 18 мая 2022 г.*

### Сведения об авторе

Седов Андрей Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра информационно-измерительной техники, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: sedovai@susu.ru

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2022, vol. 14, no. 4, pp. 34–39*

---

DOI: 10.14529/mmph220405

## DETERMINING OF CONTINUOUS DELAY IN A SPECTRAL PROBLEM FOR CHEBYSHEV OPERATOR OF THE FIRST KIND

**A.I. Sedov**

*South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
E-mail: sedovai@susu.ru*

**Abstract.** A perturbed singular ordinary differential Chebyshev operator of the first kind with continuous delay is considered in this paper. For an arbitrary numerical sequence that does not differ much from eigenvalues sequence of an unperturbed operator, a problem is set to find the perturbation operator containing a continuous delay. A theorem of the existence of such an operator is being proved. An algorithm of finding the delay function in the form of a Fourier series is built and substantiated. The algorithm substantiation is based on the regularized traces theory.

*Keywords:* regularized trace; singular ordinary differential operator; eigenvalues.

## References

1. Hale J. *Theory of functional-differential equations*. New York, Springer-Verlag, 1977, 366 p. DOI: 10.1007/978-1-4612-9892-2
2. Freiling G., Yurko V. *Inverse Sturm–Liouville Problems and Their Applications*. Huntington, NY: Nova Science Publishers, 2001, 305 p.
3. Yurko V. *Method of Spectral Mappings in the Inverse Problem Theory*. Inverse and Ill-posed Problems Series. Utrecht, VSP, 2002, 303 p.
4. Sedov A.I., Kameneva G.A., Bondarenko T.A. About One Problem of Identification of Delay by Spectral Data. *Lecture Notes in Electrical Engineering*, 2021, Vol. 729 LNEE, pp. 306–315.
5. Bateman H., Erdelyi A. *Vysshie transtsendentnye funktsii. T. 2* (Higher transcendental functions. Vol. 2.), Moscow, Nauka Publ., 1974, 295 p.
6. Sadovnichiy V.A. *Teoriya operatorov* (Operator Theory). Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1999, 367 p. (in Russ.).
7. Sedov A.I. About the inverse problem of the spectral analysis. *Bulletin of the South Ural State University. Series “Mathematical Modelling, Programming and Computer Software”*, 2011, no. 4(221), Iss. 7, pp. 91–99. (in Russ.).
8. Rid M., Saymon B. *Metody sovremennoy matematicheskoy fiziki: T.4. Analiz operatorov* (Methods of Modern Mathematical Physics: Vol. 4. Operator Analysis). Moscow, Mir Publ., 1982, 430 p. (in Russ.).

*Received May 18, 2022*

**Information about the author**

Sedov Andrey Ivanovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Information and Measuring Equipment Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: sedovai@susu.ru

## ФИЛЬТРАЦИЯ НАТУРНЫХ ДАННЫХ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ ТУРБУЛЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПОДХОДА LES

А.И. Сухинов<sup>1</sup>, С.В. Проценко<sup>2</sup>, Е.А. Проценко<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Донской государственный технический университет, г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация

<sup>2</sup> Таганрогский институт имени А.П. Чехова (филиал) Ростовского государственного экономического университета (РИНХ), г. Таганрог, Российская Федерация  
E-mail: sukhinov@gmail.com

**Аннотация.** Турбулентность и последующее перемешивание являются важными механизмами, определяющими динамику прибрежной зоны, перенос импульса, массы и тепла. В работе мелкомасштабное движение исключается из уравнений Навье-Стокса при помощи применения операции фильтрации и моделируется с использованием подсеточных моделей. Для этого в двумерном и трехмерном случаях применены различные виды фильтров: коробочный фильтр, фильтр Гаусса и фильтр Фурье, с постепенным уменьшением ширины фильтра, что позволяет воспроизвести более широкий частотный диапазон флуктуаций решения. Процедуре фильтрации подвержены натурные данные, полученные в ходе экспедиции в Центрально-Восточной части Азовского моря и в Таганрогском заливе на НИС «Денеб» Южного научного центра РАН. Для измерения трехмерного вектора скорости движения водной среды использовался гидрофизический ADCP-зонд Workhorse Sentinel 600, с помощью которого получено более 3 000 000 исходных измерений, в каждой точке (на каждой станции, которых 17) – более 150 000. Полученные данные планируется использовать для численного моделирования трехмерных турбулентных течений с применением подхода LES и сопоставления с результатами осреднения по RANS. В статье рассмотрены возможности применения различных типов аппроксимаций для параметризации вертикального турбулентного обмена. Проведено сравнение алгебраических моделей расчета коэффициента вертикального турбулентного обмена и полуэмпирических моделей турбулентности.

*Ключевые слова:* турбулентность; метод моделирования крупных вихрей; подсеточные модели; коробочный фильтр; фильтр Гаусса и фильтр Фурье; гидродинамика.

### Введение

В прибрежных системах велика роль вертикального турбулентного обмена. В ряде случаев он определяет транспорт биогенных веществ, от него зависит насыщенность водной среды кислородом, а также возникновение заморных явлений при отсутствии турбулентного перемешивания в водной толще. Задание коэффициента вертикального турбулентного обмена в виде константы приводит к искаженной картине распределения скоростей водной среды, а также концентраций биогенных веществ и кислорода по вертикальному направлению и не обеспечивает требуемую точность расчета 3D-течений, что подтверждается сравнением результатов численного моделирования и непосредственно измерений 3D-вектора скоростей водной среды при помощи оборудования типа ADCP (Acoustic Doppler Current Profiler).

Трехмерный характер течения, стохастическая природа и широкий пространственно-временной спектр турбулентности делает предсказательное моделирование характеристик сложных турбулентных течений сложной и трудоемкой задачей. Исходная предпосылка математического моделирования турбулентных течений в рамках феноменологического подхода состоит в предположении о приемлемости уравнений Навье–Стокса для интерпретации турбулентных течений и предсказания их мгновенных характеристик.

Существует необходимость расчета вертикальной структуры течения для решения ряда прикладных задач, в первую очередь антропогенного загрязнения акваторий, а также оценки надежности гидротехнических сооружений – защитных конструкций, нефтяных платформ, волнопре-

образователей и других устройств, установленных в районах шельфовой зоны и мелководных морях, при наложении эффектов прилива и штормового нагона [1].

Несмотря на проведение широкого круга исследований, ориентированных на рассматриваемую проблему, в них не была достаточно полно отражена вся совокупность разнообразных факторов и процессов, влияющих на структуру и параметры вертикального турбулентного перемешивания [2–4]. Это указывает на необходимость проведения системного анализа проблемы и построения взаимосвязанного комплекса моделей, высокопроизводительных алгоритмов и программ. Относительно небольшое число публикаций, посвященных моделированию разномасштабного вертикального турбулентного перемешивания и сложность получения натуральных данных в реальной области, свидетельствует о необходимости привлечения развитых в авторском коллективе 3D моделей гидродинамики, которые учитывают специфику прибрежных систем, и обладают, по сравнению с известными моделями, лучшей точностью и повышенным запасом устойчивости, при перепадах глубин в 15–20 раз. Проведенный обзор существующих на сегодняшний день математических моделей гидродинамики показал, что для расчета гидродинамической составляющей используется гидростатическое приближение, такой подход не позволяет учитывать ускорение движения водного потока по вертикальной составляющей. При параметризации моделей турбулентного перемешивания широко используются упрощенные функциональные зависимости, не связанные с реалистическими моделями гидрофизики, что приводит к моделям, не обладающим должной прогностической ценностью. Немногие из работ посвящены параллельной численной реализации задач данного класса. Несмотря на большое количество существующих программных комплексов, позволяющих моделировать гидродинамические процессы: POM (Princeton Ocean Model), EFDC (The Environmental Fluid Dynamics Code), DELFT, Mars3D, CARDINAL (Coastal Area Dynamics Investigation Algorithm, ветро-волновые модели третьего поколения WAM, SWAN (Simulation Waves Nearshore), WaveWatch, данные разработки обладают рядом существенных недостатков [5–8]. Проведенный анализ этих и других моделей показывает, что подавляющее большинство имеющихся подходов к построению моделей гидродинамических процессов в прибрежной зоне мелководных водоемов основывается на приближении мелкой воды, или в лучшем случае на гидростатическом приближении, которое не учитывает турбулентный теплообмен по вертикальному направлению. С другой стороны, имеющиеся опытные данные свидетельствуют о существенном влиянии этих процессов на гидрофизику береговой зоны, дислокацию солей и газовый режим. Поэтому построение, изучение и применение пространственно-трехмерных моделей гидродинамики, предусматривающих механизмы турбулентного обмена по вертикальной координате, представляется актуальной научной и важной прикладной проблемой.

### Метод моделирования крупных вихрей (LES)

Среди основных методов численного моделирования трехмерных турбулентных течений необходимо выделить прямое численное моделирование (Direct Numerical Simulation, DNS), моделирование крупных вихрей (Large Eddy Simulation, LES) и решение осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса (Reynolds Averaged Navier-Stokes equations, RANS). Имеются также различные промежуточные подходы, сочетающие в себе те или иные черты RANS, LES и DNS, например, метод моделирования отсоединенных вихрей (Detached Eddy Simulation, DES) [9].

Прямое численное моделирование (DNS) предполагает численное решение полных нестационарных трехмерных уравнений Навье–Стокса. При таком подходе разрешаются все масштабы турбулентного движения. Для использования DNS требуются мощные вычислительные ресурсы, а возможности его применения ограничиваются расчетами течений с простой геометрией и малыми числами Рейнольдса.

Использование осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса (RANS) требует намного меньших вычислительных ресурсов. Данный подход успешно применяется в практических расчетах. Однако используемые для замыкания уравнений Рейнольдса модели турбулентности не обладают приемлемой универсальностью, а потому не могут применяться для решения широкого круга прикладных задач.

Метод моделирования крупных вихрей (LES) является компромиссным вариантом между DNS и решением RANS. Данный подход ограничивается исследованием течений только в масштабах, превышающих некоторую заданную величину. В методе LES осуществляется решение

фильтрованных по пространству уравнений Навье–Стокса, и разрешается движение только крупных вихрей. Мелкие вихри имеют более универсальную структуру и моделируются при помощи моделей подсеточного масштаба (Subgrid Scale Model, SGS), построенных на основе концепции вихревой вязкости или других рациональных приближений процессов переноса.

Метод моделирования крупных вихрей (LES) основан на двух предположениях. Одно из них состоит в возможности разделения поля течения на движение крупных и мелких вихрей. Крупные вихри, находящиеся под прямым воздействием граничных условий и несущие в себе максимум рейнольдсовых напряжений, рассчитываются. Мелкомасштабная турбулентность считается изотропной и имеющей универсальные характеристики, а потому менее критичной и более поддающейся моделированию. Другое предположение заключается в возможности аппроксимации нелинейных взаимодействий между крупными и мелкими вихрями только по крупным вихрям с использованием подсеточных моделей (SGS). Иначе говоря, принимается гипотеза о статистической независимости крупных и мелких вихрей.

В то время как DNS отображает весь диапазон размеров вихрей, метод LES считает наиболее важными крупные вихри, соответствующие малым волновым числам. При этом подсеточные модели не оказывают критического влияния на результаты в целом. Статистика крупных вихрей обычно не чувствительна к подсеточному моделированию. Крупномасштабное движение рассчитывается путем решения фильтрованной системы уравнений Навье–Стокса, которую формально можно записать в таком же виде, что и систему уравнений Рейнольдса. Роль подсеточного моделирования возрастает при увеличении числа Рейнольдса.

Мелкомасштабное движение исключается из уравнений Навье–Стокса при помощи применения операции фильтрации и моделируется с использованием подсеточных моделей. Среди наиболее популярных и часто используемых фильтрующих функций можно отметить фильтры Гаусса и Фурье, а также коробочный фильтр (boxfilter). При проведении расчетов на основе метода контрольного объема фильтрация осуществляется в результате интегрирования дифференциальных уравнений, представляющих законы сохранения, по контрольным объемам разностной сетки. Классификация подсеточных моделей проводится по тем же признакам, что и в RANS (по числу соотношений, вводимых в дополнение к системе фильтрованных уравнений) [10-11].

Результаты расчетов, полученные при помощи LES, зависят от ширины фильтра  $\Delta$ , которая входит в оператор фильтрации и обычно связывается с размером шага разностной сетки. Уменьшение ширины фильтра позволяет воспроизвести более широкий частотный диапазон флуктуаций решения. Увеличение  $\Delta$  способствует сглаживанию решения, а при  $\Delta \rightarrow 0$  метод LES переходит в DNS. Тем не менее метод LES является перспективным направлением в развитии методов расчета турбулентных течений и представляется весомой альтернативой DNS и RANS.

### Выбор оператора фильтрации

Для получения фильтрованных уравнений Навье–Стокса используются подходы с явным и неявным введением оператора фильтрации.

Введем обобщенный фильтр, дающий формальное определение операции осреднения и позволяющий исключить из рассмотрения масштабы, меньшие некоторой наперед заданной величины  $\Delta$ , называемой шириной фильтра (filter length). Вихри, размер которых меньше, чем ширина фильтра, не разрешаются. Обобщенный фильтр определяется следующим образом:

$$\bar{f}(x, t) = \int_D f(\xi, t) g(x, \xi, \Delta) d\xi.$$

В том случае, когда функция  $g(x, \xi)$  зависит только от разности  $x - \xi$ , операции дифференцирования и фильтрации коммутируют. Тогда обобщенный фильтр вводится как интеграл свертки

$$\bar{f}(x, t) = \int_D f(\xi, t) g(x - \xi, \Delta) d\xi = f(x, t) \cdot g(x, \Delta).$$

Предполагается, что фильтрующая функция  $g(x)$  (filtering function), называемая также ядром фильтра (filter kernel), является четной и бесконечно дифференцируемой в ограниченной области  $D$ , имеет компактный носитель и удовлетворяет условию нормировки

$$g(x) = g(-x), \quad \int_d g(\xi, \Delta) d\xi = 1.$$

В предельном случае имеют место соотношения

$$\lim_{\Delta \rightarrow \infty} \int_D f(\xi, t) g(\mathbf{x} - \xi, \Delta) d\xi = f(\mathbf{x}, t), \quad \lim_{\Delta \rightarrow \infty} g(\mathbf{x}, \Delta) = \delta(\mathbf{x}).$$

Интегрирование проводится по всей области течения  $D$ . Фильтрующая функция определяет структуру и размер мелкомасштабных турбулентных вихрей, разрешаемых системой осредненных уравнений.

Согласно теореме Бореля о свертке, преобразование Фурье свертки равняется произведению преобразований Фурье  $\mathcal{F}[f(\mathbf{x}, t) \cdot g(\mathbf{x})] = \mathcal{F}[f(\mathbf{x}, t)] \mathcal{F}[g(\mathbf{x})]$ .

Преобразованием Фурье функции  $f(\mathbf{x})$ , абсолютная величина  $|f(\mathbf{x})|$  которой интегрируема на интервале  $-\infty < \mathbf{x} < +\infty$ , называется функция  $c(\mathbf{k}) = \mathcal{F}[f(\mathbf{x})]$ , где  $c(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ .

Формула обращения имеет вид  $f(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) d\mathbf{k}$ .

Существуют различные виды фильтров, используемые в численных расчетах. Приведем примеры некоторых из них.

1. Коробочный фильтр  $g(\mathbf{x} - \xi) = \begin{cases} 1/\Delta^3, & |x_i - \xi_i| \leq \Delta x_i / 2 \\ 0, & |x_i - \xi_i| > \Delta x_i / 2 \end{cases}$ .
2. Фильтр Гаусса  $g(\mathbf{x} - \xi) = \left( \frac{6}{\pi \Delta^2} \right)^{3/2} \exp[-6|\mathbf{x} - \xi|^2 / \Delta^2]$ .
3. Фильтр Фурье  $g(\mathbf{x} - \xi) = \frac{1}{\Delta^3} \prod_i \frac{\sin 2\delta_i}{\delta_i}, \delta_i = \pi \frac{x_i - \xi_i}{\Delta}$ .

За исключением Фурье-фильтра (sharp Fourier cutoff filter), фильтрация отличается от стандартной операции осреднения во времени тем, что  $\bar{\bar{f}} \neq \bar{f}$ .

Для представления наименьших разрешимых масштабов необходимо, чтобы ширина фильтра не превосходила шага разностной сетки. Обычно различие между этими двумя величинами игнорируется, и ширина фильтра полагается равной  $\Delta = V^{1/3} = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$ , где  $V$  – объем ячейки разностной сетки;  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  – шаги сетки в координатных направлениях  $x, y$  и  $z$  соответственно. Поскольку ширина фильтра зависит от разностной сетки, то фильтрующую функцию часто называют сеточным фильтром (grid filter).

Для расчета пограничных слоев предлагается заменить шаг сетки в нормальном к стенке направлении  $\Delta y$  на величину  $\hat{\Delta} y$  и находить ширину фильтра, используя соотношение  $\Delta = (\Delta x \hat{\Delta} y \Delta z)^{1/3}$ .

Причем  $\hat{\Delta} y = \Delta y$  вблизи стенки и  $\hat{\Delta} y = \bar{\Delta} y$  вдали от стенки. Для промежуточных значений  $y$  используется плавный переход между указанными предельными значениями. Величина  $\bar{\Delta} y$  представляет собой среднее значение  $\Delta y$  в пристеночной области, а величина  $\hat{\Delta} y$  рассчитывается по формуле

$$\hat{\Delta} y = \left[ \left( \frac{1}{\Delta y} \right)^3 + \left( \frac{1}{\bar{\Delta} y} \right)^3 \right]^{-1/3}. \quad (1)$$

Имеются также и другие определения ширины фильтра

$$\Delta = \beta^N \left( \prod_{i=1}^N \Delta x_i \right)^{1/2}, \Delta = \beta \left( \sum_{i=1}^N \Delta x_i^2 \right)^{1/2}, \Delta = \beta \min_{i=1, \dots, N} \Delta x_i, \Delta = \beta \max_{i=1, \dots, N} \Delta x_i, \quad (2)$$

где  $N$  – размерность задачи,  $\beta$  – коэффициент пропорциональности.

При фильтрации уравнений Навье–Стокса фильтрующая функция выбирается таким образом, чтобы выполнялось условие  $(g^*, \nabla)\mathbf{u} = 0$ .

Форма записи уравнений, используемых в LES, не зависит от того или иного выбора фильтрующей функции  $g(\mathbf{x})$ . Конкретный вид фильтра играет роль только при статистической обработке и сравнении результатов численного моделирования с экспериментальными данными или результатами, полученными при помощи DNS. В то же время результаты численных расчетов, в частности размеры разрешимых масштабов турбулентности зависят от выбора ширины фильтра. Приемлемая ширина фильтра выбирается, как правило, методом проб и ошибок. При  $\Delta \rightarrow 0$  метод LES переходит в DNS.

### **Фильтрация данных, полученных с помощью ADCP-зонда в ходе экспедиции**

Интерес к турбулентности в мелководных водоемах, типа Азовского моря, вызван тем, что в местах ее существования происходит интенсивная передача количества движения и тепла, распространение пассивных примесей, перенос взвешенных частиц. Эти процессы существенно влияют на формирование и пространственную структуру физических, химических и биологических полей водоемов и их пространственные и временные изменения. Обработка собранного эмпирического материала ведется в настоящее время для изучения внутренней структуры зафиксированных возмущений мелкомасштабной турбулентности, определения скорости диссипации энергии возмущений [12].

Для оценок характеристик турбулентности с помощью прямых методов существует проблема, связанная с необходимостью получения больших объемов данных, а также длительных и дорогостоящих экспедиционных измерений.

Натурные данные получены в ходе экспедиции в Центрально-Восточной части Азовского моря и в Таганрогском заливе на НИС «Денеб» Южного научного центра РАН. Для измерения трехмерного вектора скорости движения водной среды использовался гидрофизический ADCP-зонд Workhorse Sentinel 600. Исследования проводились на 17 станциях. Измерения поля течений водного потока в Азовском море проводились по вертикали, начиная от ближней зоны чувствительности ADCP-зонда до дна. Измерения фиксировались с интервалом в 1 с каждые 10 см на измеряемой глубине. Скорость записывалась в соответствующий файл в мм/с. По столбцам приведены значения времени на часах прибора и 128 измерений по глубине одной из компонент вектора скорости в текущий момент времени. В описываемом эксперименте сохранение данных происходило по трем компонентам вектора скорости водного потока в текущий момент времени. Таким образом, при разрешении по вертикали в 10 см, и шаге по времени в 1 с для временного интервала 20–30 мин, имеется более 3 000 000 исходных измерений, в каждой точке (на каждой станции, которых 17) – более 150 000 (рис. 1).

Экспедиции проводились с целью получения данных для накопления информации о состоянии и изменении гидрофизических и гидрохимических параметров. В рейсах проводилось исследование следующих измеряемых параметров: пульсации компонент скорости; погрешность измерения; глубина водоема в месте измерения; значение ветра. В мелководных водоемах плотностная стратификация отсутствует, процессы в вертикальном направлении носят существенно нелинейный характер, поэтому приходится прибегать к нестандартному третьему методу измерения и оценки коэффициента вертикальной турбулентной вязкости, основывающемуся на вычислении градиента средней скорости потока.

Рассмотрим применение различных фильтров для обработки мгновенных скоростей водного потока, полученных при измерениях. Будем использовать коробочный фильтр, фильтр Гаусса и фильтр Фурье при различной величине ширины фильтра. В данных расчетах ширина фильтра задавалась, исходя из размерности решаемой задачи гидродинамики и соответствующего данной размерности масштаба сетки.

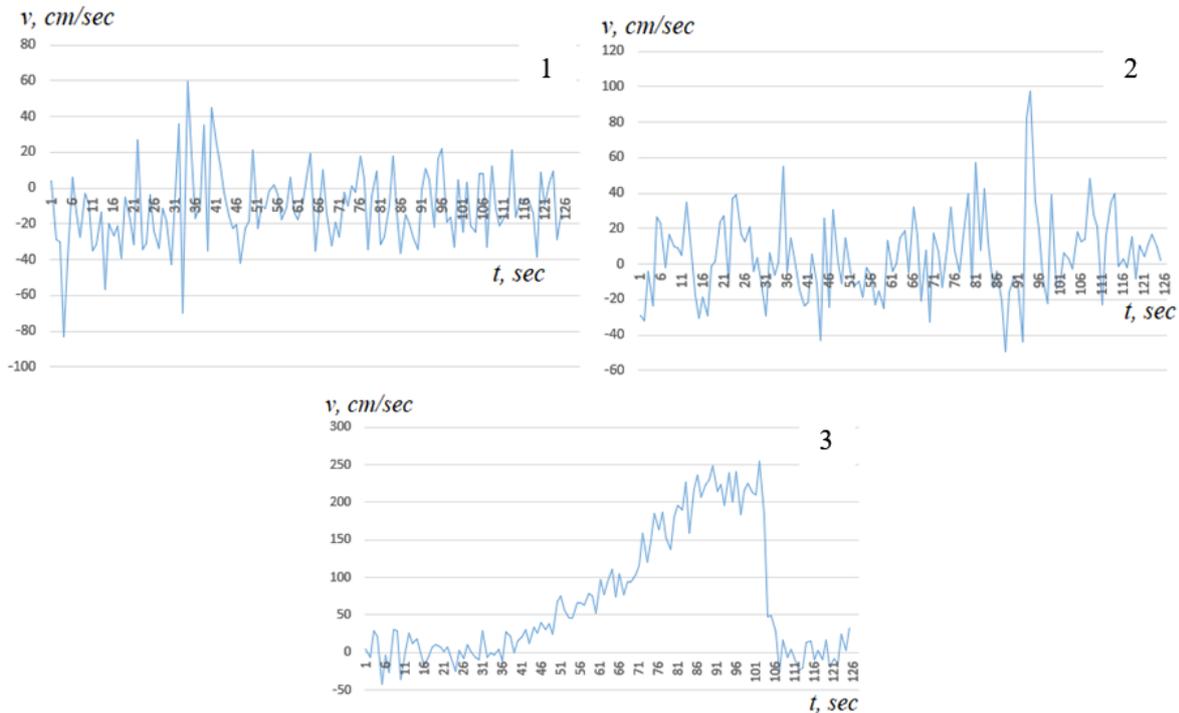


Рис. 1. Исходные данные, полученные с помощью ADCP-зонда на трех различных станциях

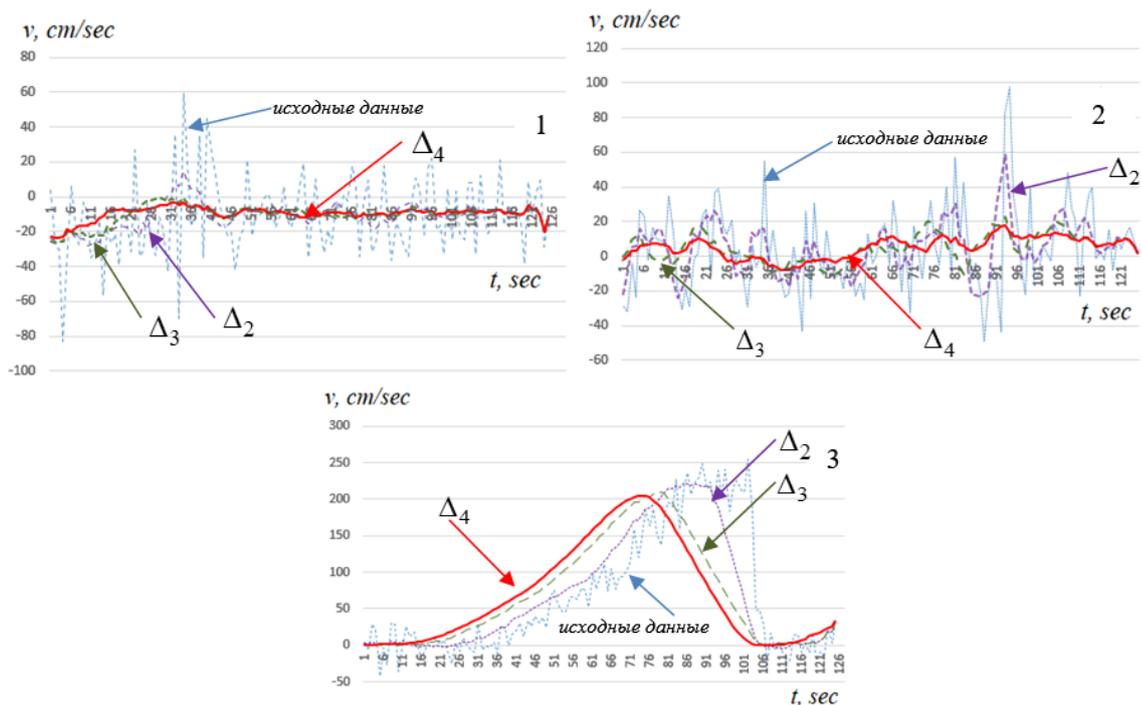


Рис. 2. Применение 1 – коробочного фильтра, 2 – фильтра Гаусса, 3– фильтра Фурье, при различной величине ширины фильтра:  $\Delta_4 < \Delta_3 < \Delta_2$

Рис. 2 демонстрирует пример работы программы, предназначенной для устранения зашумленности измеренных экспедиционных данных поля скорости водного потока. Процедура фильтрации заметно снижает разброс данных и амплитуду колебаний, что в свою очередь позволяет более адекватно оценивать информацию, полученную в ходе натуральных экспериментов. Наличие погрешностей в измерениях пульсаций вертикальной компоненты скорости является одной из трудноразрешимых проблем и связано со многими явлениями, происходящими в момент измерения, такими как девиация судна, колебания свободной поверхности, изменения глубины, устойчивости, ветра и волнения.

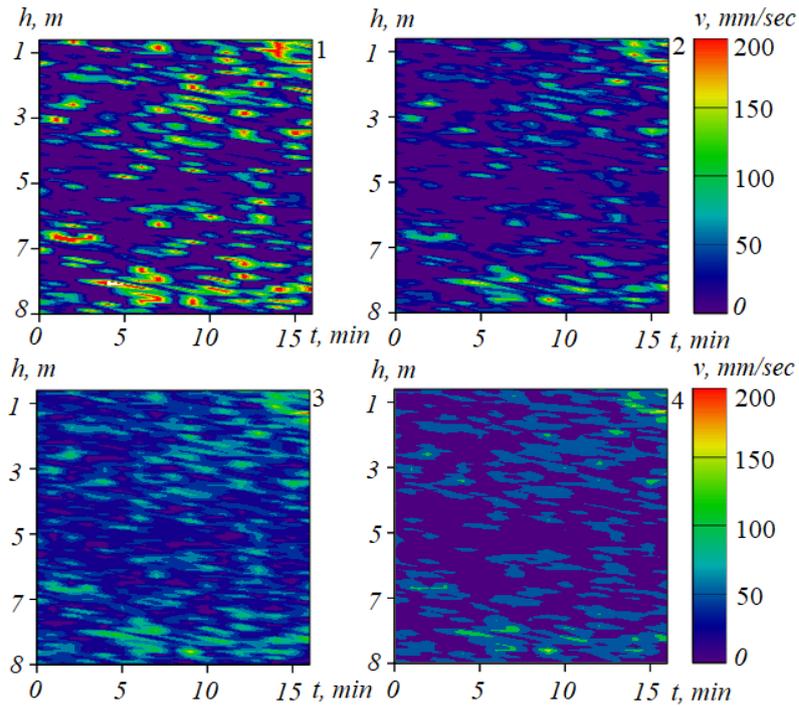


Рис. 3. Применение коробочного фильтра: 1 – исходные данные, 2, 3, 4 – данные, полученные с помощью фильтрации, при различной величине ширины фильтра:  $\Delta_4 < \Delta_3 < \Delta_2$

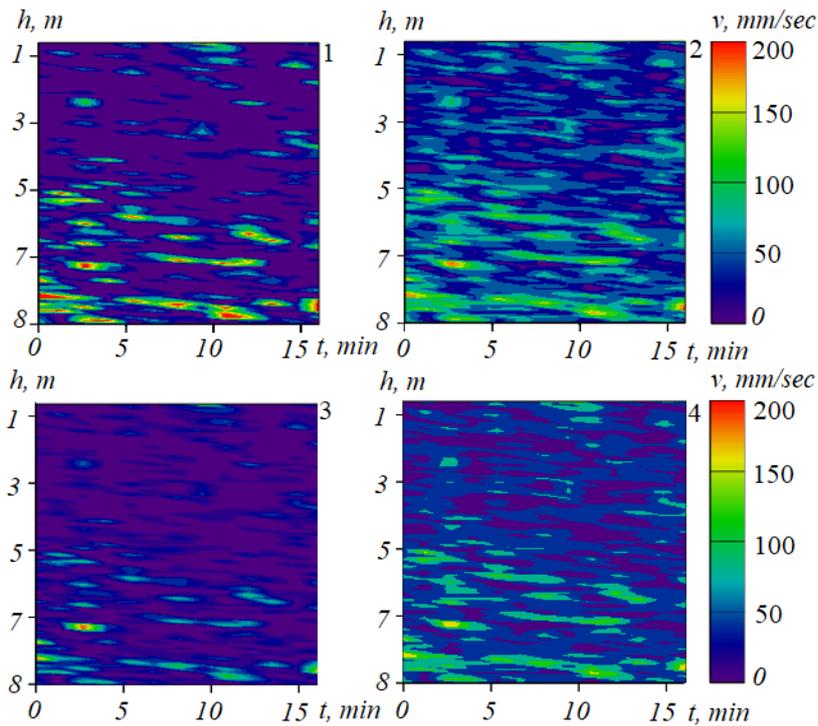


Рис. 4. Применение фильтра Гаусса: 1 – исходные данные, 2, 3, 4 – данные, полученные с помощью фильтрации, при различной величине ширины фильтра:  $\Delta_4 < \Delta_3 < \Delta_2$

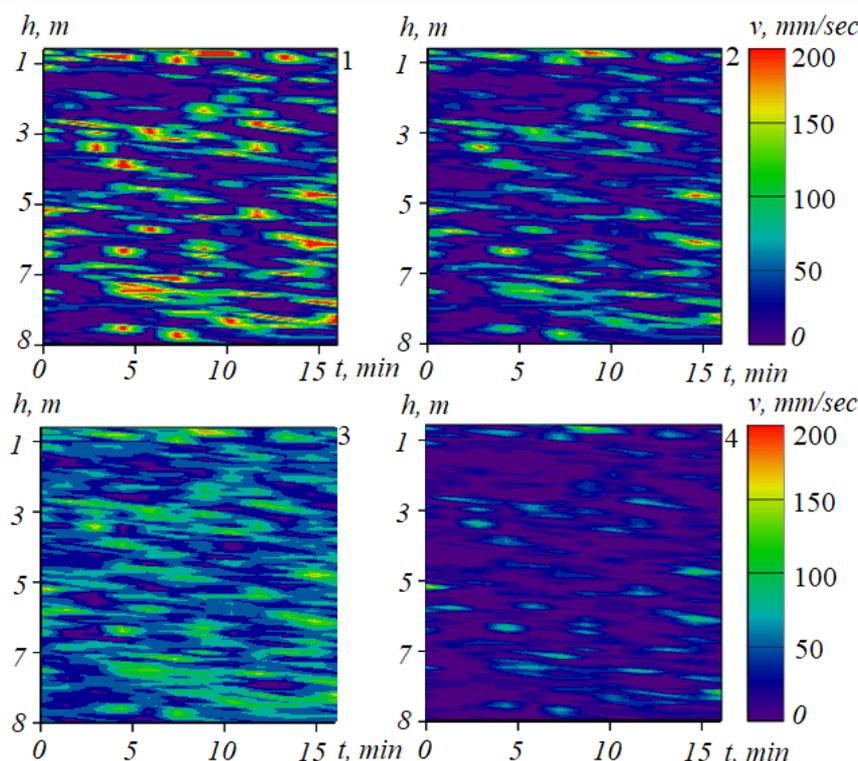


Рис. 5. Применение фильтра Фурье: 1 – исходные данные, 2, 3, 4 – данные, полученные с помощью фильтрации, при различной величине ширины фильтра:  $\Delta_4 < \Delta_3 < \Delta_2$

Рис. 3–5 демонстрируют результат работы программного обеспечения, предназначенного для устранения зашумленности экспедиционных измерений, на примере одной из составляющих вектора скорости водного потока в двумерном случае. Цветом выделена скорость водного потока в мм/с в соответствии с приведенной цветовой шкалой.

### Параметризация процесса вертикального турбулентного обмена с применением подхода LES

Параметризация процесса турбулентного обмена в дискретных моделях в первую очередь для вертикального координатного направления выполняется с учетом градиента плотности водной среды на основе современных подсеточных моделей.

Для параметризации коэффициента вертикального турбулентного обмена рассмотрены алгебраические подсеточные модели, основанные на определении турбулентных потоков как осредненных по пространству или времени произведений отклонений составляющих скорости течений и переносимой физической величины. Были выполнены эксперименты на основе нескольких подходов для вычисления коэффициента турбулентного обмена по вертикали: параметризация Белоцерковского, Буссинеска, Смагоринского (рис. 6). Использовались отфильтрованные данные о распределении трехмерного вектора мгновенной скорости водного потока для глубин от 0,8 до 20 м и более, полученные при помощи ADCP WHS 600 WHS 1200 Sentinel.

Все методы параметризации коэффициента вертикального турбулентного позволяют в большинстве случаев получить схожие распределения коэффициента вертикального турбулентного обмена по порядку величины и локализации максимумов-минимумов.

Явление резких скачков коэффициента на всех графиках связано с погрешностями в измерениях пульсаций вертикальной компоненты скорости, которая входит в расчетную формулу метода. Наличие погрешностей в измерениях пульсаций вертикальной компоненты скорости связано со многими явлениями, происходящими в момент измерения, такими как девиация судна, колебания свободной поверхности, изменения глубины, устойчивости, ветра и волнения.

Профили коэффициента вертикального турбулентного обмена в момент времени показывают, что параметризация Белоцерковского и Буссинеска наиболее адекватно отражает процессы турбулентного обмена именно для мелководных водоемов, но для оценки качества параметризации необходим более глубокий анализ с применением методов математической статистики.

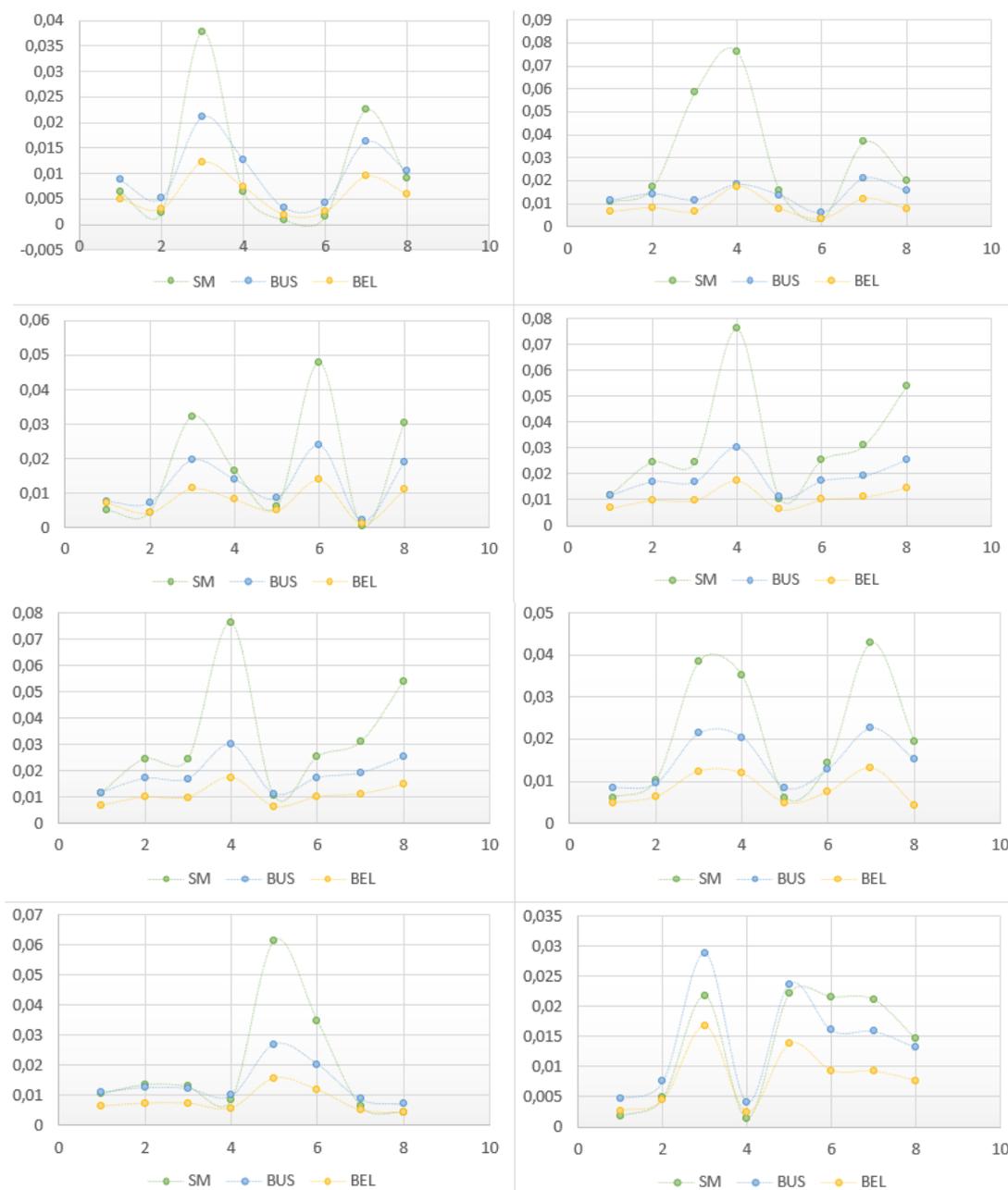


Рис. 6. Коэффициент вертикального турбулентного обмена, рассчитанный на основе различных типов аппроксимаций для параметризации вертикального турбулентного перемешивания (по горизонтали – значения в  $m^2/c$ )

## Заключение

Разработанное программное обеспечение позволило обработать большой объем данных натурных наблюдений движения и параметров водной среды в акватории Азовского моря, который был получен в ходе экспедиционных исследований с использованием гидрофизического зонда ADCP, с помощью процедуры фильтрации. Процедура фильтрации заметно снижает разброс данных и амплитуду колебаний, что в свою очередь позволяет более адекватно оценивать информацию, полученную в ходе натурных экспериментов.

Был применен коробочный фильтр, фильтр Гаусса и фильтр Фурье при различной величине ширины фильтра. В данных расчетах ширина фильтра задавалась, исходя из размерности решаемой задачи гидродинамики и соответствующего данной размерности масштаба сетки. Полученные данные планируется использовать для численного моделирования трехмерных турбулентных течений с применением подхода LES и сопоставления с результатами осреднения по RANS.

В статье рассмотрены возможности применения различных типов аппроксимаций для параметризации вертикального турбулентного обмена. С помощью ADCP-данных о пульсациях ско-

рости для нескольких станций измерения гидрологических характеристик проведен анализ результатов параметризации коэффициента вертикального турбулентного обмена. Все рассмотренные методы параметризации коэффициента вертикального турбулентного позволяют в большинстве случаев получить схожие распределения коэффициента вертикального турбулентного обмена по порядку величины и локализации максимумов-минимумов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-71-00015, <https://rscf.ru/project/22-71-00015/>.

### Литература

1. Small Microplastics as a Main Contributor to Plastic Mass Balance in the North Atlantic Subtropical Gyre / M. Poulain, M.J. Mercier, L. Brach *et al.* // Environ. Sci. Technol. – 2019. – Vol. 53. – P. 1157–1164.
2. Zippel, S.F. Turbulence from Breaking Surface Waves at a River Mouth / S.F. Zippel, J. Thomson, G. Farquharson // J. Phys. Oceanogr. – 2018. – Vol. 48. – P. 435–453.
3. Stokes G.G. Supplement to a Paper on the Theory of Oscillatory Waves / G.G. Stokes // Mathematical and Physical Papers. – Cambridge University Press, 1880. – Vol. 1. – P. 314–326.
4. Smit, P.B. Nonlinear Wave Kinematics near the Ocean Surface / P.B. Smit, T.T. Janssen, T.H.C. Herbers // J. Phys. Oceanogr. – 2017. – Vol. 47. – P. 1657–1673.
5. Material Transport in the Ocean Mixed Layer: Recent Developments Enabled by Large Eddy Simulations / M. Chamecki, T. Chor, D. Yang, C. Meneveau // Rev. Geophys. – 2019. – Vol. 57. – P. 1338–1371.
6. DiBenedetto, M.H. Transport of Anisotropic Particles under Waves / M.H. DiBenedetto, N.T. Ouellette, J.R. Koseff // J. Fluid Mech. – 2018. – Vol. 837. – P. 320–340.
7. Comparison Between Manta Trawl and in situ Pump Filtration Methods, and Guidance for Visual identification of Microplastics in Surface Waters / T.M. Karlsson, A. Kärrman, A. Rotander, M. Hassellöv // Environ. Sci. Pollut. Res. – 2019. – Vol. 27, Iss. 5. – P. 5559–5571.
8. The Role of Ekman Currents, Geostrophy and Stokes Drift in the Accumulation of Floating Microplastic / V. Onink, D. Wichmann, P. Delandmeter, E. Van Sebille // J. Geophys. Res. Oceans. – 2019. – Vol. 124, no. 3. – P. 1474–1490.
9. Methods for Sampling and Detection of Microplastics in Water and Sediment: a Critical Review / J.C. Prata, J.P. da Costa, A.C. Duarte, T. Rocha-Santos // Trends Anal. Chem. – 2019. – Vol. 110. – P. 150–159.
10. Sukhinov, A.I. Long Waves Simulation in Coastal Systems Using Parallel Computational Technologies / A.I. Sukhinov, S.V. Protsenko // Young Scientist's Third International Workshop on Trends in Information Processing. – 2019. – Vol. 2500. – P. 1–10. [http://ceur-ws.org/Vol-2500/paper\\_1.pdf](http://ceur-ws.org/Vol-2500/paper_1.pdf)
11. Protsenko, S. Mathematical Modeling of Wave Processes and Transport of Bottom Materials in Coastal Water Areas Taking into Account Coastal Structures / S. Protsenko, T. Sukhinova // MATEC Web of Conferences, XIII International Scientific-Technical Conference “Dynamic of Technical Systems” (DTS-2017), Rostov-on-Don, Russian Federation. – September 13–15, 2017. – Vol. 132 (2017). – 04002.
12. Zippel, S.F. Turbulence from Breaking Surface Waves at a River Mouth / S.F. Zippel, J. Thomson, G. Farquharson // J. Phys. Oceanogr. – 2018. – Vol. 48, Iss. 2. – P. 435–453.

Поступила в редакцию 6 сентября 2022 г.

### Сведения об авторах

Сухинов Александр Иванович – член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математики и информатики, Донской государственной технической университет, e-mail: [sukhinov@gmail.com](mailto:sukhinov@gmail.com).

Проценко Софья Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики, Таганрогский институт имени А.П. Чехова (филиал) Ростовского государственного экономического университета (РИНХ), e-mail: [rab55555@rambler.ru](mailto:rab55555@rambler.ru).

Проценко Елена Анатольевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики, Таганрогский институт имени А.П. Чехова (филиал) Ростовского государственного экономического университета (РИНХ), e-mail: [eaeros@rambler.ru](mailto:eaeros@rambler.ru).

**FIELD DATA FILTERING FOR THE DIGITAL SIMULATION  
OF THREE-DIMENSIONAL TURBULENT FLOWS USING THE LES APPROACH****A.I. Sukhinov<sup>1</sup>, S.V. Protsenko<sup>2</sup>, E.A. Protsenko<sup>2</sup>**<sup>1</sup> Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russian Federation<sup>2</sup> Chekhov Taganrog Institute (branch) Rostov State University of Economics, Taganrog,  
Russian Federation

E-mail: sukhinov@gmail.com

Abstract. Turbulence and subsequent mixing are important mechanisms which determine the dynamics of the coastal zone, as well as the transfer of momentum, mass and heat. In this paper, small-scale motion is excluded from the Navier–Stokes equations by applying the filtering operation. It is then modeled using subgrid models. In two-dimensional and three-dimensional cases, various types of filters are used: a box filter, a Gaussian filter and a Fourier filter, with a gradual decrease in the filter width. This enables the reproduction of a wider frequency range of fluctuations of the solution. The natural data obtained during the expedition in the Central-Eastern part of the Sea of Azov and in the Taganrog Bay at the research vessel Deneb of the Southern Scientific Center of the Russian Academy of Sciences were subjected to the filtration procedure. The hydrophysical ADCP probe Workhorse Sentinel 600 was used to measure the three-dimensional velocity vector of the water medium. In this way more than 3,000,000 initial measurements were obtained, at each of the 17 stations more than 150,000 were taken. The data thus obtained will be used for the digital simulation of three-dimensional turbulent flows using the LES approach and comparison with the results of averaging by RANS.

*Keywords: turbulence; large LES approach; subgrid models; box filter; Gauss filter and Fourier filter; hydrodynamics.*

**References**

1. Poulain M., Mercier M.J., Brach L., Martignac M., Routaboul C., Perez E., Desjean M.C., ter Halle A. Small Microplastics as a Main Contributor to Plastic Mass Balance in the North Atlantic Subtropical Gyre. *Environ. Sci. Technol.*, 2019, Vol. 53, pp. 1157–1164. DOI: 10.1021/acs.est.8b05458
2. Zippel, S. F., Thomson, J., and Farquharson, G. Turbulence from Breaking Surface Waves at a River Mouth. *J. Phys. Oceanogr.*, 2018, Vol. 48, pp. 435–453. DOI: 10.1175/JPO-D-17-0122.1
3. Stokes G.G. Supplement to a Paper on the Theory of Oscillatory Waves, *Mathematical and Physical Papers*, Cambridge University Press, 1880, Vol. 1, pp. 314–326.
4. Smit P.B., Janssen T.T., Herbers T.H.C. Nonlinear Wave Kinematics near the Ocean Surface. *J. Phys. Oceanogr.*, 2017, Vol. 47, pp. 1657–1673. DOI: 10.1175/JPO-D-16-0281.1
5. Chamecki M., Chor T., Yang D., Meneveau C. Material Transport in the Ocean Mixed Layer: Recent Developments Enabled by Large Eddy Simulations. *Rev. Geophys.*, 2019, Vol. 57, pp. 1338–1371. DOI: 10.1029/2019RG000655
6. DiBenedetto M.H., Ouellet, N.T., Koseff J.R. Transport of Anisotropic Particles under Waves. *J. Fluid Mech.*, 2018, Vol. 837, pp. 320–340. DOI: 10.1017/jfm.2017.853
7. Karlsson T.M., Kärrman A., Rotander A., Hassellöv M. Comparison Between Manta Trawl and in situ Pump Filtration Methods, and Guidance for Visual Identification of Microplastics in Surface Waters. *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 2019, Vol. 27, Iss. 5, pp. 5559–5571. DOI: 10.1007/s11356-019-07274-5
8. Onink, V., Wichmann, D., Delandmeter, P., Van Sebille, E. The Role of Ekman Currents, Geostrophy and Stokes Drift in the Accumulation of Floating Microplastic. *J. Geophys. Res. Oceans*, 2019, Vol. 124, no. 3, pp. 1474–1490. DOI: 10.1029/2018JC014547
9. Prata J.C., da Costa J.P., Duarte A.C., Rocha-Santos T. Methods for Sampling and Detection of Microplastics in Water and Sediment: a Critical Review. *Trends Anal. Chem.*, 2019, Vol. 110, pp. 150–159. DOI: 10.1016/j.trac.2018. 10.029

10. Sukhinov A.I., Protsenko S.V. Long Waves Simulation in Coastal Systems Using Parallel Computational Technologies. Young Scientist's Third International Workshop on Trends in Information Processing. 2019, Vol. 2500, pp. 1–10. [http://ceur-ws.org/Vol-2500/paper\\_1.pdf](http://ceur-ws.org/Vol-2500/paper_1.pdf)

11. Protsenko S., Sukhinova T. Mathematical Modeling of Wave Processes and Transport of Bottom Materials in Coastal Water Areas Taking into Account Coastal Structures. MATEC Web of Conferences, XIII International Scientific-Technical Conference “Dynamic of Technical Systems” (DTS-2017), Rostov-on-Don, Russian Federation, September 13–15, 2017, Vol. 132 (2017), 04002. DOI: 10.1051/mateconf/201713204002

12. Zippel S.F., Thomson J., Farquharson G. Turbulence from Breaking Surface Waves at a River Mouth. J. Phys. Oceanogr., 2018, Vol. 48, Iss. 2, pp. 435–453. DOI: 10.1175/JPO-D-17-0122.1

*Received September 6, 2022*

### Information about the authors

Sukhinov Aleksandr Ivanovich is Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Mathematics and Computer Science Department, Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russian Federation, e-mail: [sukhinov@gmail.com](mailto:sukhinov@gmail.com), ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-5875-1523>

Protsenko Sofya Vladimirovna is Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Mathematics Department, Chekhov Taganrog Institute (branch) Rostov State University of Economics, Taganrog, Russian Federation, e-mail: [rab55555@rambler.ru](mailto:rab55555@rambler.ru), ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9656-8466X>

Protsenko Elena Anatol'evna is Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Mathematics Department, Chekhov Taganrog Institute (branch) Rostov State University of Economics, Taganrog, Russian Federation, e-mail: [eapros@rambler.ru](mailto:eapros@rambler.ru), ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-7911-3558X>

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИМОРФНЫХ РАЗНОВИДНОСТЕЙ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ГИДРОКСИЛЬНОЙ ГРУППОЙ L4-6-12 ГРАФЕНА

**М.Е. Беленков, В.А. Грешняков, В.М. Чернов**

*Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация*

*E-mail: me.belenkov@gmail.com*

**Аннотация.** Методом теории функционала плотности при использовании приближения обобщенного градиента выполнено моделирование трех новых полиморфных разновидностей функционализированного гидроксильной группой графена, состоящего только из парных топологических дефектов 4-6-12. Моделирование слоев проведено для примитивных гексагональных элементарных ячеек с типами присоединения гидроксильной группы T1, T2, T3. Каждая из рассматриваемых элементарных ячеек содержала 36 атомов. В результате проведенных расчетов установлено, что углеродный каркас исходного слоя остается устойчивым при функционализации по типам T1 и T3, а функционализированный слой T2 претерпевает разрушение. Слоевая плотность в гидроксиграфеновых слоях L4-6-12 с типами присоединения T1 и T3 составляет 1,34 и 1,36 мг/м<sup>2</sup>, соответственно, которая меньше слоевой плотности для аналогичных фторографеновых слоев на 0,08-0,16 мг/м<sup>2</sup>. Энергии сублимации устойчивых слоев T1 и T3 составили 18,16 и 17,37 эВ/(СОН), соответственно. Для определения запрещенной зоны были рассчитаны плотности электронных состояний и зонные структуры. Величина ширины запрещенной зоны оказалась равной 3,33 эВ для слоя T1 и 1,93 эВ для слоя T3, что позволило отнести полученные слои к полупроводникам.

*Ключевые слова:* графен; гидроксильная группа; *ab initio* расчеты; электронные свойства; полиморфизм; кристаллическая структура; функционализация.

### Введение

Графен является двумерной слоевой наноструктурой с толщиной слоя в один атом [1]. Благодаря своим свойствам, таким как большая прочность, высокие теплопроводность и электропроводность, эластичность, оптическая прозрачность и др. [1–6], графен оказался перспективным материалом для практического использования, в частности, в наноэлектронике. Тем не менее, для графеновой наноэлектроники необходимо иметь возможность изменять проводящие свойства графена от проводниковых до полупроводниковых и диэлектрических [7].

Проведенные ранее исследования основанных на гексагональном графене углеродных материалов с модифицированной структурой при неизменном химическом составе, таких как скрученный двухслойный графен, многослойные графены с магическими углами, графин, пористый графен [8–10], показали, что их свойства могут значительно отличаться от свойств чистого однослойного гексагонального графена. Кроме того, создание полиморфных графеновых разновидностей, структура которых образована топологическими дефектами, также позволяет изменять свойства по сравнению с гексагональным графеном [11].

Свойства графена также можно изменять путем присоединения к его поверхности различных неуглеродных атомов или молекулярных групп [12, 13]. Одним из атомов для функционализации графенового слоя может служить кислород, благодаря высокой прочности углерод-кислородных связей [14]. Однако из-за стремления кислорода образовывать с ближайшими атомами углерода две связи, равномерная функционализация слоя сильно затрудняется. Решением этой проблемы может служить присоединение гидроксильной (-ОН) группы, которая образует лишь одну связь с углеродным атомом слоя. Присоединяя гидроксильную группу к различным полиморфным раз-

новидностям графена, можно получить материалы с новыми свойствами. Возможность получения слоев полиморфов графена с адсорбированными атомами или молекулярными группами позволяет варьировать свойства функционализированных слоев при неизменном химическом составе. В данной работе были теоретически изучены полиморфы L4-6-12 графена с присоединенными к ним -ОН молекулярными группами (СОН-L<sub>4-6-12</sub>).

### Методика расчетов

Моделирование присоединения -ОН групп к поверхности L4-6-12 графена, состоящего из топологических дефектов 4-6-12, производилось ранее в работах [15] для L4-6-12 фторографена и графана для двух структурных типов, соответствующих позициям присоединения неуглеродных атомов с каждой из сторон слоя. Начальная кристаллическая структура слоев представляла собой оптимизированный слой L4-6-12 с присоединенной в соответствии с типом присоединения -ОН группой с каждой из сторон слоя в равной пропорции. В качестве обозначения типов присоединения использовалось сокращение «Тх», где х – номер, соответствующий способу сшивки гидроксильных групп со слоем.

Моделирование геометрически оптимизированной структуры слоев СОН-L<sub>4-6-12</sub> и их свойств было произведено с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO [16], в котором реализован *ab initio* метод теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении (DFT-GGA) [17]. Расчеты производились для трехмерных кристаллических структур, представлявших собой слои функционализированных -ОН группой графеновых слоев. Расстояние между слоями было взято настолько большим (14 Å), чтобы обеспечить отсутствие взаимодействия между соседними слоями. Расчеты были выполнены для *k*-точечных сеток 12×12×12. Расчет энергии сублимации был выполнен как разность между полной удельной энергией молекулярной группы СОН в слое и суммой полных энергий изолированных атомов углерода, кислорода и водорода.

### Результаты и обсуждение

При геометрической оптимизации слоев СОН-L<sub>4-6-12</sub> два слоя Т1 и Т3 оказались устойчивыми, а слой Т2 распался на отдельные молекулярные группы. Изображения элементарных ячеек геометрически оптимизированных слоев гидроксиграфена приведены на рис. 1. Структурная конфигурация примитивной элементарной ячейки Т2 гидроксиграфена за шаг до полного распада на отдельные молекулярные группы приведена на рис. 1, б.

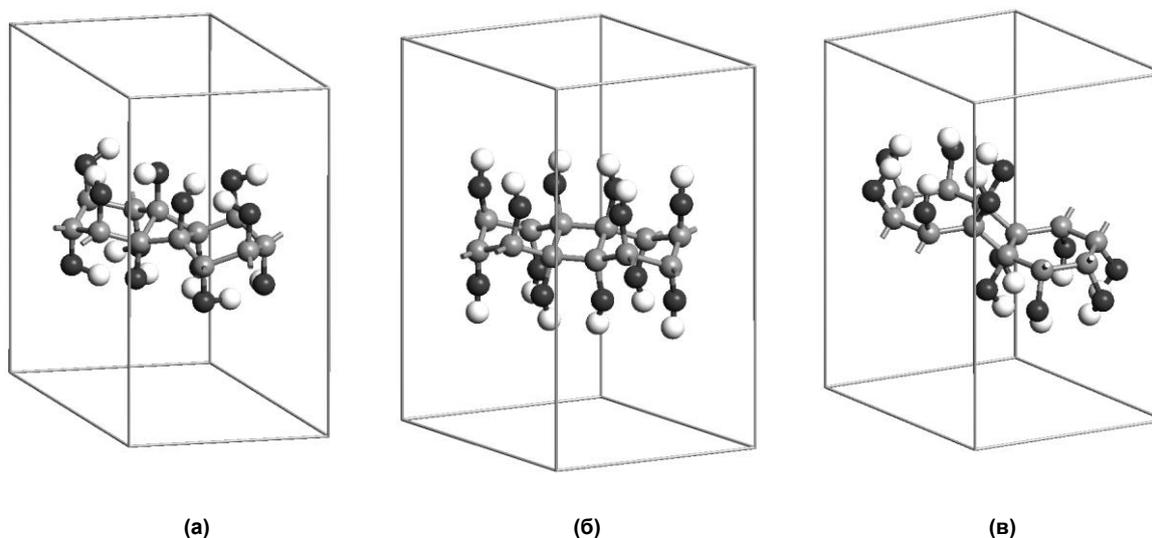


Рис. 1. Изображения элементарных ячеек функционализированного гидроксильной группой L4-6-12 графена: (а) структурный тип Т1; (б) структурный тип Т2 за шаг до распада на отдельные молекулярные группы; (в) структурный тип Т3

Значения длин векторов элементарных трансляций и типов кристаллических решеток приведены в таблице. Элементарные ячейки слоев СОН-L<sub>4-6-12</sub> типов Т1-Т3 являлись гексагональными.

Во всех элементарных ячейках содержалось 36 атомов. Слоевая плотность гидроксиграфена для первого типа присоединения составила  $1,34 \text{ мг/м}^2$ , в то время как в слое Т3 она оказалась равной  $1,36 \text{ мг/м}^2$ . Сравнительный анализ полученных результатов с результатами функционализации слоев L4-6-12 графена атомами фтора [15] показал, что L4-6-12 гидроксиграфен обладает слоевой плотностью, на  $0,08\text{--}0,16 \text{ мг/м}^2$  меньшей плотности фторографена. Это обусловлено тем, что в L4-6-12 гидроксиграфене происходит удлинение углерод-углеродных связей и увеличение длин векторов элементарных трансляций элементарной ячейки. Удельная полная энергия, которая приходится на молекулярную группу СОН, варьируется в диапазоне от  $-605,8 \text{ эВ/}(\text{СОН})$  до  $-606,6 \text{ эВ/}(\text{СОН})$  для слоев Т3 и Т1 соответственно. Значения энергий сублимации изменяются от  $17,37 \text{ эВ/}(\text{СОН})$  в слое Т3 до  $18,16 \text{ эВ/}(\text{СОН})$  в слое Т1. Очевидно, слой Т1 обладает большей устойчивостью, чем слой Т3. Энергия сублимации исследованных слоев гидроксиграфена L4-6-12 меньше энергии сублимации функционализированного гексагонального гидроксиграфена на  $1,56\text{--}1,32 \text{ эВ}$  [18], что указывает на их меньшую устойчивость по сравнению со слоями функционализированного гексагонального графена.

**Структурные параметры и свойства полиморфных разновидностей L4-6-12 графена функционализированного гидроксильными группами ( $a, c$  – длины векторов элементарных трансляций;  $N$  – число атомов в элементарной ячейке;  $\rho$  – слоевая плотность;  $E_{\text{total}}$  – полная энергия;  $E_{\text{sub}}$  – энергия сублимации;  $\Delta$  – ширина запрещенной зоны)**

Слой	Tun 1	Tun 2	Tun 3
Тип решетки	Гексагональная	Гексагональная	Гексагональная
$a, \text{ \AA}$	7,080	7,080	7,028
$c, \text{ \AA}$	7,080	7,080	7,028
$N$ , атом	36	36	36
$\rho$ , $\text{ мг/м}^2$	1,34		1,36
$E_{\text{total}}$ , эВ/э.я.	-7279		-7269
$E_{\text{total}}$ , эВ/(СОН)	-606,6		-605,8
$E_{\text{sub}}$ , эВ/(СОН)	18,16		17,37
$\Delta$ , эВ	3,33		1,93

Для устойчивых полиморфов функционализированного гидроксильной группой графена L4-6-12 рассчитаны электронные структуры. Результаты расчетов плотности электронных состояний приведены на рисунке 2. Ширина запрещенной зоны в слоях в окрестности уровня энергии Ферми составляет  $1,93 \text{ эВ}$  для слоя Т3 и  $3,33 \text{ эВ}$  для слоя Т1. Данные значения ширины запрещенной зоны указывают на принадлежность устойчивых гидроксиграфеновых слоев к полупроводникам. Величина запрещенной зоны для функционализированного гидроксильной группой слоя Т3 значительно отличается от соответствующей величины для аналогичного слоя, функционализированного фтором [15], на  $2,22 \text{ эВ}$ , что указывает на возможность получения гидроксиграфена с более узкой шириной запрещенной зоны.

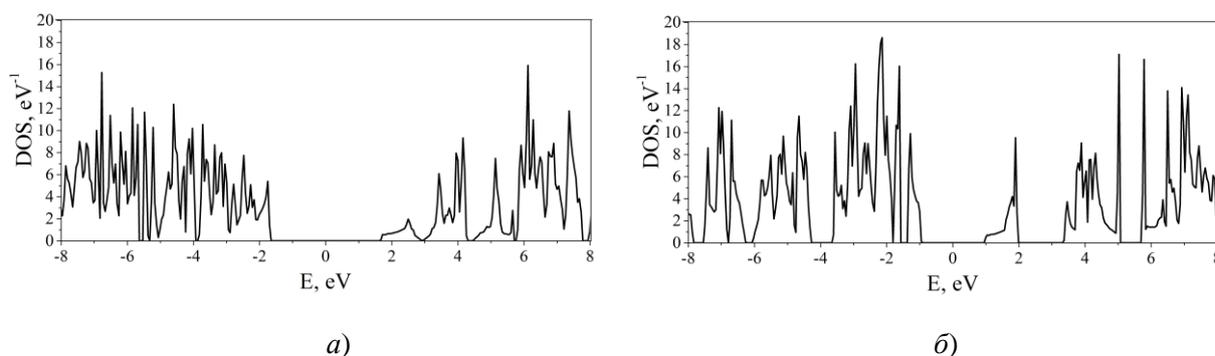


Рис. 2. Плотность электронных состояний функционализированного гидроксильной группой L4-6-12 графена: а) Т1; б) Т3

Рассчитанные зонные структуры для двух устойчивых полиморфов гидроксиграфена L4-6-12 приведены на рис. 3. В результате проведенного анализа было обнаружено, что ширины запре-

ценных зон, определенные по зонным картинкам, равны соответствующим значениям ширины запрещенных зон, вычисленным из графиков плотности электронных состояний.

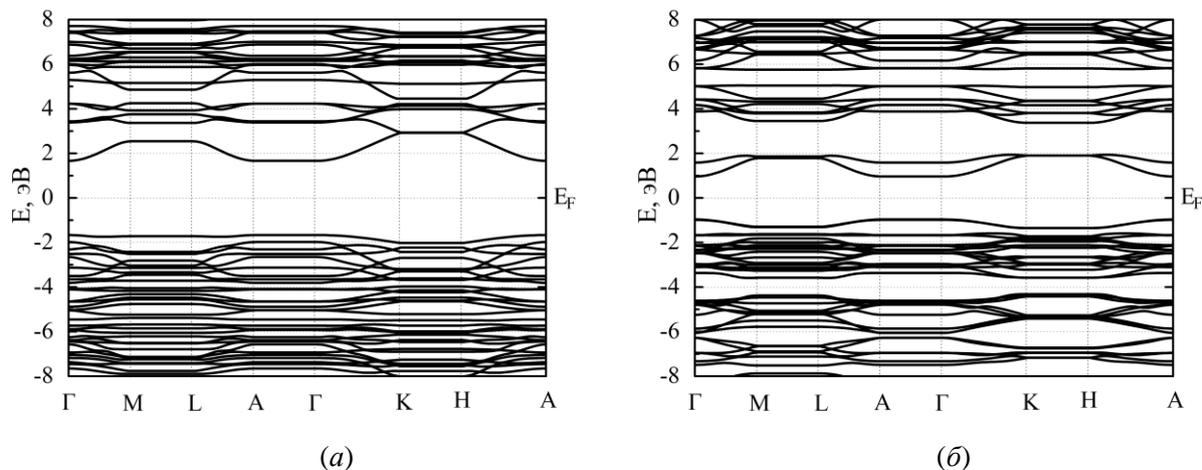


Рис. 3. Зонная структура функционализованного гидроксильной группой L4-6-12 графена: (а) T1; (б) T3

### Заключение

*Ab initio* моделирование методом теории функционала плотности с использованием обобщенного градиентного приближения позволило установить возможность устойчивого существования двух новых полиморфных разновидностей  $\text{COH-L}_{4-6-12}$ , получаемых функционализацией графена L4-6-12 гидроксильной  $-\text{OH}$  группой. Слой T1 с наибольшей энергией сублимации 18,158 эВ/(COH) должен иметь наибольшую термическую устойчивость. Ширина запрещенной зоны оказалась равной 1,93 и 3,33 эВ для слоев типов T3 и T1, соответственно, что соответствует отнесению исследованных материалов к полупроводникам. Изученные в данной работе полиморфные разновидности  $\text{COH-L}_{4-6-12}$  могут найти практическое применение в производстве нанoeлектронных устройств.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-32-90002).*

### Литература

1. Novoselov, K.S. Nobel Lecture: Graphene: Materials in the Flatland / K.S. Novoselov // *Reviews of Modern Physics*. – 2011. – Vol. 83, Iss. 3. – P. 837–849.
2. Shen, C. The Processing and Analysis of Graphene and the Strength Enhancement Effect of Graphene-Based Filler Materials: A Review / C. Shen, S.O. Oyadiji // *Materials Today Physics*. – 2020. – Vol. 15. – P. 100257
3. Heat conduction in graphene: experimental study and theoretical interpretation / S. Ghosh, D.L. Nika, E.P. Pokatilov, A.A. Balandin // *New Journal of Physics*. – 2009. – Vol. 11, no. 9. – P. 095012.
4. Electronic and Thermal Properties of Graphene and Recent Advances in Graphene Based Electronics Applications / M. Sang, J. Shin, K. Kim, K. Yu // *Nanomaterials*. – 2019. – Vol. 9, no. 3. – P. 374.
5. Stress-Controlled Poisson Ratio of a Crystalline Membrane: Application to Graphene / I.S. Burmistrov, I.V. Gornyi, V.Y. Kachorovskii *et al.* // *Physical Review B*. – 2018. – Vol. 97, Iss. 12. – P. 125402.
6. Sheehy, D.E. Optical Transparency of Graphene as Determined by the fine-Structure Constant / D.E. Sheehy, J. Schmalian // *Physical Review B*. – 2009. – Vol. 80, Iss. 19. – P. 193411.
7. Functionalized Graphene Nanocomposites and their Derivatives / G. Omar, M.A. Salim, B.R. Mizah *et al.* // *Functionalized Graphene Nanocomposites and their Derivatives*. – 2019. – P. 245–263.
8. Magic angle Hierarchy in Twisted Graphene Multilayers / E. Khalaf, A.J. Kruchkov, G. Tarnopolsky, A. Vishwanath // *Physical Review B*. – 2019. – Vol. 100, no. 8. – P. 085109.

9. Mavrinskii, V.V. Structure and Electronic Properties of 5-7c Graphyne Polymorphs / V.V. Mavrinskii, E.A. Belenkov // AIP Conference Proceedings. – 2022. – Vol. 2533. – P. 020021.
10. Zhang, Y. Recent Advances of Porous Graphene: Synthesis, Functionalization, and Electrochemical Applications / Y. Zhang, Q. Wan, N. Yang // Small. – 2019. – Vol. 15, no. 48. – P. 1903780.
11. Грешняков, В.А. Теоретическое исследование фазового превращения тетрагонального графена  $L_{4-8}$  в полиморфную разновидность алмаза LA7 / Грешняков В.А., Беленков Е.А. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2017. – Vol. 9, no. 3. – С. 51–57.
12. Control of Graphene's Properties by Reversible Hydrogenation: Evidence for Graphane / D.C. Elias, R.R. Nair, T.M.G. Mohiuddin *et al.* // Science. – 2009. – Vol. 323, no. 5914. – P. 610–613.
13. Puri, S. External-strain-induced semimetallic and metallic phase of chlorographene / S. Puri, S. Bhowmick // Physical Review Materials. – 2018. – Vol. 2, Iss. 4. – P. 044001.
14. Regiochemically Oxo-functionalized Graphene, Guided by Defect Sites, as Catalyst for Oxygen Reduction to Hydrogen Peroxide / Y. Wang, F. Grote, Q. Cao, S. Eigler // J. Phys. Chem. Lett. – 2021. – Vol. 12, Iss. 41. – P. 10009–10014.
15. Belenkov, M.E. Structure and electronic properties of 4-6-12 graphene layers functionalized by fluorine / M.E. Belenkov, V.M. Chernov // Letters on Materials, 2020. – Vol. 10, no. 3. – P. 254–259.
16. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO / P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme *et al.* // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2017. – Vol. 29, no. 46. – P. 465901.
17. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Physical Review Letters. – 1996. – Vol. 77, Iss. 18. – P. 3865–3868.
18. Беленков, М.Е. Моделирование полиморфных разновидностей гексагонального графена, функционализированного гидроксильными группами / М.Е. Беленков, В.М. Чернов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2021. – Вып. 13. – С. 541–551.

*Поступила в редакцию 15 октября 2022 г.*

### Сведения об авторах

Беленков Максим Евгеньевич – аспирант кафедры радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: me.belenkov@gmail.com

Грешняков Владимир Андреевич – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры физики конденсированного состояния, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

Чернов Владимир Михайлович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

## MODELING THE POLYMORPHIC VARIETIES OF L4-6-12 GRAPHENE FUNCTIONALIZED BY HYDROXYL GROUP

**M.E. Belenkov, V.A. Greshnyakov, V.M. Chernov**

Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: me.belenkov@gmail.com

Abstract. Density functional theory in the generalized gradient approximation was used to model three new polymorphic varieties of graphene functionalized by the hydroxyl group, consisting only of paired topological defects 4-6-12. Layer modeling was carried out for primitive hexagonal elementary cells with the types of addition of the hydroxyl group T1, T2, T3. Each of the elementary cells contained 36 atoms. As a result of the calculations, it was established that the carbon frame of the initial layer remains stable during functionalization for the T1 and T3 types, while the functionalized layer T2 undergoes destruction. The layer density in hydroxygraphene layers L4-6-12 with attachment types T1 and T3 is 1,34 and 1,36 mg/m<sup>2</sup>, respectively. This is less than the layer density for similar fluorographene layers by 0,08-0,16 mg/m<sup>2</sup>. The sublimation energies of stable layers T1 and T3 were 18,16 and 17,37 eV/(COH), respectively. Densities of electronic states and band structures were calculated, in order to determine the band gaps. The value of the band gap width was determined as equal to 3.33 eV for the T1 layer and 1,93 eV for the T3 layer. This enabled the layers thus obtained to be identified as semiconductors.

*Keywords: graphene; hydroxyl group; ab initio calculations; electronic properties; polymorphism; crystal structure; functionalization.*

### References

1. Novoselov K.S. Nobel Lecture: Graphene: Materials in the Flatland. *Reviews of Modern Physics*, 2011, Vol. 83, Iss. 3, pp. 837–849. DOI: 10.1103/revmodphys.83.837
2. Shen C., Oyadiji S.O. The Processing and Analysis of GRAPHENE and the Strength Enhancement Effect of Graphene-Based Filler Materials: A Review. *Materials Today Physics*, 2020, Vol. 15, p. 100257. DOI: 10.1016/j.mtphys.2020.100257
3. Ghosh S., Nika D.L., Pokatilov E.P., Balandin A.A. Heat Conduction in Graphene: Experimental Study and Theoretical Interpretation. *New Journal of Physics*, 2009, Vol. 11, Iss. 9, p. 095012. DOI: 10.1088/1367-2630/11/9/095012
4. Sang M., Shin J., Kim K., Yu K. Electronic and Thermal Properties of Graphene and Recent Advances in Graphene Based Electronics Applications. *Nanomaterials*, 2019, Vol. 9, no. 3, p. 374. DOI: 10.3390/nano9030374
5. Burmistrov I.S., Gornyi I.V., Kachorovskii V.Y., Katsnelson M.I., Los J.H., Mirlin A.D. Stress-Controlled Poisson Ratio of a Crystalline Membrane: Application to graphene. *Physical Review B*, 2018, Vol. 97, Iss. 12, p. 125402. DOI: 10.1103/physrevb.97.125402
6. Sheehy D.E., Schmalian J. Optical Transparency of Graphene as Determined by the Fine-Structure Constant. *Physical Review B*, 2009, Vol. 80, Iss. 19, p. 193411. DOI: 10.1103/physrevb.80.193411
7. Omar G., Salim M.A., Mizah B.R., Kamarolzaman A.A., Nadlene R. Functionalized Graphene Nanocomposites and their Derivatives. *Functionalized Graphene Nanocomposites and their Derivatives*, 2019, pp. 245–263. DOI: 10.1016/B978-0-12-814548-7.00012-X
8. Khalaf E., Kruchkov A.J., Tarnopolsky G., Vishwanath A. Magic Angle Hierarchy in Twisted Graphene Multilayers. *Physical Review B*, 2019, Vol. 100, Iss. 8, p. 085109. DOI: 10.1103/physrevb.100.085109

9. Mavrinskii V.V., Belenkov E.A. Structure and Electronic Properties of 5-7c Graphyne Polymorphs. *AIP Conference Proceedings*, 2022, Vol. 2533, p. 020021. DOI: 10.1063/5.0103475
10. Zhang Y., Wan Q., Yang N. Recent Advances of Porous Graphene: Synthesis, Functionalization, and Electrochemical Applications. *Small*, 2019, Vol. 15, no. 48, p. 1903780. DOI: 10.1002/sml.201903780
11. Greshnyakov V.A., Belenkov E.A. Theoretical Study of the Phase Transformation of Tetragonal Grapheme  $L_{4-8}$  into a Polymorphic Variety of Diamond LA7. *Bulletin of SUSU. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*, 2017, Vol. 9, no. 3, pp. 51–57. DOI: 10.14529/mmph170307
12. Elias D.C., Nair R.R., Mohiuddin T.M.G., Morozov S.V., Blake P., Halsall M.P., Ferrari A.C., Boukhvalov D.W., Katsnelson M.I., Geim A.K., Novoselov K.S. Control of Graphene's Properties by Reversible Hydrogenation: Evidence for Graphane. *Science*, 2009, Vol. 323, no. 5914, pp. 610–613. DOI: 10.1126/science.1167130
13. Puri S., Bhowmick S. External-Strain-Induced Semimetallic and Metallic Phase of Chlorographene. *Physical Review Materials*, 2018, Vol. 2, Iss. 4, pp. 044001. DOI: 10.1103/physrevmaterials.2.044001
14. Wang Y., Grote F., Cao Q., Eigler S. Regiochemically Oxo-functionalized Graphene, Guided by Defect Sites, as Catalyst for Oxygen Reduction to Hydrogen Peroxide. *J. Phys. Chem. Lett.*, 2021, Vol. 12, Iss. 41, pp. 10009–10014. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.1c02957
15. Belenkov M.E., Chernov V.M. Structure and Electronic Properties of 4-6-12 Graphene Layers Functionalized by Fluorine. *Letters on Materials*, 2020, Vol. 10, no. 3, pp. 254–259. DOI: 10.22226/2410-3535-2020-3-254-259
16. Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T., Bunau O., Buongiorno Nardelli M., Calandra M., Baroni S. Advanced Capabilities for Materials Modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2017, Vol. 29, no. 46, p. 465901. DOI: 10.1088/1361-648x/aa8f79
17. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 1996, Vol. 77, Iss. 18, pp. 3865–3868. DOI: 10.1103/physrevlett.77.3865
18. Belenkov M.E., Chernov V.M. Modeling of Polymorphic Varieties of Hexagonal Graphene Functionalized with Hydroxyl Groups. *Physics-chemical aspects of studying clusters, nanostructures and nanomaterials*, 2021, Vol. 13, pp. 541–551. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.541

*Received Октябрь 15, 2021*

### Information about the authors

Belenkov Maxim Evgenyevich is Post-graduate Student, Department of Radiophysics and Electronics, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: me.belenkov@gmail.com

Greshnyakov Vladimir Andreevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Senior Lecturer of the Condensed Matter Physics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

Chernov Vladimir Mikhailovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor of the Radiophysics and Electronics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

## АТОМНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРЫ ХИРАЛЬНЫХ ЗОЛОТЫХ НАНОТРУБОК

**Е.Р. Созыкина, С.А. Созыкин**

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: sozykinaer@susu.ru, sozykinsa@susu.ru

**Аннотация.** Приводятся результаты исследования атомной и электронной структуры золотых нанотрубок, не обладающих зеркальной симметрией. Построены элементарные ячейки нанотрубок (4, 3) и (5, 3) и проведено моделирование их свойств в рамках теории функционала электронной плотности с использованием периодических граничных условий. Установлено различное поведение двух типов межатомных расстояний при «скручивании» треугольной решетки каркаса нанотрубок, связи в одном из которых оказались заметно короче, чем в нанотрубках с зеркальной симметрией. Особенности электронной структуры и парциальных плотностей электронных состояний в целом оказались схожими у нанотрубок, обладающих зеркальной симметрией, и у тех, которые ее лишены.

*Ключевые слова:* золотая нанотрубка; теория функционала электронной плотности; зонная структура; плотность электронных состояний.

### Введение

Практическое применение золотых наночастиц насчитывает более полутора тысяч лет: коллоидное золото использовалось в качестве красителя еще в IV веке. На протяжении долгого времени было понимание того, что от размера наночастиц зависят физические свойства такого красителя. Разобраться же со структурой наночастиц удалось лишь в наши дни. Так, в работе [1] продемонстрировано многообразие возможных атомных структур кластеров из 26 атомов золота. Среди них оказались даже нанотрубки – полые каркасные структуры цилиндрической формы с треугольной решеткой на поверхности. Впервые об экспериментальном исследовании золотых нанотрубок (ЗНТ) сообщается в работе [2], где стабильные нанопровода из атомов золота получались в процессе облучения тонкой пленки золота в сверхвысоком вакууме просвечивающего электронного микроскопа. В больших объемах золотые нанотрубки получают с использованием матрицы – шаблона [3–5].

Электрические, оптические, электрохимические, транспортные и каталитические свойства золотых нанотрубок указывают на возможность их широкого практического использования [6–11], в том числе в квантовых устройствах [12].

В работе [13] приведены сведения об атомной и электронной структуре золотых нанотрубок различного диаметра, обладающих зеркальной симметрией. Расчеты проводились в рамках теории функционала плотности. Парциальные плотности электронных состояний, приведенные в этой работе, свидетельствуют о том, что вблизи уровня Ферми плотность состояний  $d$ -электронов выше плотности состояний  $s$ -электронов. Выше уровня Ферми вклад  $d$ -электронов в плотность состояний многократно уменьшается. В более поздней работе [14] кроме близких результатов по электронным свойствам приведены сведения и о колебательных спектрах.

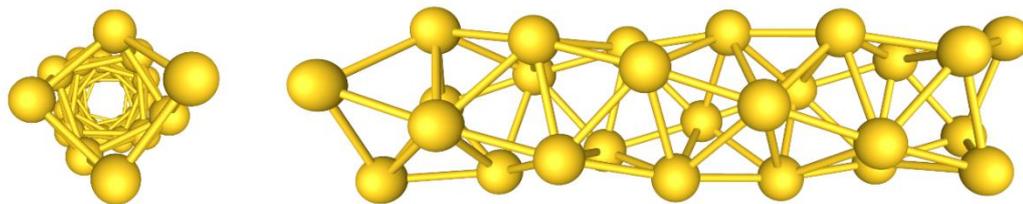
Данная работа является продолжением исследования [13]: рассматриваются не упомянутые в предыдущей работе нанотрубки без зеркальной симметрии. Таким образом, эти две работы можно в совокупности рассматривать как единое комплексное исследование золотых нанотрубок в рамках теории функционала электронной плотности.

### Модель

По аналогии с углеродными нанотрубками структуру золотых нанотрубок задают двумя целыми числами, называемыми индексами хиральности, которые определяют способ сворачивания плоскости из атомов золота (треугольная решетка) в цилиндрическую поверхность. Эти индексы указываются в круглых скобках через запятую:  $(n, m)$ . В этой работе мы исследовали хиральные

золотые нанотрубки (4, 3) и (5, 3). Их элементарные ячейки содержат 26 и 38 атомов соответственно.

а)



б)

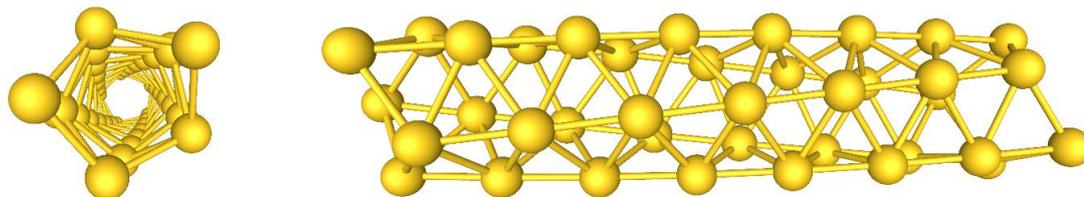


Рис. 1. Атомные структуры ЗНТ хиральностей: а) (4, 3), б) (5, 3)

### Метод расчета

Приведенные в статье результаты получены с помощью программного пакета SIESTA [15], в котором реализована теория функционала электронной плотности с атомно-подобным базисным набором и формализмом псевдопотенциала. Использовались обменно-корреляционный функционал PBE (Perdew–Burke–Ernzerhof) и DZP (polarized double-zeta), базисный набор, учитывающий релятивистские поправки псевдопотенциала. Параметр, определяющий детализированность сетки в координатном пространстве (MeshCutoff), выбирался равным 400 Рб. Разбиение обратного пространства в схеме Монхорста–Пака составляло  $1 \times 1 \times 40$  k-точек.

При моделировании накладывались периодические граничные условия. Расчетная ячейка имела форму параллелепипеда со сторонами  $5 \times 5 \times c$  нм, где параметр трансляции в направлении оси нанотрубки  $c$  составлял 1,63 нм для ЗНТ (4, 3) и 2,00 нм для ЗНТ (5, 3). Такой выбор параметров трансляции сводит к минимуму взаимодействие нанотрубки со своим периодическим продолжением в плоскости, перпендикулярной оси нанотрубки.

### Результаты

Можно выделить два типа межатомных расстояний Au–Au в хиральных нанотрубках: те, которые относятся к «цепочкам», образующим цилиндрическую поверхность, и те, которые относятся к атомам, принадлежащим соседним «цепочкам». После оптимизации геометрии по методу сопряженных градиентов было обнаружено, что длины связей первого типа 0,265–0,267 нм и мало отличаются от длин аналогичных связей в ахиральных нанотрубках [13]. Второй тип межатомных расстояний претерпевает заметные изменения при «скручивании» нанотрубки. В ахиральных нанотрубок эти связи не превышают 0,270 нм, а в рассмотренных нами хиральных достигают 0,273 нм для ЗНТ (5, 3) и 0,276 нм для ЗНТ (4, 3).

Энергии образования нанотрубок по отношению к газофазному золоту в расчете на один атом оценивались по формуле:

$$E_{form} = \frac{E_{ЗНТ} - nE_{Au}}{n},$$

где  $n$  – количество атомов в расчетной ячейке,  $E_{ЗНТ}$  – энергия нанотрубки,  $E_{Au}$  – энергия одного атома, находящегося в такой же ячейке, как нанотрубка. Энергии образования по модулю оказались равны 5,35 эВ и 5,51 эВ, для ЗНТ (4, 3) и ЗНТ (5, 3), соответственно. Эти величины заметно меньше соответствующих энергий для нехиральных нанотрубок (5,85 эВ – 5,93 эВ) [13]. Это свидетельствует о большей энергетической привлекательности образования нехиральных нанотрубок.

Следует отметить, что золотые нанотрубки (4, 3) и (5, 3) – сравнительно хорошо изученные объекты. Так, расчету их зонной структуры посвящены, например, работы [16, 17]. Авторы

первой из них использовали программу VASP, второй – SIESTA. При детальном рассмотрении представленных в них зонных структур становится понятно, что в них достаточно много различий. Мы провели расчет зонной структуры этих нанотрубок. Они показаны на рис. 2. Поскольку в нашей работе использовался пакет SIESTA, стоило бы ожидать, что полученный нами результат будет близок к результату работы [17], но это оказалось не так: результат в точности совпал с работой [16]. Этот результат показывает, что верная настройка параметров при использовании свободно распространяемой программы SIESTA позволяет получать результаты, которые аналогичны результатам расчета коммерческого программного обеспечения (VASP).

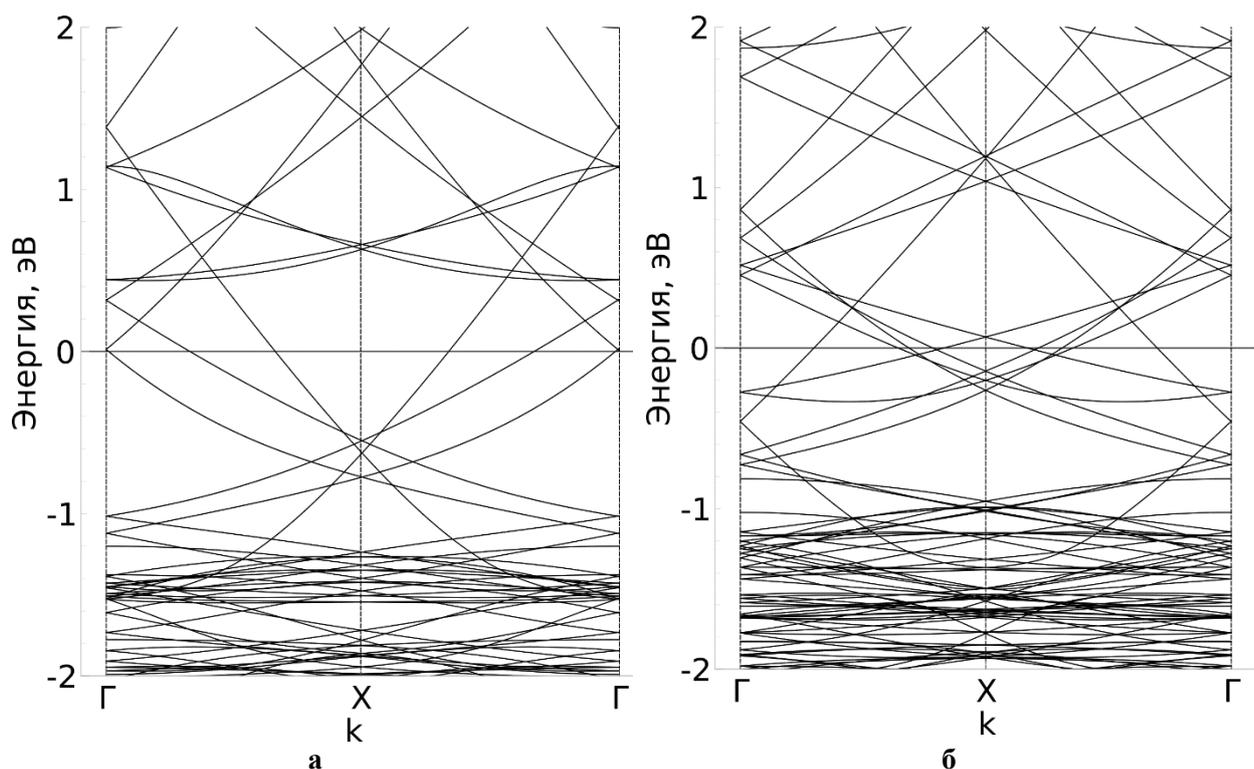


Рис. 2. Зонная структура золотых нанотрубок а) (4, 3) и б) (5, 3). Путь в обратном пространстве соответствует направлению вдоль оси нанотрубки. Энергия отсчитывается от уровня Ферми

При сопоставлении зонной структуры хиральных (рис. 2) и ахиральных [13] нанотрубок можно отметить уменьшение линейности дисперсионных кривых, проходящих через уровень Ферми. Качественно сохраняется и зависимость количества таких кривых: не уменьшается с увеличением диаметра (три для ЗНТ (4, 3) и пять для ЗНТ (5, 3)). Диаметр ЗНТ (4, 3) меньше диаметра ЗНТ (8, 0), для которой согласно работе [13] уровень пересекают 4 кривые. Однако диаметр ЗНТ (5, 3) меньше диаметра ЗНТ (9, 0), для которой в работе [13] было обнаружено всего 4 кривые. То есть число дисперсионных кривых, пересекающих уровень Ферми, для хиральных нанотрубок растет быстрее, чем для ахиральных.

Использование формализма псевдопотенциала позволяет вместо всех электронов атома золота рассматривать всего 11: 10 на  $5d$ -подуровне и 1 на  $6s$ -подуровне. Именно эти электроны определяют плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми, а, следовательно, и наблюдаемые свойства золотых нанотрубок. Полные (DOS) и парциальные (PDOS) плотности электронных состояний ЗНТ (4, 3) и ЗНТ (5, 3) приведены на рис. 3. Ожидаемым результатом является ненулевая DOS на уровне Ферми: на это указывают все имеющиеся литературные данные по золотым нанотрубкам бесконечной длины. Для обеих нанотрубок замечен пик плотности состояний вблизи уровня Ферми. Он расположен выше уровня Ферми для ЗНТ (4, 3) и ниже для ЗНТ (5, 3). Это дает основание предполагать, что, как и для ахиральных нанотрубок [13], при некотором диаметре возможно совмещение сингулярности Ван-Хова и уровня Ферми.

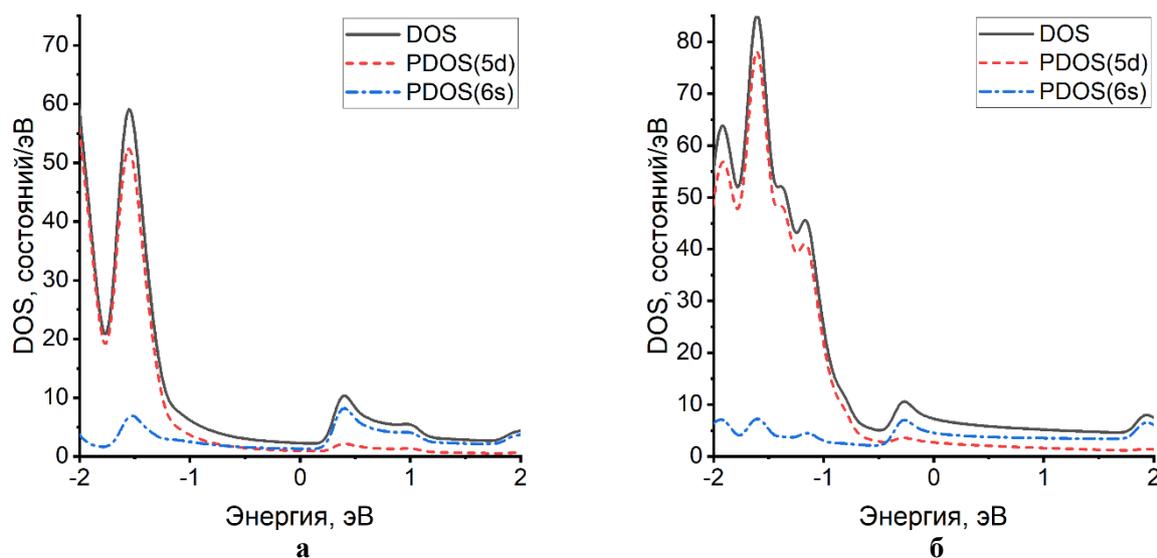


Рис. 3. Полные и парциальные плотности электронных состояний а) ЗНТ (4, 3) и б) ЗНТ (5, 3). Энергии отсчитываются от уровня Ферми

Обращает на себя внимание и различный вклад  $5d$  и  $6s$  электронов в плотность состояний на уровне Ферми для нанотрубок с различными индексами хиральности. Для ЗНТ (4, 3) указанные вклады почти равны, в то время как для ЗНТ (5, 3) вклад  $6s$  электрона почти в два раза превышает вклад  $5d$  электронов. Аналогичный эффект был продемонстрирован в работе [13] для ЗНТ (8, 0) и ЗНТ (13, 0).

### Заключение

Таким образом, на основании проведенного теоретического исследования можно сделать следующие выводы. Соотношение вкладов  $5d$  и  $6s$  электронов в плотность электронных состояний не является универсальным для всех нанотрубок: они могут быть как соизмеримы, так и отличаться в два раза. Все золотые нанотрубки обладают металлическим типом проводимости, но плотность состояний на уровне Ферми, определяющая электронные свойства, для нанотрубок некоторых хиральностей может многократно превышать типичные для золотых нанотрубок значения из-за возникающей на уровне Ферми сингулярности Ван-Хова. Эта сингулярность соответствует  $6s$  электронам.

### Литература

1. Isomerism and Structural Fluxionality in the  $Au_{26}$  and  $Au_{26}^-$  Nanoclusters / B. Schaefer, R. Pal, N.S. Khetrappal *et al.* // ACS Nano. – 2014. – Vol. 8, no. 7. – P. 7413–7422.
2. Oshima, Y. Helical Gold Nanotube Synthesized at 150 K / Y. Oshima, K. Onga, A. Takayanagi // Physical Review Letters. – 2003. – Vol. 91, Iss. 20. – P. 205503.
3. Ordered Array of Gold Nanoshells Interconnected with Gold Nanotubes Fabricated by Double Templating / W. Dong, H. Dong, Z. Wang *et al.* // Adv. Mater. – 2006. – Vol. 18, Iss. 6. – P. 755–759.
4. Chen, J. One-Dimensional Nanostructures of Metals: Large-Scale Synthesis and some Potential Applications / J. Chen, B.J. Wiley, Y. Xia // Langmuir. – 2007. – Vol. 23, Iss. 8. – P. 4120–4129.
5. Li, H.H. Recent Advances on Controlled Synthesis and Engineering of Hollow Alloyed Nanotubes for Electrocatalysis / H.H. Li, S.H. Yu // Adv. Mater. – 2019. – Vol. 31, Iss. 38. – P. 1803503.
6. Fabrication and Optical Properties of Gold Nanotube Arrays / W.R. Hendren, A. Murphy, P. Evans *et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. – 2008. – Vol. 20, no. 36. – P. 362203.
7. Bridges, C.R. Gold Nanotubes as Sensitive, Solution-Suspendable Refractive Index Reporters / C.R. Bridges, P.M. DiCarmine, D.S. Seferos // Chem. Mater. – 2012. – Vol. 24, no. 6. – P. 963–965.
8. Ye, S. Engineering Gold Nanotubes with Controlled Length and Near-Infrared Absorption for Theranostic Applications / S. Ye, G. Marston, J.R. McLaughlan *et al.* // Adv. Funct. Mater. – 2015. – Vol. 25, Iss. 14. – P. 2117–2127.
9. Hybrid Plasmonic Cavity Modes in Arrays of Gold Nanotubes / J. Wang, C. Zhang, J. Zhang *et al.* // Adv. Opt. Mater. – 2016. – Vol. 5, no. 4. – P. 1–11.

10. Developing Gold Nanotubes as Photoacoustic Contrast Agents / S. Ye, G. Marston, A.F. Markham *et al.* // *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2019. – Vol. 1151, no. 1. – P. 012018.
11. Gold Nanotubes: Synthesis, Properties and Biomedical Applications / Y.L. Liu, J. Zhu, G.J. Weng, J. Zhao // *Microchim Acta.* – 2020. – Vol. 187. – P. 612.
12. Gold Nanotubes and Nanorings: Promising Candidates for Multidisciplinary Fields / U. Shamraiz, B. Raza, H. Hussain *et al.* // *Int. Mater. Rev.* – 2018. – Vol. 64, no. 3. – P. 478–512.
13. Sozykin, S.A. Electronic Structure of Achiral Gold Nanotubes / S.A. Sozykin, V.P. Beskachko // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* – 2020. – Vol. 115. – P. 113686.
14. Kapoor, P. Chirality Dependent Structural, Electronic and Mechanical Properties of Pristine Ag, Au and Pt Nanotubes: A DFT Study / P. Kapoor, M. Sharma, P.K. Ahluwalia // *Phys. E: Low Dimens. Syst. Nanostructures.* – 2021. – Vol. 131. – P. 114745.
15. The SIESTA Method for Ab Initio Order-N Materials Simulation / J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale *et al.* // *J. Phys. Condens. Matter.* – 2002. – Vol. 14, no. 11. – P. 2745–2779.
16. Senger, R.T. Chiral Single-Wall Gold Nanotubes / R.T. Senger, S. Dag, S. Ciraci // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93, Iss. 19. – P. 196807.
17. Manrique, D. Zs. Chiral Currents in Gold Nanotubes / D.Zs. Manrique, J. Cserti, C.J. Lambert // *Phys. Rev. B.* – 2010. – Vol. 81, Iss.7. – P. 073103.

Поступила в редакцию 12 октября 2022 г.

### Сведения об авторах

Созыкина Елена Рудольфовна – преподаватель, кафедра «Физика наноразмерных систем», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: sozykinaer@susu.ru

Созыкин Сергей Анатольевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра «Физика наноразмерных систем», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: sozykinsa@susu.ru

---

*Bulletin of the South Ural State University*  
*Series "Mathematics. Mechanics. Physics"*  
2022, vol. 14, no. 4, pp. 59–64

---

DOI: 10.14529/mmph220408

## ATOMIC AND ELECTRONIC STRUCTURES OF CHIRAL GOLD NANOTUBES

**E.R. Sozykina, S.A. Sozykin**

*South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation*

*E-mail: sozykinaer@susu.ru, sozykinsa@susu.ru*

**Abstract.** The article presents the results of a study of the atomic and electronic structure of gold nanotubes that do not have mirror symmetry. The elementary cells of nanotubes (4, 3) and (5, 3) are constructed and their properties are modeled in the framework of the density functional theory using periodic boundary conditions. Different behavior of two types of interatomic distances was established during the “twisting” of the triangular lattice of the nanotube wall. The bonds in first one turned out to be noticeably shorter than in nanotubes with mirror symmetry. The features of the electronic structure and partial densities of electronic states, in general, turned out to be regardless of the presence of mirror symmetry.

*Keywords:* gold nanotube, density functional theory, band structure, density of states.

### References

1. Schaefer B., Pal R., Khetrpal N.S., Amsler M., Sadeghi A., Blum V., Zeng X.C., Goedecker S., Wang L.-S. Isomerism and Structural Fluxionality in the Au<sub>26</sub> and Au<sub>26</sub><sup>-</sup> Nanoclusters. *ACS Nano*, 2014, Vol. 8, no. 7, pp. 7413–7422. DOI: 10.1021/nn502641q
2. Oshima Y., Onga K., Takayanagi A. Helical Gold Nanotube Synthesized at 150 K. *Physical Review Letters*, 2003, Vol. 91, Iss. 20, P. 205503. DOI: 10.1103/physrevlett.91.205503

3. Dong W., Dong H., Wang Z., Zhan P., Yu Z., Zhao X., Zhu Y., Ming N. Ordered Array of Gold Nanoshells Interconnected with Gold Nanotubes Fabricated by Double Templating. *Adv. Mater.*, 2006, Vol. 18, Iss. 6, pp. 755–759. DOI: 10.1002/adma.200501304
4. Chen J., Wiley B.J., Xia Y. One-Dimensional Nanostructures of Metals: Large-Scale Synthesis and Some Potential Applications. *Langmuir*, 2007, Vol. 23, Iss. 8, pp. 4120–4129. DOI: 10.1021/la063193y
5. Li H.H., Yu S.H. Recent Advances on Controlled Synthesis and Engineering of Hollow Alloyed Nanotubes for Electrocatalysis. *Adv. Mater.*, 2019, Vol. 31, Iss. 38, p. 1803503. DOI: 10.1002/adma.201803503
6. Hendren W.R., Murphy A., Evans P., O'Connor D., Wurtz G.A., Zayats A.V., Atkinson R., Pollard R.J. Fabrication and Optical Properties of Gold Nanotube Arrays. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2008, Vol. 20, no. 36, p. 362203. DOI: 10.1088/0953-8984/20/36/362203
7. Bridges C.R., DiCarmine P.M., Seferos D.S. Gold Nanotubes as Sensitive, Solution-Suspendable Refractive Index Reporters. *Chem. Mater.*, 2012, Vol. 24, no. 6, pp. 963–965. DOI: 10.1021/cm203184d
8. Ye S., Marston G., McLaughlan J.R., Sigle D.O., Ingram N., Freear S., Baumberg J.J., Bushby R.J., Markham A.F., Critchley K., Coletta P.L., Evans S.D. Engineering Gold Nanotubes with Controlled Length and Near-Infrared Absorption for Theranostic Applications. *Adv. Funct. Mater.*, 2015, Vol. 25, Iss. 14, pp. 2117–2127. DOI: 10.1002/adfm.201404358
9. Wang J., Zhang C., Zhang J., Song H., Wang P., Lu Y., Fei G., Xu W., Xu W., Zhang L., Kivshar Y.S., Zhang L. Hybrid plasmonic cavity modes in arrays of gold nanotubes. *Adv. Opt. Mater.*, 2016, Vol. 5, no. 4, Article no. 1600731. DOI: 10.1002/adom.201770023
10. Ye S., Marston G., Markham A.F., Coletta P.L., Evans S.D. Developing Gold Nanotubes as Photoacoustic Contrast Agents. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2019, Vol. 1151, no. 1, P. 012018. DOI: 10.1088/1742-6596/1151/1/012018
11. Liu Y.L., Zhu J., Weng G.J., Zhao J. Gold Nanotubes: Synthesis, Properties and Biomedical Applications. *Microchim Acta*, 2020, Vol. 187, Iss. 11, P. 612. DOI: 10.1007/s00604-020-04460-y
12. Shamraiz U., Raza B., Hussain H., Badshah A., Green I.R., Kiani F.A., Al-Harrasi A. Gold Nanotubes and Nanorings: Promising Candidates for Multidisciplinary Fields. *Int. Mater. Rev.*, 2018, Vol. 64, no. 3, pp. 478–512. DOI: 10.1080/09506608.2018.1554991
13. Sozykin S.A., Beskachko V.P. Electronic Structure of Achiral Gold Nanotubes. *Phys. E: Low Dimens. Syst. Nanostructures*, 2020, Vol. 115, P. 113686. DOI: 10.1016/j.physe.2019.113686
14. Kapoor P., Sharma M., Ahluwalia P.K. Chirality Dependent Structural, Electronic and Mechanical Properties of Pristine Ag, Au and Pt Nanotubes: A DFT Study. *Phys. E: Low Dimens. Syst. Nanostructures*, 2021, Vol. 131, P. 114745. DOI: 10.1016/j.physe.2021.114745
15. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D., García A., Junquera J., Ordejón P., Sánchez-Portal D. The SIESTA Method for Ab Initio Order-N Materials Simulation. *J. Phys. Condens. Matter*, 2002, Vol. 14, no. 11, pp. 2745–2779. DOI: 10.1088/0953-8984/14/11/302
16. Senger R.T., Dag S., Ciraci S. Chiral Single-Wall Gold Nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, Vol. 93, Iss. 19, P. 196807. DOI: 10.1103/physrevlett.93.196807
17. Manrique D.Zs., Cserti J., Lambert C.J. Chiral Currents in Gold Nanotubes. *Phys. Rev. B*, 2010, Vol. 81, Iss.7, P. 073103. DOI: 10.1103/physrevb.81.073103

*Received October 12, 2022*

### Information about the authors

Sozykina Elena Rudolfovna, Lecturer, Department of Physics of Nanoscale Systems, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: sozykinaer@susu.ru

Sozykin Sergey Anatolyevich, Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Physics of Nanoscale Systems, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: sozykinsa@susu.ru

# МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СТЕКЛООБРАЗНОЙ ПОДЛОЖКИ SiO<sub>2</sub> В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР

**П.И. Черновол, А.А. Мирзоев**

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: mirzoevaa@susu.ru

**Аннотация.** В работе Ф.В. Григорьева «Силовые поля для молекулярно-динамического моделирования процесса напыления плёнок диоксида кремния» был предложен простой межйонный потенциал DESIL для моделирования аморфных подложек SiO<sub>2</sub>, широко используемых для напыления тонких пленок. Данный потенциал имеет важное преимущество перед популярным потенциалом BKS из-за отсутствия нефизической области притяжения на малых расстояниях между частицами. Это обстоятельство является важным при моделировании напыления на подложку SiO<sub>2</sub> когда, столкновения между частицами приводят к сближению на малые расстояния и может наблюдаться артефакт взаимного захвата частиц, искажающий результаты моделирования. Цель настоящей работы состоит в демонстрации возможностей данного потенциала для предсказания структурных и термодинамических характеристик аморфных силикатных стекол в широком диапазоне температур.

*Ключевые слова:* молекулярная динамика; диоксид кремния; потенциал Леннарда-Джонса; стеклообразная подложка.

## Введение

Как известно, в микроэлектронике в качестве подложек для нанесения тонких пленок и интегральных микросхем широко используют аморфные подложки из чистого оксида кремния SiO<sub>2</sub>. Такие подложки имеют очень низкий коэффициент линейного расширения, высокую стойкость к тепловым импульсам и химическую стойкость. Кроме того, граница раздела Si/SiO<sub>2</sub> считается важным элементом в устройствах металл–оксид–полупроводник. Таким образом, для разработки современных нанoeлектронных устройств становится важным качественное моделирование аморфной системы SiO<sub>2</sub> на атомном уровне.

Получение прямых данных о деталях атомного строения аморфных систем требует проведения дорогостоящих и ресурсоёмких исследований. Альтернативой может служить сочетание доступных экспериментальных данных с изучением структуры стекол методами молекулярной динамики. Однако для моделирования системы в пространственных и временных масштабах, представляющих интерес для инженерных приложений (несколько сотен тысяч частиц во временном интервале порядка наносекунд), возможно использование только классической молекулярной динамики с эмпирическими потенциалами межчастичного взаимодействия, параметры которых выбираются на основе доступных экспериментальных данных. Однако, следует иметь в виду, что вязкость и температура стеклования кварцевого стекла существенно зависят от исходных материалов, способа производства, состава и количества примесей [1].

К настоящему времени для анализа структур SiO<sub>2</sub> использовался целый ряд потенциалов [2–9], которые позволяют рассчитать структурные свойства различных полиморфных модификаций кварца в неплохом согласии с экспериментальными данными и результатами *ab initio* расчетов. Потенциальная энергия системы представляется в виде суммы слагаемых, описывающих электростатическое взаимодействие и взаимодействие Ван-дер-Ваальса. Как правило, первое слагаемое рассчитывается в приближении кулоновского взаимодействия точечных зарядов, центрированных на атомах. Для описания взаимодействия Ван-дер-Ваальса используются как парные потенциалы [1–6], так и трехчастичные потенциалы Стилинджера–Вебера и Вашишты [8, 9]. Поскольку в дальнейшем мы планируем изучать процессы нанесения пленочных покрытий для моделей толщиной до 100 нм, содержащих несколько миллионов атомов, то сложные трехчастичные потенциалы не могут использоваться по причине высокой вычислительной затратности.

Наиболее популярный двухчастичный потенциал ВКС (Van Beest, Kramer, van Santen [4]), в котором взаимодействие Ван-дер-Ваальса описывается потенциалом Букингема, обладает существенным недостатком, препятствующим его использованию для моделирования процессов напыления тонких пленок на поверхность кварцевого стекла. Недостаток состоит в том, что при малых расстояниях потенциал Букингема имеет нефизическое поведение, связанное с резким возрастанием слагаемого, обратно пропорционального шестой степени расстояния. Экспоненциальный член не может компенсировать этот рост, в результате чего потенциал имеет нефизическую область притяжения на малых расстояниях между частицами [10]. Поскольку при моделировании напыления столкновения между частицами достаточно часто приводят к такому сближению, то может наблюдаться артефакт взаимного захвата частиц, искажающий результаты моделирования. Поэтому для моделирования аморфного кварца в данной работе использован потенциал DESIL, предложенный в работе [2] и лишенный данного недостатка. Кроме того, двухчастичный потенциал DESIL позволяет проводить более длительные прогоны и, таким образом, изучать равновесные свойства системы при более низких температурах или исследовать стекла с более низкой температурой стеклования.

Цель настоящей статьи двояка. Во-первых, мы хотим проверить, может ли выбранный нами двухчастичный потенциал, воспроизводить структурные свойства аморфного кремнезема. Во-вторых, мы хотим подобрать методику моделирования аморфного стеклообразного кремния (влияние начального состояния, скорость изменения температуры) для получения модели стекла, согласующейся с данными эксперимента.

### Методика моделирования

Функциональная форма потенциала DESIL [1] задается суммой кулоновского члена и потенциала Леннард-Джонса. Таким образом, потенциал между частицей  $i$  и  $j$  определяется выражением:

$$U = \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right],$$

где  $q_i, q_j$  – заряды взаимодействующих атомов,  $r_{ij}$  – расстояние между атомами,  $\sigma_{ij}$  – расстояние нулевой энергии взаимодействия,  $\epsilon_{ij}$  – глубина потенциальной ямы. Используемые значения параметров приведены в табл. 1.

Таблица 1

$i-j$	$C_{12}$ , кДж·нм <sup>12</sup> /моль	$C_6$ , кДж·нм <sup>6</sup> /моль	Атомный заряд, $e$
Si-O	$4,6 \cdot 10^{-8}$	$4,2 \cdot 10^{-3}$	1,30 (Si) -0,65 (O)
O-O	$1,5 \cdot 10^{-6}$	$5,0 \cdot 10^{-5}$	
Si-Si	$1,5 \cdot 10^{-6}$	$5,0 \cdot 10^{-5}$	

МД-расчеты проводились с использованием кода LAMMPS (Sandia National Labs, US). Уравнения движения интегрировались с помощью алгоритма Верле с временным шагом в 1 фемтосекунду.

Дальнедействующие кулоновские взаимодействия учитываются с помощью суммы Эвальда (точность вычислений  $10^{-5}$ ) с расстоянием отсечки  $r_{cut} = 10 \text{ \AA}$ . Для приемлемого компромисса между точностью и объемом вычислений был выбран размер системы порядка 500 атомов (см. далее). Расчеты проводились при нулевом давлении для сравнения с экспериментальными данными, измеренными при атмосферном давлении. Грани кристалла при этом варьировались независимо.

Модель аморфного кварца была получена методом закалки из высокотемпературного расплава. На протяжении всего моделирования использовался термостат Нозье–Гувера в изотермически-изобарической форме (NPT). В качестве начальной структуры был взят альфа-кварц, 64 элементарные ячейки которого использовались в качестве ячейки моделирования с периодическими граничными условиями. Общее число частиц в ячейке моделирования составляло 576 атомов (192 атома кремния, 384 атома кислорода).

Для получения аморфной модификации кристалл нагревался со 100 К до 2700 К, выдерживался при достижении высшей температурной точки, охлаждался и вновь выдерживался при достижении конечной температуры 100 К (скорость нагрева равна 1 К/пс, скорость охлаждения 10<sup>-2</sup> К/пс). Для определения равновесных параметров для различных температур температурных шагов производились выдержки в течение 100 пс при каждом изменении температуры на 100 К. Выдержки при максимальной температуре (выше температуры плавления), начальной и конечной температурах были больше и составляли 1 нс.

В качестве начального состояния системы использовалась кристаллическая структура альфа-кварца (64 элементарные ячейки, 576 атомов) с плотностью 2,66 г/см<sup>3</sup>, соотношением граней  $a/c = 1.10$ , длинами связи Si-O = 1,62 Å, O-O = 2,64 Å и углами связей O-Si-O = 108,3°, Si-O-Si = 143,1°. После начала моделирования в течение нескольких пикосекунд наблюдаются значительные колебания плотности (с амплитудой примерно 0,25–0,35), которые со временем затухают (полностью – примерно через 30 пс), после чего плотность системы стабилизируется при значении  $\rho = 2,33$  г/см<sup>3</sup>. При этом атомы совершают своеобразные групповые колебания, приводящие к некоторому изменению исходной структуры. Скорее всего, релаксация связана с тем, что структура альфа-кварца не соответствует минимуму потенциальной энергии для используемого потенциала DESII, поэтому происходит релаксация к структуре с более низкой энергией. Полученная конфигурация в дальнейшем будет приниматься за начальную низкотемпературную (100 К) структуру.

Моделирование также осуществлялось с начальным состоянием системы в виде кристаллической структуры бета-кварца с плотностью  $\rho = 2,53$  г/см<sup>3</sup>, соотношением граней  $a/c = 0,92$ , длинами связи Si-O = 1,57 Å, O-O = 2,56 Å и углами связей O-Si-O = 109,8°, Si-O-Si = 155,4°. Как и в первом случае, после запуска моделирования происходит релаксация, по результатам которой получается описанная выше начальная низкотемпературная (100 К) структура. Кроме того, параметры полученной методом закалки аморфной фазы полностью идентичны результатам, полученным с использованием структуры альфа-кварца: функции распределения практически полностью повторяются, тепловой коэффициент расширения качественно схож, а конечная плотность кристалла отличается лишь на 0,03 г/см<sup>3</sup>. Таким образом, независимо от выбранного начального состояния результат фактически был одинаков.

### Результаты моделирования

По результатам моделирования были построены зависимости усреднённых значений плотности системы от температуры при нагревании начальной структуры до температуры 2700 К, значительно превышающей температуру плавления, затем при последующей закалке, в результате которой формируется аморфная фаза, и при повторном нагреве данной фазы (рис. 1).

Температурная зависимость плотности при нагреве начальной структуры качественно очень похожа на экспериментальную для силикатного стекла типа I [11]. Действительно, при температуре порядка –70 °С наблюдается небольшой минимум плотности, после чего кривая возрастает, достигая максимума приблизительно при 1700 °С. После этого плотность начинает монотонно снижаться, а при температуре 2500 К система плавится, что приводит к резкому понижению плотности примерно, до 2,0 г/см<sup>3</sup>, что неплохо согласуется с экспериментальным значением порядка 2,1 г/см<sup>3</sup> [12]. При закалке из расплава плотность системы изменяется немонотонно и при температуре 100 К достигает значение 2,21 г/см<sup>3</sup>, что находится в хорошем согласии с экспериментально наблюдаемым значением 2,20 г/см<sup>3</sup> [11] для чистого кварцевого стекла. Следует понимать, что в силу использования периодических граничных условий полученную нами модель аморфного стекла следует рассматривать как структуру отдельного микрокристаллита, являющегося основой кварцевого стекла. Аморфная структура стекла образуется путем объединения случайно ориентированных микрокристаллитов и небольших областей межкристаллитных границ, близких по строению к расплаву SiO<sub>2</sub>.

Изменение функции радиального распределения (ФРР) в процессе получения аморфного кварца методом закалки (включая область высоких температур) приведено на рис. 2. График содержит сравнение данных для альфа-кварца, структура которого использовалась при запуске моделирования, начальной низкотемпературной (100 К) структуры, образовавшейся в результате релаксации структуры альфа-кварца, и аморфной структуры, полученной в результате охлаждения до 100 К высокотемпературного расплава.

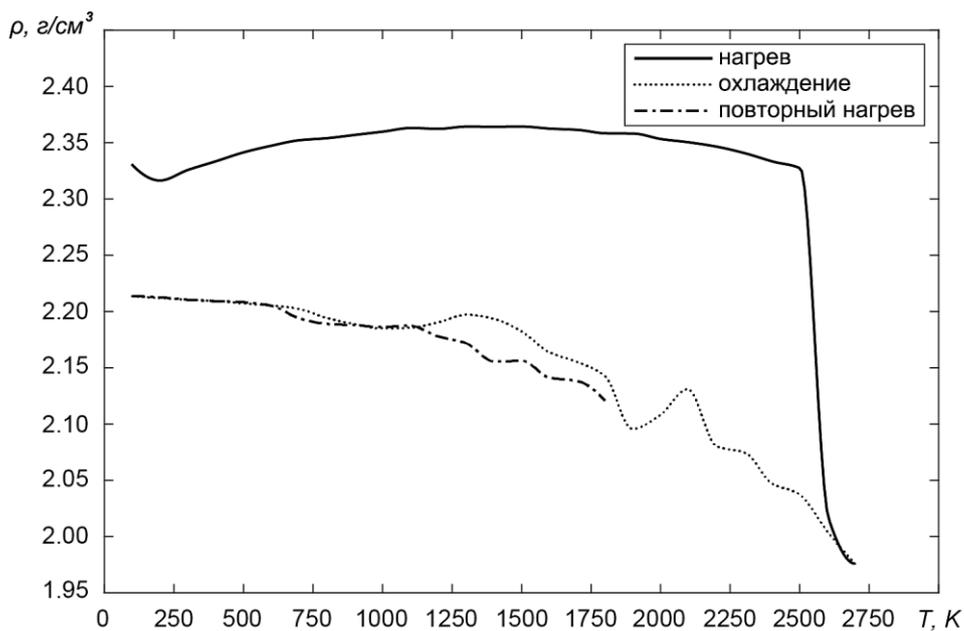


Рис. 1. Изменение плотности  $\text{SiO}_2$  в процессе моделирования

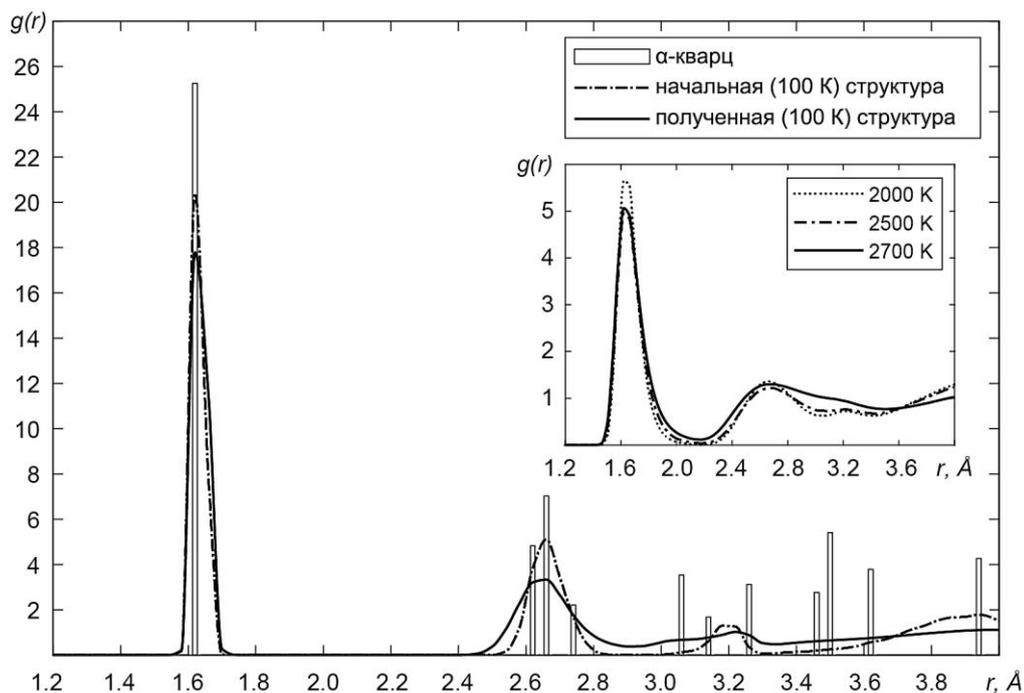


Рис. 2. Изменение функции радиального распределения (ФРР)  $\text{SiO}_2$  в процессе получения аморфной фазы методом закалки

Видно, что ФРР для структуры, полученной методом закалки из расплавленного кварца (аморфной фазы), имеет существенно большее уширение пиков. Чтобы подтвердить, что полученная нами структура действительно является аморфной, было проведено сравнение ФРР с данными эксперимента по дифракции нейтронов для плавленого кварца [13]. Как видно из рис. 3 наблюдается хорошее согласие полученной при моделировании аморфной структуры с высокоточным экспериментом.

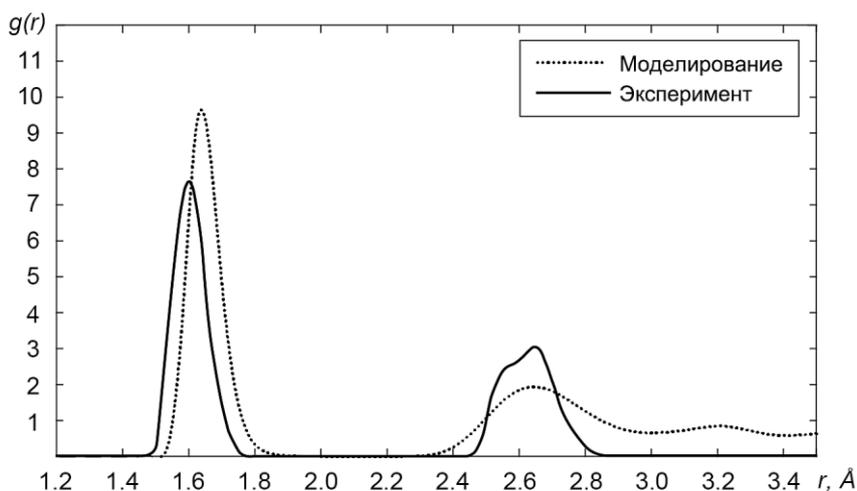


Рис. 3. Сравнение функции радиального распределения полученной аморфной фазы с экспериментальными данными по дифракции нейтронов на образцах плавленного кварца для температуры 900 К [13]

На рис. 4 приведено распределение углов связи (O-Si-O и Si-O-Si) для начальной и аморфизированной структуры, а также для ряда высоких температур при нагревании в сравнении со структурой  $\alpha$ -кварца.

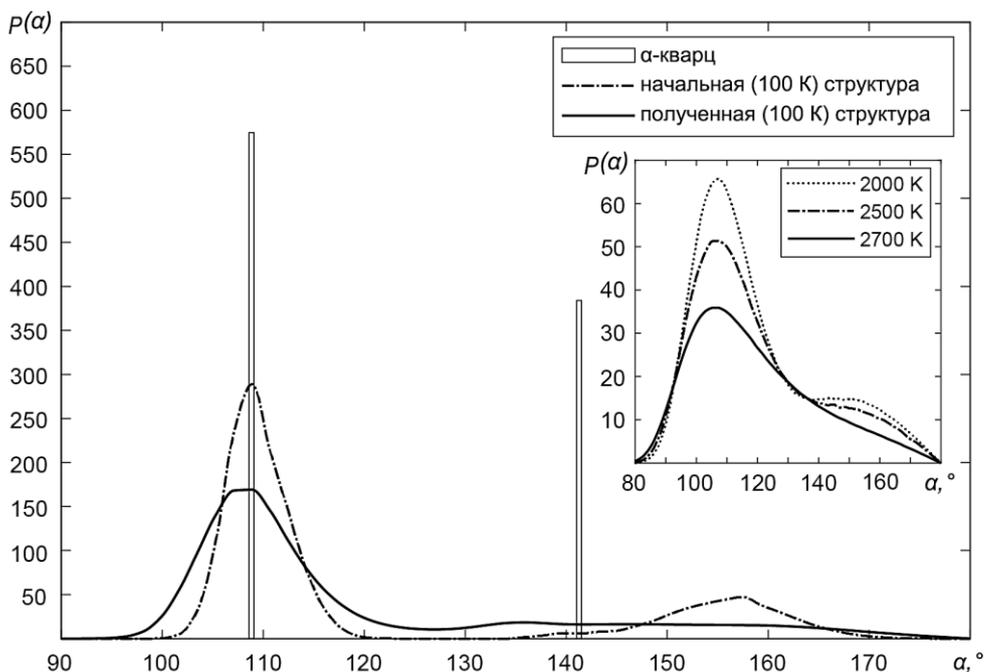


Рис. 4. Изменение функции распределения  $\rho(\alpha)$  углов связи в молекуле  $\text{SiO}_2$  в процессе получения аморфной фазы методом закалки

По окончании процедуры закалки среднее значение угла O-Si-O для модели плавленного кварца составляет порядка  $108,9\text{--}110,7^\circ$ . Основной структурной единицей по-прежнему является тетраэдр. Сравнение средних значений длин связи построенной модели с экспериментальными данными [13] приведено в табл. 2. Заметное отличие наблюдается только для длины связи Si-Si, для пар Si-O, O-O значения идентичны.

Таблица 2

	Si-O, Å	O-O, Å	Si-Si, Å
Моделирование	1,63	2,64	3,22
Эксперимент	1,61	2,63	3,08

Полученная аморфная фаза повторно нагревалась со 100 К до 1800 К (с прежней методикой нагрева, включая выдержки) с целью определения коэффициента линейного теплового расширения (рис. 5).

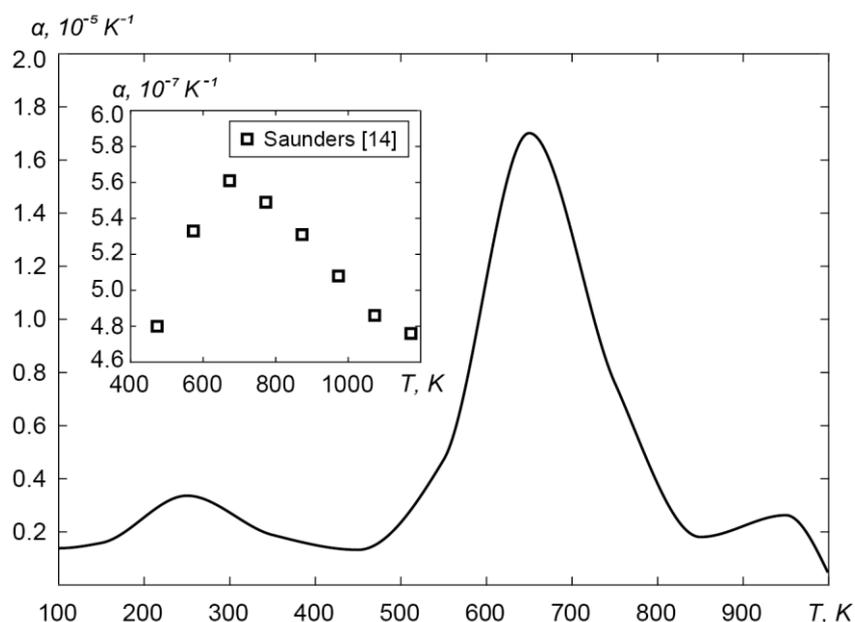


Рис. 5. Значение коэффициента линейного теплового расширения в широком диапазоне температур

Коэффициент линейного теплового расширения полученного кристалла в диапазоне от 100 К до 1000 К в среднем составляет  $5,0 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ , что почти на порядок выше среднего экспериментального значения  $5,4 \times 10^{-7} \text{ K}^{-1}$  [14] для данного диапазона температур. Однако этому расхождению не следует удивляться. Как мы уже отмечали выше, наша модель является локальной и относится к микрокристаллитному образованию, тогда как тепловой коэффициент линейного расширения (ТКЛР), измеренный методами дилатометрии, является макроскопическим. Низкое значение дилатометрического ТКЛР связано с наличием в макроструктуре структурных особенностей, которые с ростом температуры могут сокращаться, компенсируя более высокие значения локальных ТКЛР [13]. Значительно более важным является качественное согласие температурной зависимости теплового расширения в нашей модели с экспериментальными данными, приведенными на вставке рис. 5.

**Выводы**

В рамках настоящей работы проведена расширенная демонстрация возможностей простого парного потенциала DESIL [1] для предсказания структурных и термодинамических характеристик аморфных силикатных стекол. Подобрана методика моделирования аморфного стеклообразного кремния. Показано, что данный потенциал вполне удовлетворительно воспроизводит плотность, функцию радиального распределения и температурную зависимость коэффициента термического расширения аморфного кремнезема в широком диапазоне температур.

### Литература

1. Nascimento, H.H. dos S. Identifying Silica Types using Viscosity Data and Principal Component Analysis / H.H. dos S. Nascimento, M.L.F. Nascimento // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 2021. – Vol. 157. – 110177.
2. Grigoriev, F. Force Fields for Molecular Dynamics Simulation of the Deposition of a Silica Dioxide Film / F. Grigoriev // *Moscow Univ. Phys. Bull.* – 2015. – Vol. 70. – pp. 521–526.
3. Stillinger, F.H. Computer Simulation of Local Order in Condensed Phases of Silicon. / F.H. Stillinger, T.A. Weber // *Physical Review B*. – 1985. – Vol. 31, no. 8, pp. 5262–5271.
4. Van Beest, B.W.H. Force Fields for Silicas and Aluminophosphates based on Ab Initio Calculations / B.W.H. Van Beest, G.J. Kramer, R.A. van Santen // *Physical Review Letters*. – 1990. – Vol. 64, Iss. 16. – P. 1955–1958.
5. De Boer, K. Ab initio approach to the development of interatomic potentials for the shell model of silica polymorphs / K. De Boer, A.P.J. Jansen, R.A. van Santen // *Chemical Physics Letters*. – 1994. – Vol. 223, Iss. 1-2. – P. 46–53.
6. A New Self-Consistent Empirical Interatomic Potential Model for Oxides, Silicates, and Silica-Based Glasses / A. Pedone, G. Malavasi, M.C. Menziani // *The Journal of Physical Chemistry B*. – 2006. – Vol. 110, Iss. 24. – P. 11780–11795.
7. Interatomic Potential for Si–O Systems using Tersoff Parameterization / S. Munetoh, T. Mootooka, K. Moriguchi, A. Shintani // *Computational Materials Science*. – 2007. – Vol. 39, Iss. 2. – P. 334–339.
8. Interaction potential for SiO<sub>2</sub>: A Molecular-Dynamics Study of Structural Correlations / P. Vashishta, R.K. Kalia, J.P. Rino, I. Ebbsjö // *Physical Review B*. – 1990. – Vol. 41, Iss. 17. – P. 12197–12209.
9. Molecular Dynamics Simulations of Vitreous Silica Structures / A. Takada, P. Richet, C.R.A. Catlow, G.D. Price // *J. Non-Cryst. Sol.* – 2004. – Vol. 345-346. – P. 224–229.
10. Guillot, B. Computer Simulation Study of Natural Silicate Melts. Part I: Low Pressure Properties / B. Guillot, N. Sator // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. – 2007. – Vol. 71, Iss. 5. – P. 1249–1265.
11. Brückner, R. Properties and structure of vitreous silica. I. / R. Brückner // *Journal of Non-Crystalline Solids*. – 1970. – Vol. 5, Iss. 2. – P. 123–175.
12. Тягельский, П.В. Термические свойства кварцевого стекла в интервале температур 1200–2375 К / П.В. Тягельский, С.В. Станкус // *ТБТ*. – 1996. – Т. 34, вып. 2. – С. 331–333.
13. Structural Evolution of Fused Silica below the Glass-Transition Temperature Revealed by In-Situ Neutron Total Scattering / Y. Shi, D. Ma, A.P. Song *et al.* // *J. Non Cryst. Solids*. – 2019. – Vol. 528. – 119760.
14. Oishi, J. Thermal Expansion of Fused Quartz / J. Oishi, T. Kimura // *Metrologia*. – 1969. – Vol. 5, no. 2. – P. 50–55.

Поступила в редакцию 9 октября 2022 г.

### Сведения об авторах

Черновол Павел Иванович – студент 4 курса специальности «Электроника и микроэлектроника», кафедра физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

Мирзоев Александр Аминулаевич – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, профессор кафедры физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1527-371X>, e-mail: mirzoevaa@susu.ru

## MOLECULAR DYNAMIC MODELING OF STRUCTURE AND PROPERTIES OF SiO<sub>2</sub> GLASS SUBSTRATE IN A BROAD TEMPERATURE RANGE

**P.I. Chernovol, A.A. Mirzoev**

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: mirzoevaa@susu.ru

Abstract. F.V. Grigoriev's paper "Force Fields for Molecular-Dynamic Modeling of Sputter Deposition Process on Silicon Dioxide Film", proposes a simple DESIL inter-ion potential for modeling amorphous SiO<sub>2</sub> substrates widely used for thin film sputter deposition. This potential provides an important advantage when compared with popular potential of BKS due to the absence of a non-physical attraction region at short distances between particles. This is important when simulating SiO<sub>2</sub> substrate sputtering where collisions between particles result in short-range proximity. In this case an artifact of particle inter-capture may be observed which distorts the simulation results. The purpose of this work is to demonstrate the potential for predicting the structural and thermodynamic characteristics of amorphous silicate glasses over a broad temperature range.

*Keywords: molecular dynamics; silicon dioxide; Lennard-Jones potential; glass substrate.*

### References

1. Nascimento H.H. dos S., Nascimento M.L.F. Identifying Silica Types using Viscosity Data and Principal Component Analysis. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2021, Vol.157, 110177. DOI: 10.1016/j.jpcs.2021.110177.
2. Grigoriev F. Force Fields for Molecular Dynamics Simulation of the Deposition of a Silica Dioxide Film. *Moscow Univ. Phys. Bull.*, 2015, Vol. 70, pp. 521–526. DOI: 10.3103/s0027134915060107
3. Stillinger F.H., Weber T.A. Computer Simulation of Local Order in Condensed Phases of Silicon. *Physical Review B*, 1985, Vol. 31, Iss. 8, pp. 5262–5271. DOI: 10.1103/physrevb.31.5262.
4. Van Beest B.W.H., Kramer G.J., van Santen R.A. Force Fields for Silicas and Aluminophosphates based on Ab Initio Calculations. *Physical Review Letters*, 1990, Vol. 64, Iss. 16, pp. 1955–1958. DOI: 10.1103/physrevlett.64.1955
5. De Boer K., Jansen A.P.J., van Santen R.A. Ab Initio Approach to the Development of Interatomic Potentials for the Shell Model of Silica Polymorphs. *Chemical Physics Letters*, 1994, Vol. 223, Iss. 1-2, pp. 46–53. DOI: 10.1016/0009-2614(94)00406-4
6. Pedone A., Malavasi G., Menziani M.C., Cormack A.N., Segre U. A New Self-Consistent Empirical Interatomic Potential Model for Oxides, Silicates, and Silica-Based Glasses. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2006, Vol. 110, Iss. 24, pp. 11780–11795. DOI: 10.1021/jp0611018
7. Munetoh S., Motooka T., Moriguchi K., Shintani A. Interatomic Potential for Si–O Systems using Tersoff Parameterization. *Computational Materials Science*, 2007, Vol. 39, Iss. 2, pp. 334–339. DOI: 10.1016/j.commatsci.2006.06.010
8. Vashishta P., Kalia R.K., Rino J.P., Ebbsjö I. Interaction Potential for SiO<sub>2</sub>: A Molecular-Dynamics Study of Structural Correlations. *Physical Review B*, 1990, Vol. 41, Iss. 17, pp. 12197–12209. DOI:10.1103/physrevb.41.12197
9. Takada A., Richet P., Catlow C.R.A., Price G.D. Molecular Dynamics Simulations of Vitreous silica structures // *J. Non-Cryst. Sol.* – 2004. – Vol. 345–346. – pp. 224–229.
10. Guillot B., Sator N. A Computer Simulation Study of Natural Silicate Melts. Part I: Low Pressure Properties. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2007, Vol. 71, Iss. 5, pp. 1249–1265. DOI:10.1016/j.gca.2006.11.015
11. Brückner R. Properties and Structure of Vitreous Silica. *I. Journal of Non-Crystalline Solids*, 1970, Vol. 5, Iss. 2, pp. 123–175. DOI:10.1016/0022-3093(70)90190-0

12. Tyagel'skii P.V., Stankus S.V. The Thermal Properties of Quartz Glass in the Temperature Range of 1200 to 2375 K. *High Temperature*, 1996, Vol. 34, no. 2, pp. 327–329.

13. Shi Y., Ma D., Song A.P., Wheaton B., Bauchy M., Elliott S.R. Structural Evolution of Fused Silica Below the Glass-Transition Temperature Revealed by In-Situ Neutron Total Scattering. *J. Non Cryst. Solids*, 2019, Vol. 528, 119760, <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2019.119760>

14. Oishi J., Kimura T. Thermal Expansion of Fused Quartz. *Metrologia*, 1969, Vol. 5, no. 2, pp. 50–55. DOI: 10.1088/0026-1394/5/2/004

*Received October 9, 2022*

### Information about the authors

Chernovol Pavel Ivanovich is a 4th-year student of the specialty “Electronics and Nanoelectronics”, Department of Physics of Nanoscale Systems, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

Mirzoev Alexander Aminulaevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Senior Staff Scientist, Professor Physics of Nanoscale System Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1527-371X>, e-mail: [mirzoevaa@susu.ru](mailto:mirzoevaa@susu.ru)

# Персоналии

## КОВАЛЕВ ЮРИЙ МИХАЙЛОВИЧ – К 70-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ

16 ноября 2022 года исполнится 70 лет Юрию Михайловичу Ковалеву.

Ю.М. Ковалев – доктор физико-математических наук, профессор, член Российского Национального комитета по теоретической и прикладной механике – специалист в области математического моделирования распространения ударных и детонационных волн, возникающих в многокомпонентных и многофазных средах в результате горения и взрыва [1–8], построения уравнений состояния твердых энергетических [9–15] и конструкционных материалов [16, 17].

Ю.М. Ковалев внес большой вклад в развитие математических моделей для описания физики быстропротекающих процессов в энергетических материалах (ЭМ), особенно в теорию построения полуэмпирических уравнений состояния молекулярных кристаллов нитросоединений, которыми являются твердые ЭМ. Достаточно эффективным оказалось предположение о возможности разделения частот нормальных колебаний молекул на низкочастотную и высокочастотную составляющие, а также, применение для низкочастотной составляющей свободной энергии модели Дебая, а для высокочастотной – модели Эйнштейна, что позволяет построить уравнения состояния для ряда твердых ЭМ, хорошо воспроизводящие известные экспериментальные данные.

В течение длительного периода времени научные интересы Ю.М. Ковалева были связаны с задачами математического моделирования распространения ударных волн, возникающих при взрыве конденсированных ЭМ, в гетерогенных и многокомпонентных средах и взаимодействия их с фронтом лесного верхового пожара [18–22]. Разработанные математические модели позволили понять причину эффекта возможного усиления ударных волн при взаимодействии с фронтом пожара.

Результаты научной деятельности получили свое отражение в его диссертациях: на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук (1988, г. Томск), на соискание ученой степени доктора физико-математических наук (1995, г. Снежинск).

Научные интересы Ю.М. Ковалева представлены в более чем 150 научных публикациях, 8 диссертациях его учеников на соискание ученой степени кандидата наук, в более чем 100 научно-технических отчетах по грантам и контрактам с РФФИ, МНТЦ, РФЯЦ-ВНИИТФ, ОАО «ГРЦ Макеева» и других.

В 2009-м году в ЮУрГУ была открыта кафедра вычислительной механики сплошных сред, которую организовал и возглавил Ю.М. Ковалев. На кафедре вычислительной механики основная нагрузка в подготовке специалистов по направлению «Механика и математическое моделирование» лежит на учениках Юрия Михайловича: Е.С. Шестаковской, возглавляющей в настоящее время кафедру, Н.Л. Клиначевой и целой группе молодых и перспективных аспирантов.

В настоящее время Ю.М. Ковалев является заведующим научно-исследовательской лабораторией «Математическое моделирование быстропротекающих процессов в многофазных и многокомпонентных средах» ЮУрГУ, руководителем магистерской программы «Физическая и химическая механика сплошных сред», в рамках которой ведется целевая подготовка специалистов



для РФЯЦ-ВНИИТФ. Более тридцати специалистов, подготовленных Юрием Михайловичем в сотрудничестве с РФЯЦ-ВНИИТФ работают в различных отделениях института, занимают должности начальников лабораторий, отделов, заместителей начальника отделения.

Ю.М. Ковалев является членом редакционной коллегии журнала Вестник Южно-Уральского университета, серия «Математика. Механика. Физика».

Ю.М. Ковалев награжден знаком «Почетный работник высшего профессионального образования», медалью «300 лет Российскому флоту», медалью «Столетие подводных сил России», за работы в области ракетно-космической техники был награжден медалями Российской Федерации космонавтики имени академика В.П. Макеева, имени В.И. Кузнецова, имени В.П. Бармина, Знаком «С.П. Королева» Российского аэрокосмического агентства, знаком «За вклад в развитие атомной отрасли».

Желаем Юрию Михайловичу крепкого здоровья, новых ярких творческих свершений и успешных учеников, реализации масштабных планов по развитию научно-исследовательской лаборатории и кафедры вычислительной механики.

Коллектив кафедры Вычислительной механики, коллеги, редакционный совет журнала Вестника ЮУрГУ серии «Математика. Механика. Физика», желают Юрию Михайловичу крепкого здоровья, новых ярких творческих свершений, талантливых учеников, реализации масштабных планов по развитию научно-исследовательской лаборатории «Математическое моделирование быстропротекающих процессов в многофазных и многокомпонентных средах».

**Е.С. Шестаковская**

### Литература

1. Ковалев, Ю.М. Анализ инвариантности относительно преобразования Галилея некоторых математических моделей многокомпонентных сред / Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 27 (286). – С. 69–73.

2. Ковалев, Ю.М. Математический анализ уравнений сохранения двухфазных смесей / Ю.М. Ковалев, Е.А. Ковалева // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2014. – Т. 7, № 2. – С. 29–37.

3. Ковалев, Ю.М. Анализ инвариантности некоторых математических моделей многокомпонентных сред / Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – № 11. – С. 4–7.

4. Клиначева, Н.Л. Модифицированная математическая модель «замороженной» газозвеси / Н.Л. Клиначева, Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Инженерно-физический журнал. – 2014. – Т. 87, № 6. – С. 1398–1403.

5. Ковалев, Ю.М. Математическая модель газозвеси с химическими превращениями в приближении парных взаимодействий / Ю.М. Ковалев, Е.Е. Пигасов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2014. – Т. 7, № 3. – С. 40–49.

6. Рябинин, В.К. Математическое моделирование адиабатического периода индукции для метан-кислородных смесей в широком диапазоне начальных давлений и температур / В.К. Рябинин, Ю.М. Ковалев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 56–71.

7. Пигасов, Е.Е. Математическое моделирование адиабатического теплового взрыва для реакции окисления водорода / Е.Е. Пигасов, В.К. Рябинин, Ю.М. Ковалев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6, № 3. – С. 130–135.

8. Ковалев, Ю.М. Равновесная математическая модель многокомпонентных гетерогенных сред / Ю.М. Ковалев, Ф.Г. Магазов, Е.С. Шестаковская // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2018. – Т. 10, № 4. – С. 49–57.

9. Ковалев, Ю.М. Уравнения состояния и температуры ударного сжатия кристаллических ВВ / Ю.М. Ковалев // Физика горения и взрыва. – 1984. – Т. 20, № 2. – С. 102–107.

10. Ковалев, Ю.М. Определение вида коэффициента Грюнайзена для молекулярных кристаллов / Ю.М. Ковалев // Доклады Академии наук. – 2005. – Т. 403, № 4. – С. 475–477.

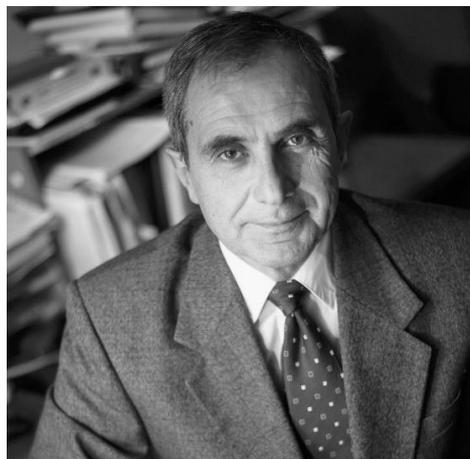
## Персоналии

---

11. Ковалев, Ю.М. Математическое моделирование тепловой составляющей уравнения состояния молекулярных кристаллов / Ю.М. Ковалев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 34–42.
12. Ковалев, Ю.М. Определение температурной зависимости изобарического коэффициента объемного расширения для некоторых молекулярных кристаллов нитросоединений / Ю.М. Ковалев // Инженерно-физический журнал. – 2018. – Т. 91, № 6. – С. 1653–1663.
13. Ковалев, Ю.М. Определение температурной зависимости теплоемкости для некоторых молекулярных кристаллов нитросоединений / Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Инженерно-физический журнал. – 2018. – Т. 91, № 2. – С. 297–306.
14. Ковалев, Ю.М. Уравнения состояния для описания изотермического сжатия некоторых молекулярных кристаллов нитросоединений / Ю.М. Ковалев // Инженерно-физический журнал. – 2020. – Т. 93, № 1. – С. 229–239.
15. Уравнение состояния ТАТБ на основе статических и динамических экспериментов / М.А. Бирюкова, Д.В. Петров, А.Ю. Гармашев и др. // Физика горения и взрыва. – 2019. – Т. 55, № 4. – С. 51–59.
16. Влияние структурных неоднородностей углерод-углеродных композиционных материалов тепловой защиты гиперзвуковых летательных аппаратов на разбросы обгарных форм / М.Г. Булыгин, Г.Ф. Костин, Н.Н. Тихонов и др. // Конструкции из композиционных материалов. – 2004. – № 3. – С. 3–15.
17. Ковалев, Ю.М. Уравнение состояния полимерного композита, армированного S2 стекловолокном / Ю.М. Ковалев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2020. – Т. 12, № 3. – С. 48–55.
18. Гришин, А.М. Экспериментальное и теоретическое исследование воздействия взрыва на фронт верхового лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // Физика горения и взрыва. – 1989. – Т. 25, № 6. – С. 72–79.
19. Гришин, А.М. Экспериментальное исследование воздействия взрыва конденсированных ВВ на фронт верхового лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // Доклады Академии наук СССР. – 1989. – Т. 308, № 5. – С. 1074–1078.
20. Моделирование взрыва шнурового заряда в пологе леса при отсутствии пожара / В.А. Антонов, А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев и др. // Физика горения и взрыва. – 1993. – Т. 29, № 4. – С. 115–123.
21. Гришин, А.М. Об усилении ударных волн при их взаимодействии с фронтом лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // Доклады Академии наук СССР. – 1990. – Т. 312, № 1. – С. 50–54.
22. Ковалев, Ю.М. Взаимодействие плоской ударной волны с нагретым слоем газа / Ю.М. Ковалев, А.Ю. Черемохов // Доклады Академии наук. – 1999. – Т. 367, № 6. – С. 769–771.

## МИРЗОЕВ АЛЕКСАНДР АМИНУЛАЕВИЧ – К 70-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ

Доктор физико-математических наук, профессор Мирзоев Александр Аминулаевич родился 18 мая 1952 в городе Душанбе (столица Таджикской ССР, ныне республика Таджикистан) в семье учителей физики и математики, русской дочери сельского священника и иранца, предки которого в конце XIX века переселились в Ашхабад (столица Туркменской ССР) из-за религиозных преследований на родине. Родители Александра Аминуловича встретились в 20-е годы, когда учились в педагогическом институте при Казанском университете, где их наставниками были выдающиеся ученые казанской математической школы, такие как Н.Г. Чеботарёв, П.А. Широков, Н.Н. Парфентьев. Привитые ими любовь к науке и профессии педагога по наследству передалась от родителей к детям, которых в семье было четверо – три брата и сестра. Трое братьев стали профессорами и докторами наук: Рустам – электрохимик, Джалал – металлург, Александр – физик, а сестра, Джемма – инженер-строитель. Семейная тяга к наукам и образованию не закончилась на поколении Александра Аминулаевича, она прослеживается и в детях, и уже во внуках, разъехавшихся по нашей необъятной России и за ее пределы. Таким образом, Александру Аминулаевичу «на роду было написано» стать ученым в области естественных или технических наук. На его решение «кем быть» сильное влияние оказал средний брат, Джалал Аминулович, который в то время (конец 60-х) уже закончил УПИ (УрФУ) и работал в Челябинске в ЧПИ (ЮУрГУ) на кафедре физики металлов и металловедения. Джалал Аминулович сумел очаровать младшего брата рассказами о красоте и могуществе физики, особенно той ее части, которая трактует о свойствах металлов. В 1970 году младший Мирзоев тоже поступает в УПИ, но на физико-технический факультет, привлеченный ореолом, который окружал тогда «секретных физиков» (ядерщиков). Здесь на способного студента обратил внимание талантливый физик-теоретик и педагог – Довгопол Сергей Петрович, который в свое время успел сдать знаменитый «Теоретический минимум» Л.Д. Ландау, но не успел поступить к нему в аспирантуру из-за трагедии (автомобильная катастрофа), случившейся с нобелевским лауреатом. Областью интересов С.П. Довгопола была теория жидких металлов, находившаяся тогда в зачаточном состоянии по сравнению с теорией тех же металлов, но в твердых кристаллических фазах. Изучение жидких металлов представляет большой интерес как с фундаментальной точки зрения (как топологически неупорядоченных систем), так и в связи с их широким использованием в металлургии и других отраслях промышленности. В Свердловске в то время уже сложилась мощная школа физико-химиков, занимавшаяся жидкими металлами и процессами с их участием, состоящая в основном из ученых УПИ (во главе с академиком П.В. Гельдом) и Института металлургии УрО РАН (во главе с академиком Н.А. Ватолиным). Был накоплен огромный массив опытных данных, который требовал истолкования на достигнутом тогда уровне физической теории (квантовой и статистической механики многочастичных систем). Первым объектом для исследований Александра Аминулаевича стали магнитные свойства металлических расплавов. Ему пришлось освоить квантовую теорию магнетизма, модельные подходы Андерсона и Хаббарда, которые были использованы в его дипломном проекте для описания магнитных свойств переходных металлов. После окончания физтеха в 1975 г. А.А. Мирзоев работал под руководством С.П. Довгопола инженером в лаборатории магнитных свойств расплавов на кафедре физики УПИ, возглавляемой П.В. Гельдом, а затем младшим научным сотрудником в группе С.П. Довгопола на кафедре теоретической физики Физтеха УПИ. Направление исследований оставалось прежним – магнитные свойства расплавов 3d-металлов. Чтобы описывать расплавы, системы со структурным беспорядком, необходимо было скорректировать модели, разработанные ранее для кристаллов. Приемлемые результаты удалось получить, используя приближение когерентного потенциала. Для этого пришлось перейти от аналитических расчетов к численным и освоить программирование и работу на ЭВМ (Фортран и ЕС-1020, соответствен-



## Персоналии

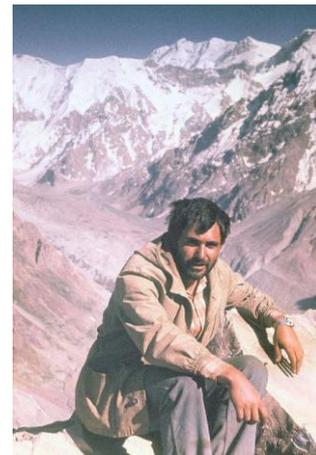
но). Начиная с этого момента компьютерные методы стали одним из главных инструментов в последующих исследованиях Александра Аминулаевича.

В 1982 г. А.А. Мирзоев защитил кандидатскую диссертацию на тему «Электронная структура и магнитные свойства неупорядоченных 3d-металлов». К этому моменту в Свердловске уже сложилось сообщество исследователей, активно использующих и развивающих методы компьютерного моделирования материалов. Такие научные группы образовались как в институтах УрО РАН (ИФМ, ИМет, ИХТТ), так и в вузах (УПИ, УрГУ). Они тесно взаимодействовали друг с другом в освоении новых идей и методов, что весьма способствовало развитию этого направления. Казалось бы, для Александра Аминулаевича создались все условия для продолжения начатых исследований, однако по семейным обстоятельствам он должен был вернуться в Душанбе, где стал работать на физфаке Таджикского госуниверситета.

Ему пришлось сменить направление исследований и заняться изучением старения полимеров под воздействием интенсивного солнечного излучения, благо в горах Памира, где проводились эксперименты, этого излучения предостаточно. В 1986 г. для повышения квалификации в новой научной области А.А. Мирзоев был отправлен на годичную стажировку в Прагу, в Карлов университет, где впервые познакомился с зарубежным опытом исследований и подготовки кадров. В конце 1991 года в Таджикистане началась гражданская война, исследования прекратились и снова надо было менять место проживания и работу. Таковые нашлись в Челябинске, куда Александр Аминулович переехал в 1993 году, хотя в то время здесь положение было тоже непростое (как и в России в целом), но благодаря помощи ректора ЮУрГУ, Германа Платоновича Вяткина, все проблемы удалось решить, и А.А. Мирзоев оказался на кафедре общей и теоретической физики (ОТФ).

Здесь под руководством Г.П. Вяткина с середины 70-х были развернуты обширные исследования в области высокотемпературных расплавов, в том числе и металлических. В возникшей научной школе были подготовлены более десятка докторов и в большем числе кандидатов наук. Исследования жидкометаллического состояния возглавляли Б.Р. Гельчинский, В.П. Бескачко, Т.П. Привалова, В.М. Березин. Первые двое в свое время учились и работали в Екатеринбурге и принадлежали тому сообществу, о котором говорилось выше, так что Александр Аминулаевич в научном плане оказался во вполне привычном окружении и сразу взялся за дело. В 90-е годы ему удалось поднять на новый уровень методы моделирования материалов, «локализовав» в ЮУрГУ классический метод Монте-Карло (вдобавок к имевшемуся методу молекулярной динамики), и ряд квантовых методов – рекурсии, линейных маффин-тин орбиталей (LMTO), функционала электронной плотности, DFT (вдобавок к имевшимся методам псевдопотенциала). В 2002 году по инициативе Б.Р. Гельчинского на кафедре появился первый на Южном Урале «суперкомпьютер» - 8-процессорный кластер, МВС-1000, отец семейства суперкомпьютеров ЮУрГУ. А.А. Мирзоев и его ученики были в числе первых, кто освоил технологию параллельных вычислений и имплементировал в нее имеющееся программное обеспечение по моделированию материалов. Кафедра приобрела компетенции, позволившие ей следующие 20 лет конкурировать с другими мировыми научными группами в упомянутой области.

На новом месте А.А. Мирзоев продолжил исследования свойств неупорядоченных металлических систем, начатые в Свердловске. Его целью стала разработка общего метода описания атомной структуры таких систем и прогноза их макроскопических свойств, метода, не содержащего подгоночных параметров, и потому пригодного для предсказания поведения исследуемого материала во всем диапазоне его существования. Такие методы, исходящие из первых физических принципов – принципов квантовой механики – существовали, но их применение ограничивалось рассмотрением кристаллических твердых тел и низких температур, когда неподъемная с вычислительной точки зрения задача расчета свойств макроскопического тела может быть сведена к доступной задаче об одной элементарной ячейке этого тела благодаря присутствию в кристалле трансляционной симметрии. В расплавах, однако, такие симметрии отсутствуют, и поэтому результаты квантовомеханических расчетов, сделанные для небольшого фрагмента структуры, должны быть усреднены по статистическому ансамблю таких фрагментов, что вновь делает



задачу вычислительно необозримой. Подход, предложенный А.А. Мирзоевым, заключался в том, чтобы сократить число рассчитываемых конфигураций, рассмотрев только те из них, что обладают наибольшим статистическим весом. Проблема свелась к тому, чтобы выделить такое семейство конфигураций. Для этого была предложена вычислительная процедура, состоящая из двух этапов: 1) реконструкция геометрической модели расплава методом обратного Монте-Карло с использованием данных дифракционных экспериментов, 2) разбиение полученной модели на многогранники Вороного, статистический анализ их параметров, определение наиболее вероятных атомных конфигураций и создание геометрической модели структуры в расчетной ячейке для последующих квантовомеханических расчетов методами рекурсии и ЛМТО. Этот подход, изначально разработанный для однокомпонентных расплавов, был обобщен и на случай бинарных сплавов. С его помощью удалось исследовать ряд актуальных задач физики жидкометаллического состояния, таких как переход металл–неметалл в жидком цезии в области околоскритических температур и изменения в ближнем порядке и электронной структуре «компаундобразующих» расплавов при изменении их состава.

Исследования А.А. Мирзоева в области физики неупорядоченных систем были систематизированы и обобщены в его докторской диссертации «Моделирование атомной и электронной структуры топологически неупорядоченных систем в методе сильной связи», успешно защищенной в 1999 г.

После защиты диссертации у Александра Аминулаевича появилась возможность осмотреться в бурном потоке исследований конденсированного состояния вещества, наметить новые цели и поставить новые задачи. В принципе, этот процесс не быстрый и сопряжен со многими рисками. Однако Александру Аминулаевичу долго раздумывать не пришлось, поскольку он сразу попал на передний край в другое направление исследований – физику металлов и металловедение, направление, где одним из ведущих специалистов является его брат, Мирзоев Джалал Аминулович. У Джалала Аминуловича накопилось много вопросов, которые можно было попытаться разрешить с помощью моделирования из первых принципов. Среди них вопрос о том, как взаимодействуют атомы примеси с атомами матрицы в сплавах и что происходит, когда характер этого взаимодействия меняется. Например, сплав Fe-Cr при содержании Cr более 12 ат. % становится нержавеющей (нержавеющая сталь). Считалось, что при таких составах взаимодействие между атомами Fe и Cr соответствует отталкиванию и поэтому интегральная характеристика взаимодействия – энергия смещения – должна быть положительна. Однако расчеты дали прямо противоположный результат – энергия смещения отрицательна, атомы хрома и железа притягиваются и стремятся теснее перемешаться друг с другом. Если же содержание Cr взять ниже «нержавеющего предела», энергия смещения оказывается положительной, разноименные атомы теперь отталкиваются и стремятся обособиться друг от друга. Таким образом, существование упомянутого предела связано с изменением характера взаимодействия атомов примеси (Cr) с атомами матрицы (Fe). Подобные же результаты были получены и для других сплавов переходных металлов на основе железа Fe-Mn и Fe-Ni. За этот цикл работ Мирзаеву Д.А. и Мирзаеву А.А. присуждена премия академической издательской компании «Наука/Интерпериодика» в номинации «Физика» за 2008 год.

Предметом следующего цикла работ стала проблема водородного охрупчивания конструкционных сталей. Водород попадает в сталь в процессе ее выплавки и, концентрируясь вблизи дефектов разного рода, инициирует образование в готовом металле пустот и трещин, грозящих разрушением металлоизделий. Компьютерное моделирование позволило выявить механизмы агрегации водорода и наметить пути их подавления путем легирования металла примесями и образования дефектов, способных захватывать и удерживать водород. Компьютерное моделирование также позволило продвинуться в понимании механизмов мартенситного превращения в сталях.

Александр Аминулаевич Мирзоев является автором 232 работ, опубликованных в российской и зарубежной печати, в изданиях, индексируемых в РИНЦ, Scopus и Web of Science, в том числе двух монографий, а также руководителем и исполнителем ряда научных проектов, финансируемых РФФИ и РФФИ. По результатам научных исследований Министерством науки и образования РФ ему присвоено научное звание профессора по специальности «Физика конденсированного состояния».

## Персоналии

---

Профессор А.А. Мирзоев принимает активное участие в подготовке молодых специалистов всех уровней: бакалавров, магистров и аспирантов. Он читает курсы по общей физике, теоретической физике (теоретическая механика, статистическая физика), физике твердого тела и компьютерному моделированию материалов. За время работы в ЮУрГУ под его руководством подготовлено 8 кандидатов физико-математических наук по специальности «Физика конденсированного состояния», часть из которых продолжили работу в ЮУрГУ, часть – в научных учреждениях РФ, а некоторые трудятся за рубежом, в США, Германии и Австрии.

За добросовестный труд, успехи в науке и образовании А.А. Мирзоев награжден почётной грамотой Министерства образования РФ (2006) и удостоен звания «Почётный работник высшего профессионального образования Российской Федерации» (2013).

От всей души поздравляем Александра Аминулаевича Мирзоева со славным юбилеем и желаем ему продолжить начатое с теми же талантом, энтузиазмом и энергией, какие он обнаружил в первой половине своей биографии!

***В.П. Бескачко, А.Г. Воронцов, А.В. Верховых, А.Н. Соболев***

## ТРЕБОВАНИЯ К ПУБЛИКАЦИИ СТАТЬИ

1. Публикуются оригинальные работы, содержащие существенные научные результаты, не опубликованные в других изданиях, прошедшие этап научной экспертизы и соответствующие требованиям к подготовке рукописей.

2. В редколлегию предоставляется электронная (документ MS Word 2003) версия работы объемом не более 6 страниц, экспертное заключение о возможности опубликования работы в открытой печати, сведения об авторах (Ф.И.О., место работы, звание и должность для всех авторов работы), контактная информация ответственного за подготовку рукописи.

3. Структура статьи: УДК, название (не более 12–15 слов), список авторов, аннотация (150–250 слов), список ключевых слов, текст работы, литература (в порядке цитирования, в скобках, если это возможно, дается ссылка на оригинал переводной книги или статьи из журнала, переводящегося на английский язык). После текста работы следует название, расширенная аннотация (реферат статьи) объемом до 1800 знаков с пробелами, список ключевых слов и сведения об авторах на английском языке.

4. Параметры набора. Поля: зеркальные, верхнее – 23, нижнее – 23, внутри – 22, снаружи – 25 мм. Шрифт – Times New Roman 11 pt, масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 пт, межстрочный интервал – одинарный.

5. Формулы. Стиль математический (цифры, функции и текст – прямой шрифт, переменные – курсив), основной шрифт – Times New Roman 11 pt, показатели степени 71 % и 58 %. Выключенные формулы должны быть выровнены по центру.

6. Рисунки все черно-белые. Желательно предоставить рисунки и в виде отдельных файлов.

7. Адрес редакционной коллегии журнала «Вестник ЮУрГУ» серии «Математика. Механика. Физика»:

Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, Институт естественных и точных наук, кафедра математического и компьютерного моделирования, главному редактору профессору Загребиной Софье Александровне. [Prof. Zagrebina Sophiya Aleksandrovna, Mathematical and Computer Modeling Department, SUSU, 76, Lenin prospekt, Chelyabinsk, Russia, 454080].

8. Адрес электронной почты: [mmph@susu.ru](mailto:mmph@susu.ru)

9. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта журнала: см. <http://vestnik.susu.ru/mmph>.

10. Журнал распространяется по подписке. Электронная версия: см. [www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru), <http://vestnik.susu.ru/mmph>, <http://вестник.юургу.рф/mmph>.

11. Плата с аспирантов за публикацию не взимается.

## СВЕДЕНИЯ О ЖУРНАЛЕ

Журнал основан в 2009 году. Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-57362 выдано 24 марта 2014 г. Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Учредитель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет» (национальный исследовательский университет).

Главный редактор журнала – д.ф.-м.н., проф. С.А. Загребина.

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук» по следующим научным специальностям и соответствующим им отраслям науки: 01.01.01 – Вещественный, комплексный и функциональный анализ (физико-математические науки), 01.01.02 – Дифференциальные уравнения, динамические системы и оптимальное управление (физико-математические науки), 01.01.07 – Вычислительная математика (физико-математические науки), 01.01.09 – Дискретная математика и математическая кибернетика (физико-математические науки), 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы (физико-математические науки), 01.04.05 – Оптика (физико-математические науки), 01.04.07 – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Рецензируемые научные издания, входящие в международные реферативные базы данных и системы цитирования и включенные в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук» по следующим отраслям и группам специальностей: 01.01.00 – Математика, 01.02.00 – Механика, 01.04.00 – Физика, 05.13.00 – Информатика, вычислительная техника и управление.

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международных справочных системах по периодическим и продолжающимся изданиям «Ulrich's Periodicals Directory», «Zentralblatt MATH», «Russian Science Citation Index on Web of Science».

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России», E29211 в Интернет-каталоге агентства «Книга-Сервис».

Периодичность выхода – 4 номера в год.

Адрес редакции, издателя: 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76, Издательский центр ЮУрГУ, каб. 32.

ВЕСТНИК  
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО  
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА  
Серия  
«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»  
Том 14, № 4  
2022

16+

Редактор *С.И. Уварова*  
Техн. редактор *А.В. Миних*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 28.10.2022. Дата выхода в свет 03.11.2022.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 9,76.

Тираж 500 экз. Заказ 384/340. Цена свободная.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ.  
454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76.