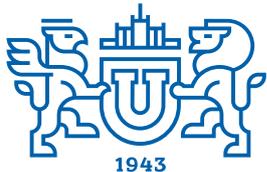


ВЕСТНИК



**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

**2023
Т. 15, № 3**

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 **Гуидетти 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

2023

Vol. 15, no. 3

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

- ВИВЧАРЬ Р.М., ПТУШКИН А.И., СОКОЛОВ Б.В. Методика оценивания адекватности статистических имитационных моделей..... 5
- GONCHAROV N.S., SVIRIDYUK G.A. Analysis of the Stochastic Wentzell System of Fluid Filtration Equations in a Circle and on its Boundary 15
- РЯТКОВ S.G., SOLDATOV O.A. On Some Classes of Inverse Parabolic Problems of Recovering the Thermophysical Parameters..... 23

Механика

- ОКАТЬЕВ Р.С., ФРИК П.Г., КОЛЕСНИЧЕНКО И.В. Течение Гартмана в слое жидкости с пространственно неоднородными свойствами 34
- САПОЖНИКОВ С.Б., БУСЛАЕВА О.С. Расчётно-экспериментальное исследование сжатия после удара (CAI-тест) тканевого композита со сквозным дефектом 43
- ЧУПИН В.В., ЧЕРНОГУБОВ Д.Е. Исследование закритических деформаций пологих сферических панелей постоянной толщины 55

Физика

- ВАВАИЛОВА D.V., ALANTEV K.V., KAPLUN M.V., ANIKINA E.V., NIKONOVA T.Yu. Effects of Basis set Superposition Error on DFT Model of C_2N /Graphene Bilayer..... 62
- БИРЮКОВА М.А., КОВАЛЕВ Ю.М., ПЕТРОВ Д.В., СТАНКЕВИЧ А.В., ШЕСТАКОВ М.А. Определение параметров уравнения состояния молекулярных кристаллов на основе дифрактометрических исследований 70
- БЫЧКОВ И.В., КУЗЬМИН Д.А., ЗАГРЕБИНА М.А. Моделирование возбуждения поверхностных плазмон-поляритонов в прямоугольном нанорезонаторе на основе золота 79
- КУЧАКШОЕВ Д.С., ДЖАБАРОВ А.Г., ХОЛОВ А. Измерение удельной теплоёмкости стёкол на основе $V_2O_3+V_i_2O_3$ в широком интервале температур 89

CONTENTS

Mathematics

- VIVCHAR R.M., PTUSHKIN A.I., SOKOLOV B.V. Methodology For Assessing the Adequacy of Statistical Simulation Models..... 5
- GONCHAROV N.S., SVIRIDYUK G.A. Analysis of the Stochastic Wentzell System of Fluid Filtration Equations in a Circle and on its Boundary 15
- PYATKOV S.G., SOLDATOV O.A. On Some Classes of Inverse Parabolic Problems of Recovering the Thermophysical Parameters..... 23

Mechanics

- OKATEV R.S., FRICK P.G., KOLESNICHENKO I.V. Hartmann Flow in a Fluid Layer with Spatially Inhomogeneous Properties..... 34
- SAPOZHNIKOV S.B., BUSLAEVA O.S. Numerical and Experimental Study of Compression after Impact (CAI-Test) of a Fabric Composite with Open Hole Defects 43
- CHUPIN V.V., CHERNOGUBOV D.E. Studying the Costcritical Deformations of Shutter Spherical Panels of Constant Thickness..... 55

Physics

- BABAILOVA D.V., ALANTEV K.V., KAPLUN M.V., ANIKINA E.V., NIKONOVA T.Yu. Effects of Basis Set Superposition Error on DFT Model of C₂N/Graphene Bilayer 62
- BIRYUKOVA M.A., KOVALEV Yu.M., PETROV D.V., STANKEVICH A.V., SHESTAKOV M.A. Determining the Parameters of the Equation of the State of Molecular Crystals based on Diffractometric Studies 70
- BYCHKOV I.V., KUZMIN D.A., ZAGREBINA M.A. The Modeling of Surface Plasmon Polaritons Excitation in a Rectangular Gold-Based Nanoresonator 79
- KUCHAKSHOEV D.S., DZHABAROV A.G., KHOLOV A. Measuring the Specific Heat Capacity of Glass Based on 2B₂O₃+Bi₂O₃ in a Wide Temperature Interval..... 89

МЕТОДИКА ОЦЕНИВАНИЯ АДЕКВАТНОСТИ СТАТИСТИЧЕСКИХ ИМИТАЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ

Р.М. Вивчарь¹, А.И. Птушкин¹, Б.В. Соколов²

¹ Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация

² Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Санкт-Петербургский Федеральный исследовательский центр Российской академии наук», г. Санкт-Петербург, Российская Федерация

E-mail: sokolov_boris@inbox.ru; vka@mil.ru

Аннотация. Объектом исследования в данной работе являлись статистические имитационные модели сложных технических систем, характеризуемых несколькими показателями эффективности их функционирования. От качества названных моделей зависит эффективность процесса получения знаний об исследуемых системах. Одним из основных свойств, характеризующих качество любой модели, является ее адекватность – комплексное свойство модели, характеризующее степень соответствия значений выходных параметров модели и объекта с требуемой точностью при требуемой достоверности. Применяемые в настоящее время подходы к оцениванию адекватности таких моделей основаны на использовании разнообразных субъективных сверток показателей достоверности результатов исследований к некоему обобщенному показателю, сущность которого, как правило, не интерпретируется. Представленная в статье методика оценивания адекватности статистических имитационных моделей сложных технических систем, характеризуемых несколькими показателями эффективности их функционирования, отличается от известных методик использованием в качестве обобщенного показателя адекватности – вероятности достижения выполнения с требуемой достоверностью всех требований по точности определения каждого из рассматриваемых показателей эффективности. Этот показатель является естественным однозначно интерпретируемым (вероятность выполнения требований к адекватности модели) объективным обобщенным показателем адекватности исследуемой имитационной модели. Для его вычисления предварительно с использованием метода Парзена–Розенблатта получается плотность вероятности расстояний между реальными и модельными показателями эффективности исследуемой системы, а затем требуемый результат получается с помощью предложенного алгоритма кратного интегрирования этой плотности с использованием метода Монте-Карло. Даны рекомендации по реализации предусмотренных методикой вычислительных процедур. Применение методики иллюстрируется описанием вычислительного эксперимента.

Ключевые слова: имитационное моделирование; точность; достоверность; адекватность модели; сложная техническая система.

Введение

Одним из основных способов получения знаний о сложных технических системах (СТС) является моделирование процесса их функционирования. Разнородность составных элементов СТС и разнообразие связей между ними, нелинейность различных свойств этих элементов обуславливают целесообразность применения для исследования таких систем имитационного моделирования (ИМ), выходными результатами которого являются два и более показателей, отражающих эти свойства.

Эффективность процесса получения знаний об исследуемой СТС зависит от качества ИМ, под которым понимается совокупность свойств, характеризующих их способность выполнять заданные функции. Одним из основных свойств модели, которое характеризует возможность по-

лучения с ее помощью достоверных и точных данных об исследуемой СТС, является адекватность. Адекватность ИМ – это комплексное свойство модели, характеризующее степень соответствия значений выходных параметров модели и объекта с требуемой точностью при требуемой достоверности [1].

Если подходы к определению количественной оценки адекватности ИМ с одним показателем эффективности их функционирования хорошо известны [1–3], то подходы к оцениванию адекватности ИМ с большим количеством таких показателей по-прежнему требуют дополнительного исследования этого вопроса.

Анализ подходов к оцениванию адекватности имитационных моделей

Одним из наиболее распространенных подходов к оцениванию адекватности ИМ является подход, представленный в [1, 2] и заключающийся в оценивании меры близости r результатов, полученных при моделировании (M), и результатов, полученных на основе обработки статистических данных, в которых содержатся сведения об исследуемом объекте (Ob):

$$r_k(Ob, M) = |w_k^{Ob} - w_k^M|, k = \overline{1, K}, \quad (1)$$

где w_k^{Ob} – значение показателя k -го свойства СТС, полученное из статистических данных; w_k^M – значение показателя k -го свойства СТС, полученное в результате ИМ ее функционирования; K – количество свойств, характеризующих СТС.

В качестве меры адекватности имитационной модели в этом случае выбирается вероятность

$$P[r_k(Ob, M) \leq \varepsilon] \geq 1 - \delta, \quad (2)$$

где ε – положительная величина, характеризующая точность модели; $(1 - \delta)$ – положительная величина, характеризующая достоверность модели, которую будем называть доверительной вероятностью и обозначать ее через $\beta = (1 - \delta)$.

В случае если СТС характеризуется только одним свойством, то такой подход является наиболее привлекательным. Однако если СТС характеризуется двумя и более свойствами или какое-либо свойство характеризуется несколькими показателями, то использование указанного подхода обуславливает необходимость для решения задачи оценивания адекватности ее имитационной модели получения свертки вероятностей (2) для каждого свойства СТС или для каждого показателя, характеризующего какое-либо свойство.

Еще один подход к решению задачи оценивания адекватности ИМ связан с использованием в качестве меры близости не расстояния (1), а расстояния между векторами, элементами которых являются значения показателей свойств СТС, полученные из статистических данных \mathbf{w}^{Ob} и при моделировании \mathbf{w}^M .

Для вычисления расстояния между этими векторами могут быть применены различные виды метрик, такие как метрики Евклида, косинусное расстояние, Чебышева, Хэмминга, Ли и др [4], что также привносит элемент субъективизма.

Как видим, оба рассмотренных подхода характеризуются высокой долей субъективизма в процессе оценивания адекватности ИМ. Приведённые обстоятельства обуславливают необходимость совершенствования научно-методического аппарата оценивания адекватности ИМ.

Целью данной статьи является представление методики объективного оценивания адекватности стохастических ИМ СТС.

Описание методики оценивания адекватности статистических имитационных моделей

В основе данной методики лежит представление выходных показателей модели в виде системы случайных величин (СВ). Тогда в качестве меры адекватности ИМ может быть использована вероятность

$$P[r_1(w_1^{Ob}, w_1^M) \leq \varepsilon_1, \dots, r_k(w_k^{Ob}, w_k^M) \leq \varepsilon_k, \dots, r_K(w_K^{Ob}, w_K^M) \leq \varepsilon_K] = \int_0^{\varepsilon_1} \dots \int_0^{\varepsilon_K} f(r_1, r_2, \dots, r_K) dr_K \dots dr_1, \quad (3)$$

где $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_K$ – положительные величины, характеризующие точность модели по каждому показателю; $f(r_1, r_2, \dots, r_K)$ – плотность вероятности расстояний между значениями показателей свойств СТС, полученными из статистических данных и в результате моделирования.

При этом модель будет считаться адекватной, если будет выполняться условие

$$P[r_1(w_1^{Ob}, w_1^M) \leq \varepsilon_1, \dots, r_k(w_k^{Ob}, w_k^M) \leq \varepsilon_k, \dots, r_K(w_K^{Ob}, w_K^M) \leq \varepsilon_K] \geq \beta. \quad (4)$$

Предлагаемое авторами статьи использование в качестве меры адекватности ИМ вероятности (3), характеризующей вероятность достижения требований по точности каждого из рассматриваемых показателей, которая, по сути, является однозначно интерпретируемым объективным обобщенным показателем адекватности ИМ, позволяет избавиться от субъективизма при решении подобных задач оценивания, а также сохранить общепринятый физический смысл переменных ε, β .

Обобщенная структурная схема методики, включающей в себя семь основных этапов, представлена на рис. 1.

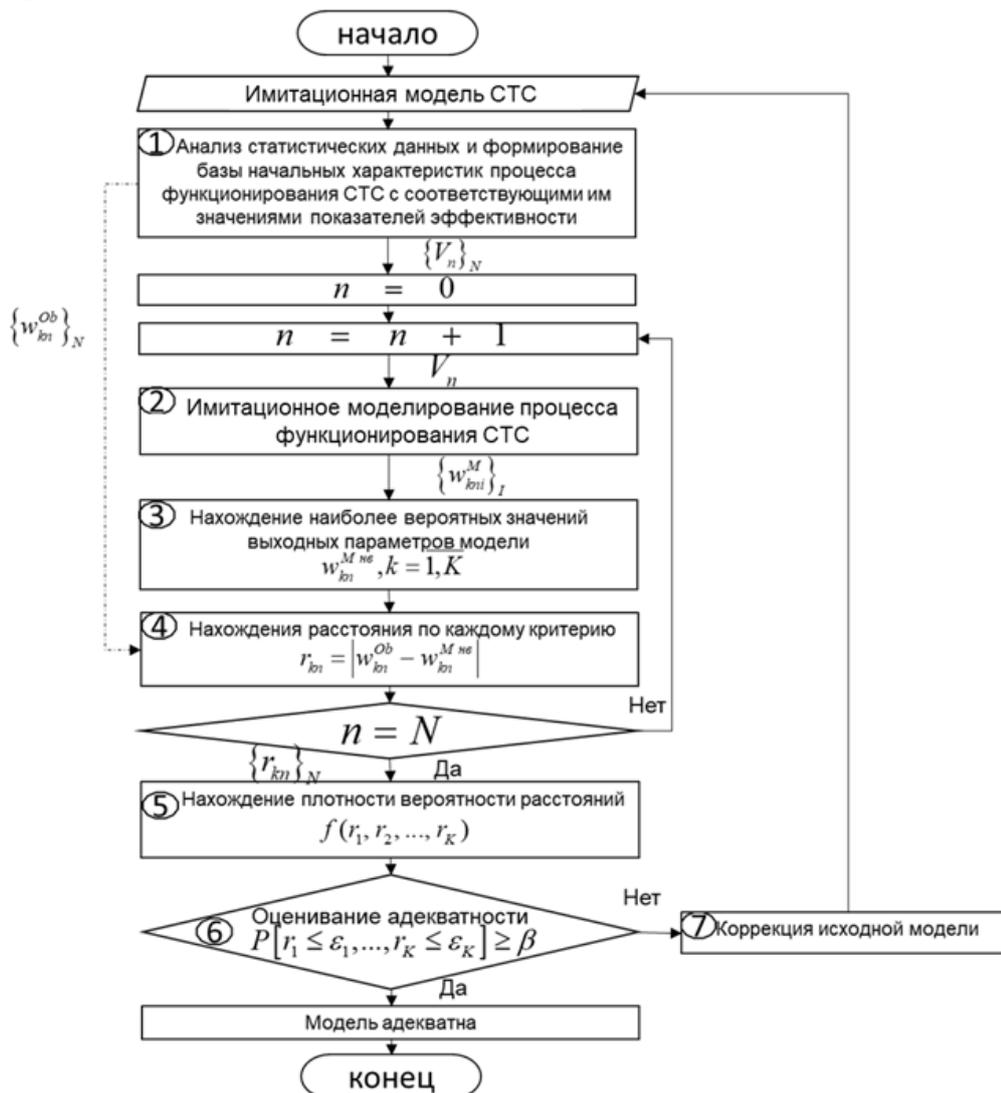


Рис. 1. Структурная схема методики оценивания адекватности ИМ

В качестве исходных данных для представленной методики используются данные, на основе которых синтезирована ИМ исследуемой системы, подлежащая оцениванию.

Рассмотрим более подробно содержание предлагаемой методики. На *первом этапе* необходимо осуществить ретроспективный анализ процесса функционирования реальной СТС, модель функционирования которой подлежит оцениванию с позиции ее адекватности. В результате такого анализа формируется база данных, содержащая сведения о начальных параметрах процесса функционирования СТС и наблюдаемых (измеренных) значениях показателей эффективности исследуемого процесса. Содержание такой базы данных может быть представлено в виде табл. 1.

Результаты ретроспективного анализа процесса функционирования реальной СТС

№ наблюдения	Множество начальных параметров (исходных данных) процесса функционирования СТС	Показатели эффективности процесса функционирования СТС
1	V_1	$w_{k1}^{Ob}, k = \overline{1, K}$
\vdots	\vdots	\vdots
n	V_n	$w_{kn}^{Ob}, k = \overline{1, K}$
\vdots	\vdots	\vdots
N	V_N	$w_{kN}^{Ob}, k = \overline{1, K}$

Начальные параметры процесса функционирования СТС, заданные вектором V_n , будут в последующем использоваться в качестве входных параметров ИМ этого процесса. Поскольку на пятом этапе методики предполагается расчет плотности вероятности расстояний r_k , точность определения которой зависит от объема выборки этих расстояний, то целесообразно на первом этапе получить как можно большее количество наблюдений N .

Второй, третий и четвертый этапы методики связаны с проведением серии из I вычислительных экспериментов с ИМ с соответствующими значениями входных параметров V_n , нахождением по результатам моделирования наиболее вероятных значений всех рассматриваемых показателей эффективности функционирования $w_{kn}^{M\text{не}}, k = \overline{1, K}$ и получением N выборок расстояний $\{r_{kn}\}$.

Количество прогонов ИМ в каждом эксперименте необходимо определять, исходя из требуемого значения доверительной вероятности к результатам моделирования [5].

Необходимость использования для определения расстояний r_{kn} наиболее вероятных значений показателей, полученных в результате моделирования, обусловлена тем, что рассчитать средние значения показателей эффективности процесса функционирования реальной СТС для конкретного варианта начальных параметров этого процесса в большинстве случаев не представляется возможным вследствие малого количества наблюдений с одними и теми же начальными параметрами процесса. Поэтому, на наш взгляд, целесообразно использовать в качестве r_{kn} расстояние между случайными значениями показателей эффективности функционирования реальной СТС и наиболее вероятными их значениями, полученными в результате ИМ при одних и тех же исходных данных:

$$r_{kn} = |w_{kn}^{Ob} - w_{kn}^{M\text{не}}|, k = \overline{1, K}. \tag{5}$$

Для определения $w_{kn}^{M\text{не}}$ необходимо по результатам ИМ получить плотности вероятности $f_{kn}(w_{kn}^M)$. Значения w_{kn}^M , соответствующие максимальным значениям плотности вероятности, и есть наиболее вероятные значения каждого рассматриваемого показателя эффективности функционирования СТС. Для получения плотности вероятности можно использовать любой метод восстановления плотности вероятности по выборочным данным, например, метод ядерной оценки.

Последовательное выполнение основных этапов предлагаемой методики (с первого по четвертый этапы) позволит получить выборку расстояний $\{r_{kn}\}_N$, представляющую собой систему K случайных величин, полученную в результате проведения N экспериментов. Данная выборка представляет собой исходные данные **для пятого этапа методики**, целью которого является получение плотности вероятности системы случайных величин $f(r_1, r_2, \dots, r_K)$.

В случае независимости отдельных СВ r_k , входящих в рассматриваемую систему СВ, плотность вероятности может быть получена как

$$f(r_1, r_2, \dots, r_K) = \prod_{k=1}^K f_k(r_k). \tag{6}$$

Однако использование выражения (6) возможно только после подтверждения гипотезы о независимости отдельных случайных величин, что в случае $K > 2$ связано с существенными вычислительными сложностями [6]. Поэтому целесообразно определять плотность вероятности $f(r_1, r_2, \dots, r_K)$ без предварительного определения факта зависимости или независимости случайных величин. Это может быть сделано с помощью метода восстановления плотности вероятности Парзена–Розенблатта [7–10]. При использовании этого метода в данном исследовании плотность вероятности $f(r_1, r_2, \dots, r_K)$ определялась согласно [11] по формуле

$$f(r_1, \dots, r_k, \dots, r_K) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \prod_{k=1}^K \frac{1}{h_k} Y\left(\frac{r_k - r_{kn}}{h_k}\right), \quad (7)$$

где r_{kn} – реализация k -го расстояния в n -м опыте; h_k – ширина пропуска k -го расстояния;

$$Y\left(\frac{r_k - r_{kn}}{h_k}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r_k - r_{kn}}{h_k}\right)^2} \text{ – Гауссова ядерная функция.}$$

В работе [7] выражение (7) представлено в несколько другом виде, а именно по K выполняется суммирование, а не перемножение, как в данном случае. Однако, как показало данное исследование, такое выражение может быть использовано только для случая $K \leq 2$.

На шестом этапе предлагаемой методики необходимо путем K -кратного интегрирования полученной плотности оценить вероятность (3) и проверить выполнение условия (4).

Для вычисления кратных интегралов используются различные способы. Так, например, в [7] одно- и двукратное интегрирование осуществляется с помощью встроенных в пакет прикладных программ МАТНЛАВ специализированных функций, а интегрирование более высокого порядка кратности предложено проводить с помощью вложенных интегралов. Однако использование такого способа для сложных подынтегральных функций сопряжено со значительными вычислительными затратами и характеризуется невысокой точностью, особенно для больших порядков кратности.

Проведенные исследования показали, что для определения вероятности (3) в данной работе целесообразно использовать метод численного интегрирования на основе применения метода Монте-Карло.

Сущность метода интегрирования на основе применения метода Монте-Карло заключается в том, что в случайно выбранных точках I -мерного пространства вычисляются значения подынтегральной функции, на основе которых определяется ее среднее значение. Значение интеграла при этом равно произведению среднего значения функции на объем тела, определенного числом этих точек [12].

Рассмотрим схему использования метода Монте-Карло для определения вероятности (3).

Шаг 1. Определение количества экспериментов Q и количества точек J , по которым будет вычисляться интеграл в каждом эксперименте. Чем больше будет количество экспериментов и количество точек в каждом эксперименте, тем точнее будет результат определения вероятности (3). Однако большое количество экспериментов и точек в них может привести к существенному увеличению необходимых вычислительных ресурсов. Поэтому при определении этих параметров необходимо обеспечить требуемые значения показателей точности вычисления. Например, проведенные исследования показали, что для вычисления вероятности (3) для случая $K = 3$ с погрешностью $\Delta = \pm 0,003$ необходимо проведение 10 экспериментов с количеством точек в каждом $J = 10\,000$.

Шаг 2. Для каждого эксперимента проводится генерация J точек с координатами $(x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{Kj})$, принадлежащих K -мерному параллелепипеду, ограниченному пределами интегрирования. Координаты точек рассчитываются согласно выражению (8) [12]

$$x_{kj} = r_k^H + (r_k^G - r_k^H)\xi, \quad (8)$$

где r_k^H, r_k^G – нижняя и верхняя граница интегрирования по r_k расстоянию соответственно; ξ – случайное число, распределенное по равномерному закону в интервале $[0; 1]$.

Так как $r_k^H = 0, r_k^G = \varepsilon_k$, формула (8) преобразуется в

$$x_{kj} = \varepsilon_k \xi. \quad (9)$$

Шаг 3. Вычисление значения функции (7) в каждой точке и определение ее среднего значения

$$f_q^{cp} = \left(\sum_{j=1}^J f(x_{1j}^q, \dots, x_{kj}^q, \dots, x_{Kj}^q) \right) / J. \quad (10)$$

Шаг 4. Нахождение значения интеграла в каждом q -м эксперименте и вычисление значения вероятности (3) по формуле [12]

$$P = \left(\sum_{q=1}^Q (f_q^{cp} \prod_{k=1}^K (r_k^G - r_k^H)) \right) / Q, \quad (11)$$

которая с учетом $r_k^H = 0, r_k^G = \varepsilon_k$ трансформируется в

$$P = \left(\sum_{q=1}^Q (f_q^{cp} \prod_{k=1}^K \varepsilon_k) \right) / Q. \quad (12)$$

Использование изложенного метода позволит с высокой точностью оценить меру адекватности любых ИМ за счет возможности вычисления интеграла любой степени кратности.

Заключительной операцией **шестого этапа методики** является сравнение полученного значения вероятности (3) с требованием по достоверности β . В случае, если условие (4) выполняется, то разработанная модель обеспечивает требуемую степень адекватности. Если условие (4) не выполняется, то исходная ИМ подлежит коррекции (**этап 7 методики**) и процесс оценивания ее адекватности повторяется, начиная с первого этапа.

Представленная методика оценивания адекватности ИМ отличается от известных методик использованием в качестве обобщенного показателя адекватности – вероятности достижения выполнения всех требований по точности определения каждого рассматриваемого показателя эффективности СТС.

Таким образом, в рамках разработанной методики предлагается рассматривать адекватность имитационной модели, как комплексное свойство, характеризующее точность и достоверность исследуемой модели, и позволяющее избавиться от субъективизма при решении задачи многокритериального выбора при сравнении различных вариантов моделей заданной СТС.

Вычислительный эксперимент

Для наглядной иллюстрации представленной методики рассмотрим ИМ функционирования системы эксплуатации (СЭ) ракетно-космического комплекса (РКК) при проведении двух последовательных пусков ракет-носителей и оценим ее адекватность.

Выходными параметрами модели являются: продолжительность подготовки к пуску первой РН – t_{nn}^1 ; продолжительность подготовки к пуску второй РН – t_{nn}^2 ; стоимость функционирования СЭ РКК – C .

Входными параметрами являются параметры системы эксплуатации, заданные множеством V .

Требования к точности и достоверности выходных данных модели следующие:

$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$ ч. – требования к точности определения значений продолжительности подготовки к пуску первой и второй РН соответственно;

$\varepsilon_3 = 20000$ у.е. – требования к точности определения значения стоимости функционирования СЭ РКК;

$\beta = 0,95$ – требования к достоверности выходных параметров модели.

На первом этапе методики предполагается, что в результате ретроспективного анализа процесса функционирования реальной типовой СЭ РКК в течение 20 лет была получена база данных, содержащая сведения о начальных значениях ее параметров и наблюдаемых в последствии показателей эффективности процесса ее функционирования (табл. 2).

Результаты ретроспективного анализа процесса функционирования типовой СЭ РКК

№ наблюдения	Множество параметров СЭ РКК	Показатели эффективности процесса функционирования СЭ РКК		
		t_{nn}^1 , ч.	t_{nn}^2 , ч.	C , у.е.
1	V_1	51,3	52	8760274
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
20	V_{20}	49	61	8730288

На втором и третьем этапах для каждого набора входных параметров $V_n, n = \overline{1, 20}$ была проведена серия из 1000 вычислительных экспериментов с разработанной имитационной моделью, обработка результатов которых позволила получить для каждого n тройку наиболее вероятных модельных значений показателей эффективности функционирования СЭ РКК (рис. 2).

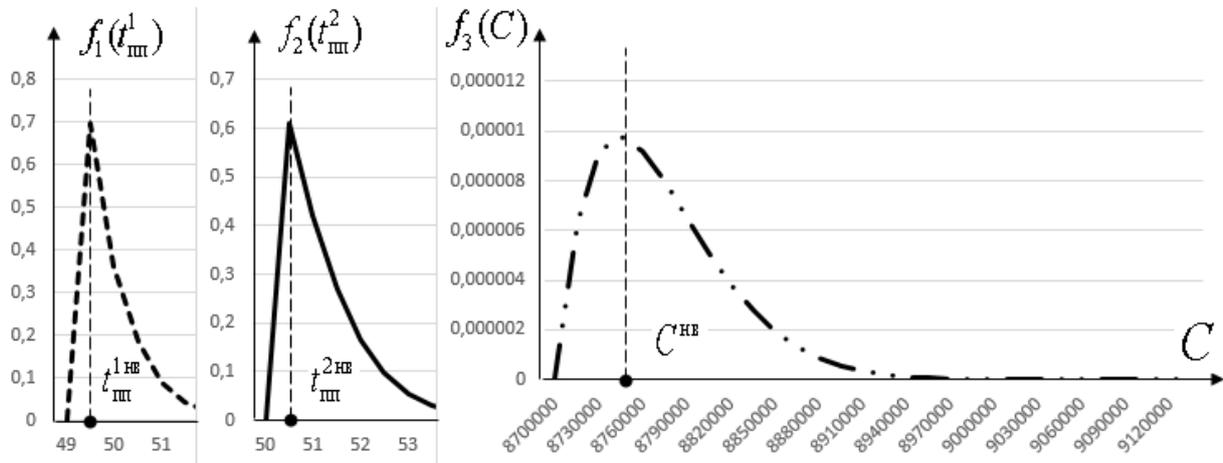


Рис. 2. Плотности вероятности и наиболее вероятные значения продолжительностей подготовки к пуску первой, второй РН и стоимости функционирования СЭ РКК при заданных значениях ее параметров из множества V_1

На четвертом этапе были получены выборки расстояний $\{r_{kn}\}_{20}$, графическая интерпретация которых представлена на рис. 3.

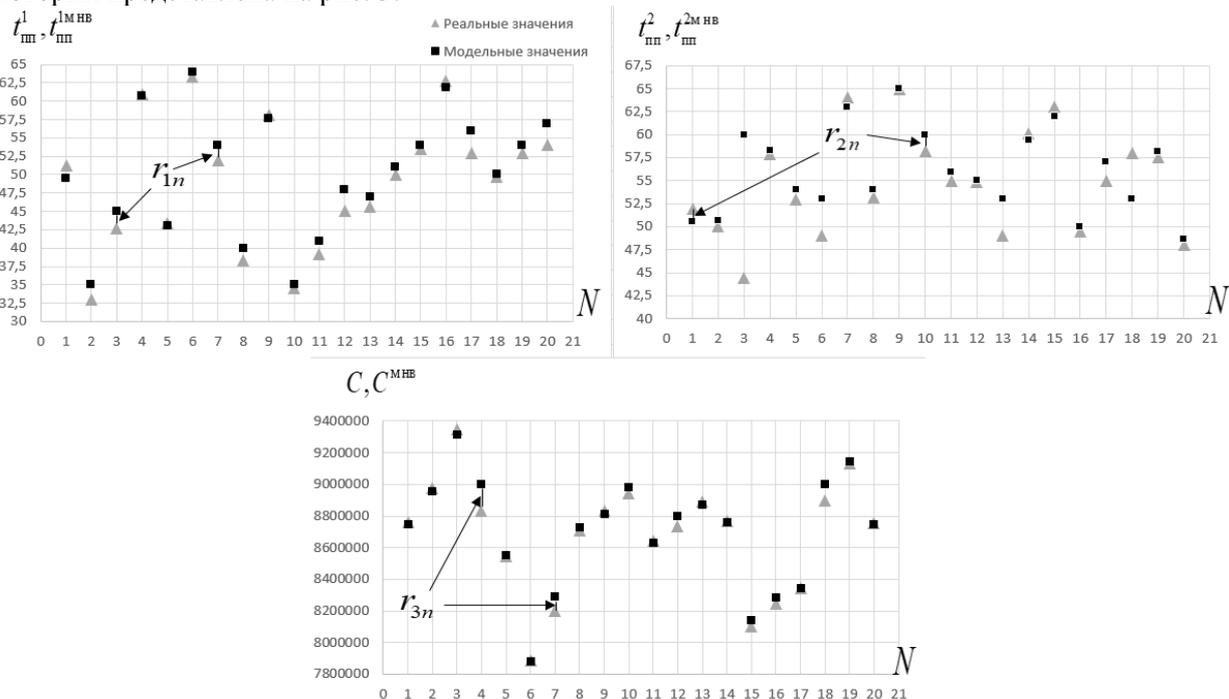


Рис. 3. Графическое описание множеств значений показателей эффективности функционирования реальной типовой СЭ РКК, полученных в результате ретроспективного анализа и вычислительного эксперимента

Далее на пятом этапе методики с помощью метода Парзена–Розенблатта и формулы (7) была рассчитана плотность вероятности $f(r_1, r_2, r_3)$:

$$f(r_1, r_2, r_3) = \frac{1}{20} \sum_{n=1}^{20} \prod_{k=1}^3 \frac{1}{h_k} Y\left(\frac{r_k - r_{kn}}{h_k}\right), \quad (12)$$

в результате трехкратного интегрирования которой по методу Монте-Карло получено значение вероятности удовлетворения требований к точности выполнения всех задач, стоящих перед моделированием

$$P[r_1 \leq \varepsilon_1, r_2 \leq \varepsilon_2, r_3 \leq \varepsilon_3] = 0,96. \quad (13)$$

Поскольку значение вероятности $P > 0,95$, то можно сделать вывод, что разработанная ИМ функционирования СЭ РКК адекватна реальной.

Заключение

Проведенные исследования позволяют сделать следующие выводы.

1. Для всех применяемых в настоящее время методик количественного оценивания адекватности ИМ характерен существенный элемент субъективизма, следствием которого является сохранение неопределённости оценки.

2. Предложенная в работе методика оценивания адекватности ИМ обеспечивает получение комплексной объективной оценки ее адекватности, отвечающей на вопрос: «С какой вероятностью будет обеспечена точность выполнения всех задач, стоящих перед моделированием».

3. Предлагаемая в [7] формула (5) для построения плотности распределения случайных значений показателей качества функционирования СТС может быть применена только, если их количество не больше двух. При большем количестве рассматриваемых показателей необходимо пользоваться формулой (12), рекомендованной в [11].

4. Для выполнения процедур кратного интегрирования, применяемых в предложенной методике для вычисления вероятности выполнения всех требований к обеспечению адекватности ИМ, целесообразно использовать процедуры интегрирования, основанные на использовании метода Монте-Карло.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-19-00767, <https://rscf.ru/project/22-19-00767>)

Литература

1. Микони, С.В. Квалиметрия моделей и полимодельных комплексов: монография / С.В. Микони, Б.В. Соколов, Р.М. Юсупов. – М.: РАН, 2018. – 314 с.

2. Вивчарь, Р.М. Риск-ориентированное управление созданием организационно-технических систем на основе использования имитационных моделей их функционирования / Р.М. Вивчарь, Б.В. Соколов, А.И. Птушкин // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Системный анализ и информационные технологии. – 2021. – № 2. – С. 17–31.

3. Модель системы эксплуатации систем электроснабжения объекта повышенной опасности / А.Н. Степенко, Д.В. Решетников, Е.А. Андреев, А.А. Левчук // Современные наукоемкие технологии. – 2021. – № 11-2. – С. 289–293.

4. Ростовцев, Ю.Г. Проблема обеспечения адекватности субъектно-объектного моделирования / Ю.Г. Ростовцев, Р.М. Юсупов // Известия вузов. Приборостроение. – 1991. – № 7. – С. 7–14.

5. Вентцель, Е.С. Теория вероятностей / Е.С. Вентцель. – М.: Наука, 1969. – 576 с.

6. Смирнов, Н.В. Краткий курс математической статистики для технических приложений / Н.В. Смирнов, И.В. Дунин-Барсковский. – М.: Физматгиз, 1959. – 436 с.

7. Вивчарь, Р.М. Методика многокритериального оценивания эффективности функционирования стохастических сложных технических систем / Р.М. Вивчарь, Б.В. Соколов, А.И. Птушкин // Авиакосмическое приборостроение. – 2022. – № 7. – С. 3–14.

8. Давыдов, В.С. Распознавание зарождающихся дефектов в узлах корабельных механизмов в результате вибродиагностирования на основе оптимальных решающих правил / В.С. Давыдов // Дефектоскопия. – 2019. – № 3. – С. 19–24.

9. Поршневу, С.В. Использование аппроксимации Розенблатта–Парзена для восстановления функции распределения непрерывной случайной величины с ограниченным одномодальным за-

коном распределения / С.В. Поршневу, А.С. Копосову // Научный журнал КубГАУ. – 2013. – № 92(08). – С. 1–27.

10. Parzen, E. On Estimation of a Probability Density Function and Mode / E. Parzen // Ann. Math. Statist. – 1962. – Vol. 33, Iss. 3. – P. 1065–1076.

11. Маркович, Л.А. Гамма-ядерные оценки многомерной плотности и ее частной производной по зависимым данным / Л.А. Маркович // Фундаментальная и прикладная математика. – 2018. – Т. 22, Вып. 3. – С. 145–177.

12. Пармузина, М.С. Вычисление интегралов по методу Монте-Карло / М.С. Пармузина, А.А. Модебейкин, А.А. Суханов // E-SCIO – 2022. – № 6(69). – С. 553–565. <https://e-scio.ru/?p=17881>

Поступила в редакцию 1 июня 2023 г.

Сведения об авторах

Вивчарь Роман Михайлович – кандидат технических наук, преподаватель кафедры Военно-космической академии имени А.Ф. Можайского, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация, e-mail: rvivcar12@gmail.com

Птушкин Анатолий Иванович – кандидат технических наук, профессор, кафедра Военно-космической академии имени А.Ф. Можайского, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация, e-mail: anatoly.ptushkin2011@yandex.ru

Соколов Борис Владимирович – доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник федерального государственного бюджетного учреждения науки «Санкт-Петербургский Федеральный исследовательский центр Российской академии наук», г. Санкт-Петербург, Российская Федерация, e-mail: sokolov_boris@inbox.ru

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2023, vol. 15, no. 3, pp. 5–14*

DOI: 10.14529/mmp230301

METHODOLOGY FOR ASSESSING THE ADEQUACY OF STATISTICAL SIMULATION MODELS

R.M. Vivchar¹, A.I. Ptushkin¹, B.V. Sokolov²

¹ Military Space Academy named after A.F. Mozhaisky, Saint Petersburg, Russian Federation

² Federal State Budgetary Institution of Science "St. Petersburg Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences", Saint Petersburg, Russian Federation

E-mail: sokolov_boris@inbox.ru; vka@mil.ru

Abstract. Statistical simulation models of complex technical systems characterized by several indicators of operational efficiency were studied in this paper. The efficiency of obtaining knowledge on the examined systems depends on the quality of the models used. One of the basic properties describing the quality of a model is its adequacy – the complex property characterizing the degree of conformity of the values of the output parameters of the model with the object with the required accuracy and reliability. Current approaches to evaluating the adequacy of models are based on various subjective convolutions of confidence factors from research results to a generalized indicator the essence of which, as a rule, is not interpreted. The presented method of assessing the adequacy of statistical simulation models of complex technical systems with several performance indicators differs from existing methods by using a generalized indicator of adequacy, which is the probability of achieving the required confidence of all the accuracy requirements to determine each of the considered performance indicators. This indicator is a natural, unambiguously interpreted (the probability of satisfying the requirements for model adequacy) objective and generalized indicator of adequacy of the simulation model. For preliminary calculations we use the Parzen–Rosenblatt method and obtain the probability density function of distances between real and model indicators of effectiveness of the examined system. The required result is then obtained by the suggested algorithm of multiple integration of the density function using the Monte-Carlo meth-

od. Recommendations on the realization of the computational procedures foreseen by the method are given. The application of the method is illustrated by a description of a computational experiment.

Keywords: simulation modeling; accuracy; reliability; model adequacy; complex technical system.

References

1. Mikoni S.V., Sokolov B.V., Yusupov R.M. *Kvalimetriya modeley i polimodel'nykh kompleksov: monografiya* (Qualimetry of Models and Polymodel Complexes: Monograph), Moscow, RAN Publ., 2018, 314 p. (in Russ.). DOI: 10.31857/S9785907036321000001
2. Vivchar R.M., Ptushkin A.I., Sokolov B.V. Risk-Based Management of the Design of Organisational and Technical Systems Based on Simulation Models of their Functioning. *Proceedings of Voronezh State University. Series: Systems Analysis and Information Technologies*, 2021, no. 2, pp. 17–31. (in Russ.). DOI: 10.17308/sait.2021.2/3502
3. Stepenko A.N., Reshetnikov D.V., Andreev E.A., Levchuk A.A. Model of the System of Operation of Power Supply Systems of a High-Risk Object. *Modern high technologies*, 2021, no. 11-2, pp. 289–293. (in Russ.). DOI: 10.17513/snt.38926
4. Rostovtsev Yu.G., Yusupov R.M. Problema obespecheniya adekvatnosti subektno-obektnogo modelirovaniya (The Problem of Ensuring the Adequacy of Subject-Object Modeling). *Izvestiya vuzov. Priborostroenie*, 1991, no. 7, pp. 7–14. (in Russ.).
5. Venttsel E.S. *Teoriya veroyatnostey* (Probability Theory), Moscow, Nauka Publ., 1969, 576 p. (in Russ.).
6. Smirnov N.V., Dunin-Barskovskiy I.V. *Kratkiy kurs matematicheskoy statistiki dlya tekhnicheskikh prilozheniy* (A Short Course in Mathematical Statistics for Technical Applications), Moscow, Fizmatgiz Publ., 1959, 436 p. (in Russ.).
7. Vivchar R.M., Ptushkin A.I., Sokolov B.V. The Technique for Multi-Criteria Evaluation of the Performance of Stochastic Complex Technical Systems. *Aerospace Instrument-Making*, 2022, no. 7, pp. 3–14. DOI: 10.25791/aviakosmos.7.2022.1286
8. Davydov V.S. Recognition of Incipient Defects in the Units of Ship Machinery by Vibrodiagnostics Based on Optimum Decision Rules. *Russian Journal of Nondestructive Testing*, 2019, Vol. 55, no. 3, pp. 185–191. DOI: 10.1134/S1061830919030045
9. Porshnev S.V., Koposov A.S. Using Rozenblatt–Parzen Approximation for Recovering a Cumulative Distribution Function of Continuous Random Variable with a Bounded Single-Mode Distribution Rule. *Scientific Journal of KubSAU*, 2013, no. 92(08), pp. 1–27.
10. Parzen E. On Estimation of a Probability Density Function and Mode. *Ann. Math. Statist.*, 1962, Vol. 33, Iss. 3, pp. 1065–1076. DOI: 10.1214/aoms/1177704472
11. Markovich L.A. Nonparametric Estimation of Multivariate Density and its Derivative by Dependent Data using Gamma Kernels. *Fundamentalnaya i prikladnaya matematika*, 2018, Vol. 22, Iss. 3, pp. 145–177.
12. Parmuzina M.S., Modebeykin A.A., Sukhanov A.A. Vychislenie integralov po metodu Monte-Karlo (Calculation of Integrals by the Monte Carlo method). *E-SCIO*, 2022, no. 6(69), pp. 553–565. <https://e-scio.ru/?p=17881>

Received June 1, 2023

Information about the authors

Vivchar Roman Mikhailovich is Cand. Sc. (Engineering), Lecturer of the Department of the Military Space Academy named after A.F. Mozhaisky, Saint Petersburg, Russian Federation, e-mail: rvivcar12@gmail.com

Ptushkin Anatoly Ivanovich is Cand. Sc. (Engineering), Professor, Department of the Military Space Academy named after A.F. Mozhaisky, Saint Petersburg, Russian Federation e-mail: anatoly.ptushkin2011@yandex.ru

Sokolov Boris Vladimirovich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Chief Scientific Officer of the Federal State Budgetary Institution of Science “St. Petersburg Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences”, Saint Petersburg, Russian Federation, e-mail: sokolov_boris@inbox.ru

ANALYSIS OF THE STOCHASTIC WENTZELL SYSTEM OF FLUID FILTRATION EQUATIONS IN A CIRCLE AND ON ITS BOUNDARY

N.S. Goncharov, G.A. Sviridyuk

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: goncharovns@susu.ru, sviridyuk@susu.ru

Abstract. Wentzell boundary condition problems for linear elliptic equations of second order have been studied by various methods. Over time, the condition has come to be understood as a description of a process occurring on the boundary of a domain and affected by processes inside the domain. Since Wentzell boundary conditions in the mathematical literature have been considered from two points of view (in the classical and neoclassical cases), the aim of this paper is to analyse the stochastic Wentzell system of filtration equations in a circle and on its boundary in the space of differentiable K-“noise”. In particular, we prove the existence and uniqueness of the solution that determines quantitative predictions of changes in the geochemical regime of groundwater in the case of non-pressure filtration at the boundary of two media (in the region and on its boundary).

Keywords: Wentzell system; filtration equation; Nelson–Glicklich derivative; Wentzell boundary conditions.

Introduction

Liquid filtration as well as its flow, diffusion, falling, etc. is one of the moisture transfer processes. The study of these processes begins with the study of their mathematical models. Let us consider one of the mathematical models of filtration. Let $\Omega \in \mathbb{R}^n$, $n \geq 2$ be a connected bounded region with boundary Γ of class C^∞ . The system of Barenblatt–Zheltov–Kochina equations [1], modelling the process of fluid filtration is defined on the compact $\Omega \cup \Gamma$

$$(\lambda - \Delta)u_t = \alpha \Delta u + \beta u, u = u(t, x), (x, t) \in \mathbb{R} \times \Omega, \quad (1)$$

$$(\lambda - \Delta)v_t = \gamma \Delta v + \frac{\partial u}{\partial \nu} + \delta v, v = v(t, x), (x, t) \in \mathbb{R} \times \Gamma, \quad (1)$$

$$\text{tr } u = v \text{ on } \mathbb{R} \times \Gamma. \quad (3)$$

Here the symbol Δ in (1) denotes the Laplace operator in the region Ω , and in (2) the same symbol denotes the Laplace – Beltrami operator on the smooth Riemannian manifold Γ . The symbol $\nu = \nu(t, x), (t, x) \in \mathbb{R} \times \Gamma$, denotes the normal to $\mathbb{R} \times \Omega$ external to $\mathbb{R} \times \Gamma$. The parameters $\lambda, \alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{R}$ characterise the medium.

Previously [2], following the tradition of [3–7], we called the condition of the form (2), in which the order of derivatives on spatial variables is not lower than the order on the same ones in (1), the Wentzell boundary condition. However, intending in the future to consider different cases of Ω and Γ (for instance, Ω is a bounded connected Riemannian manifold with edge Γ) we consider it necessary to call (1), (2) a system of equations, albeit defined on sets of different geometric dimension. This is supported by the fact that equations (1), (2) describe the same physical process of fluid filtration. The term “boundary conditions” should be reserved for the equations defined on the boundary (edge) of a region (manifold) and having a lower order of derivatives on spatial variables (see the classical treatise [8]). The name of the system of Wentzell equations emphasises the merits of the discoverer [9] of a new section of mathematical physics.

We will study the solvability of the system (1), (2) in the simplest case: $\Omega = \{(r, \theta) : r \in [0, R], \theta \in [0, 2\pi)\}$ is a circle, and $\Gamma = \{\theta : \theta \in [0, 2\pi)\}$ is a circumference. In this case (1), (2) is transformed to the form

$$(\lambda - \Delta_{r,\theta})u_t = \alpha \Delta_{r,\theta} u + \beta u, u = u(t, r, \theta), (t, r, \theta) \in \mathbb{R} \times \Omega, \quad (4)$$

$$(\lambda - \Delta_\theta)v_t = \gamma \Delta_\theta v + \partial_R u + \delta v, v = v(t, \theta), (t, \theta) \in \mathbb{R} \times \Gamma, \quad (5)$$

in which

$$\Delta_{r,\theta} = (r-R) \frac{\partial}{\partial r} \left((R-r) \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}, \Delta_\theta = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}, \partial_R = \frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=R}.$$

To the system (4), (5) we add the matching condition (3) and provide it with initial conditions

$$u(0, r, \theta) = u_0(r, \theta), v(0, \theta) = v_0(\theta). \tag{6}$$

The solution of the problem (3)–(6) we denote as a deterministic solution. It should be noted that transforming the operator (4) to Cartesian coordinates we obtain

$$\Delta_{x,y} = (x^2 + 2y^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (y^2 + 2x^2) \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

We transfer the consideration of the standard situation to our future research.

Resorting to the stochastic interpretation of partial derivative equations, in this paper we are going to touch upon the studies of nondeterministic problems in the interpretation necessary for us, the distinguishing feature of which is a different notion of “white noise” in the sense of the Nelson–Glicklich derivative of the Wiener process. The term Nelson–Glicklich derivative was originally introduced in the monograph [10], where the first derivative of a random process was found. This paradigm not only justified the consistency with the Einstein–Smoluchowski theory, which allows us to understand by Brownian motion the sought stochastic process, and by the derivative from this process – “white noise”, but also prompted the emergence of a new direction of study of stochastic equations of the Sobolev type. This is reflected in the studies of: dichotomies of a stochastic equation defined on a manifold [11]; application of the phase space method in the case of (L, p) -bounded operator M in [12]; stochastic equations of Sobolev type of high order in [12].

The paper consists of two parts. In the first part the existence and uniqueness of the system of Wentzell equations in a circle and on its boundary are considered. The second part contains abstract reasoning consisting in the construction of space and proof of existence and uniqueness of the stochastic system of Wentzell equations in a circle and on its boundary.

Deterministic case

Since it is not difficult to notice,

$$u = \sum_{k=2}^{\infty} \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) \frac{(R-r)^k}{2R^k} (a_k \cos k\theta + b_k \sin k\theta) + \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) (c_k \cos k\theta + d_k \sin k\theta), \tag{7}$$

in which

$$\begin{aligned} a_k &= \int_0^{R/2} \int_0^{2\pi} u_0(r, \theta) \frac{(R-r)^k}{2R^k} \cos k\theta d\theta dr, \\ b_k &= \int_0^{R/2} \int_0^{2\pi} u_0(r, \theta) \frac{(R-r)^k}{2R^k} \sin k\theta d\theta dr, \\ c_k &= \int_0^{2\pi} v_0(\theta) \cos k\theta d\theta, d_k = \int_0^{2\pi} v_0(\theta) \sin k\theta d\theta, \end{aligned}$$

is the formal solution of equation (4). If the series in (7) converge uniformly, then we have a solution of the problem (4), (6), with $\partial_R u = 0$. Taking this into account, we can construct the solution of problem (5), (6)

$$v = \sum_{k=2}^{\infty} \exp\left(t \frac{\delta - \gamma k^2}{\lambda + k^2}\right) (c_k \cos k\theta + d_k \sin k\theta), \tag{8}$$

and in the case $\alpha = \gamma, \beta = \delta$ the solutions of the problem (4)–(6) will satisfy the matching condition (3).

Further, the closure of the linear

$$\text{span} \left\{ (2R^k)^{-1} (R-r)^k \cos k\theta, (2R^k)^{-1} (R-r)^k \sin k\theta : k \in N \setminus \{1\}, r \in (0, R), \theta \in [0, 2\pi) \right\}$$

by the norm generated by the scalar product of

$$(\phi, \psi) = \int_0^{2\pi} \int_0^R \phi(r, \theta) \psi(r, \theta) r dr d\theta,$$

we denote by the symbol $A(\Omega)$. Closure of the linear span $\{\cos k\theta, \sin k\theta : k \in N, \theta \in [0, 2\pi)\}$ by the norm generated by the scalar product of

$$(\phi, \psi) = \int_0^{2\pi} \phi(\theta) \psi(\theta) d\theta,$$

we denote by the symbol $A(\Gamma)$.

Theorem 2.1 For any $u_0 \in A(\Omega)$ and $v_0 \in A(\Gamma)$ such that (3) is satisfied, and any $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda \in R$, such that $\alpha = \gamma, \beta = \delta$, and $\lambda \neq k^2$, in which $k \in N$, there exists a singular solution $(u, v) \in C^\infty(R; A(\Omega) + A(\Gamma))$ of problem (3)–(5).

The existence of the solution is proved by formulas (7)–(8), the proof of the singularity of the solution is trivial.

Stochastic case

Let $\Omega \equiv (\Omega, A, P)$ be a complete probability space with probability measure P associated to the σ -algebra A of subsets of the set Ω , and let R be the set of real numbers endowed with a Borel σ -algebra. A measurable mapping $\xi : \Omega \rightarrow R$ is called a *random variable*. The set of random variables whose expectation E is zero and variance D is finite forms a Hilbert space $L_2 = \{\xi : E\xi = 0, D\xi < +\infty\}$ with scalar product $(\xi_1, \xi_2) = E\xi_1\xi_2$ and a norm $\|\xi\|_{L_2}^2 = D\xi$.

Let us take the set $T \subset R$ and consider two mappings: $f : T \rightarrow L_2$, which maps a random variable $\xi \in L_2$ to $t \in T$, and $g : L_2 \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, which maps a point $\xi(\omega) \in \mathbb{R}$ to each pair (ξ, ω) . The mapping $\eta : T \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, which has the form $\eta = \eta(t, \omega) = g(f(t), \omega)$, we will call a *(one-dimensional) stochastic process*. Considering $T \subset \mathbb{R}$ an interval, we call a stochastic process $\eta = \eta(t)$, $t \in T$, *continuous if a.b. (almost probably) all its trajectories are continuous (i.e., if a.a. (almost all) $\omega \in A$ trajectories $\eta(\cdot, \omega)$ are continuous functions)*. The set of continuous stochastic processes forms a Banach space, which we denote by the symbol $C(T; L_2)$ with a norm

$$\|\eta\|_{CL_2} = \sup_{t \in I} (D\eta(t, \omega))^{1/2}.$$

Let us consider the properties of the Nelson–Glicklich derivative $\overset{\circ}{\eta}$ of a stochastic process η at the point $t \in T$ (for a detailed description, see for example in monograph [9]). If the Nelson–Glicklich derivatives $\overset{\circ}{\eta}(t, \cdot)$ of a stochastic process $\eta(t, \cdot)$ exist at all (or almost all) points of an interval T , then we refer to the existence of a Nelson–Glicklich derivative $\overset{\circ}{\eta}(t, \cdot)$ on T (almost probably on T). The set of stochastic processes, whose trajectories are Nelson–Glicklich differentiable on I up to order $l \in \{0\} \cup N$ inclusively form a Banach space $C^l(T; L_2)$, $l \in N$ with a norm

$$\|\eta\|_{C^l L_2} = \sup_{t \in I} \left(\sum_{k=0}^l D\overset{\circ}{\eta}^{(k)}(t, \omega) \right)^{1/2}.$$

Here we will consider the zero-order Nelson–Glicklich derivative as the initial random process, i.e. $\overset{\circ}{\eta}^{(0)} \equiv \eta$. Let us also note that the spaces $C^l(T; L_2)$, $l \in \{0\} \cup N$, will be called “noise” spaces for simplicity. (see, example, [3–7]).

Let us proceed to the construction of the space of *random K-values*. We consider H a real separable Hilbert space with orthonormalised basis $\{\varphi_k\}$, a monotone sequence $K = \{\lambda_k\} \subset \mathbb{R}_+$ such that $\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 < +\infty$, and a sequence $\{\xi_k\} = \xi_k(\omega) \in L_2$ of random variables such that $\|\xi_k\| \leq C$, for some constant $C \in \mathbb{R}_+$ and for all $k \in N$. Let us construct a H -valued K -value

$$\xi(\omega) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \xi_k(\omega) \varphi_k.$$

Completion of the linear envelope of the set $\{\lambda_k \xi_k \varphi_k\}$ by the norm

$$\|\eta\|_{H_K L_2} = \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 D \xi_k \right)^{1/2}$$

is called the space of (H -valued) *random K-values* and is denoted by the symbol $H_K L_2$. As we can clearly observe, the space $H_K L_2$ is Hilbertian, and the above constructed random K -value $\xi = \xi(\omega) \in H_K L_2$. Similarly, the Banach space of (H -valued) K -“noises” $C^l(T; H_K L_2)$, $l \in \{0\} \cup N$, let us define it as an enlargement of the linear envelope of the set $\{\lambda_k \eta_k \varphi_k\}$ by the norm

$$\|\eta\|_{C^l H_K L_2} = \sup_{t \in I} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 \sum_{m=1}^l D^{\circ(m)} \eta_k \right)^{1/2},$$

where the sequence of “noises” $\{\eta_k\} \subset C^l(T; L_2)$, $l \in \{0\} \cup N$. As we can clearly see, the vector

$$\eta(t, \omega) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \eta_k(t, \omega) \varphi_k$$

lies in the space $C^l(T; H_K L_2)$, if the sequence of vectors $\{\eta_k\} \subset C^l(T; L_2)$ and all their Nelson–Glicklich derivatives up to and including order $l \in \{0\} \cup N$ are uniformly bounded by the norm $\|\cdot\|_{C^l L_2}$.

Now let $A(F)$ be a real separable Hilbert space with orthonormalised basis $\{\varphi_k\}$ ($\{\psi_k\}$). Let us introduce a monotone sequence $K = \{\lambda_k\} \subset \{0\} \cup \mathbb{R}$ such that $\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 < +\infty$. By the symbol $U_K L_2$ ($F_K L_2$) we denote the Hilbert space which is a replenishment of the linear envelope of random K -values

$$\xi = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \xi_k \varphi_k, \xi_k \in L_2, \left(\zeta = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k \zeta_k \psi_k, \zeta_k \in L_2 \right)$$

by the norm

$$\|\eta\|_U^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 D \xi_k \left(\|\omega\|_F^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k^2 D \zeta_k \right).$$

It should be noted that in different spaces ($U_K L_2$ и $F_K L_2$) the sequence K can be different ($K = \{\lambda_k\}$ in $U_K L_2$ and $K = \{\mu_k\}$ in $F_K L_2$), but all sequences marked by K must be monotone and summable with square. All results will, in general, be true for different sequences $\{\lambda_k\}$ и $\{\mu_k\}$, but for simplicity's sake we will restrict ourselves to the case $\lambda_k = \mu_k$.

Let $A: A \rightarrow F$ be a linear operator. By the formula

$$A\xi = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \xi_k A \varphi_k \tag{9}$$

we define a linear operator $A: U_K L_2 \rightarrow F_K L_2$, and if the series in the right-hand side of (9) converges (in the metric $F_K L_2$) then $\xi \in \text{dom} A$, and if it diverges, then $\xi \notin \text{dom} A$. Traditionally, the spaces of linear continuous operators $L(U_K L_2; F_K L_2)$ and linear closed densely defined operators are defined. The following is valid

Lemma 3.1 (i) An operator $A \in L(A; F)$ exactly and only if $A \in L(U_K L_2; F_K L_2)$

As it can be easily observed,

$$\|A\xi\|_F \leq \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 D_{\xi_k} \|A\varphi_k\|_F^2 \leq \text{const} \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 D_{\xi_k} = \text{const} \|\xi\|_U$$

(ii) the operator $A \in Cl(A; F)$ exactly and only if $A \in Cl(U_K L_2; F_K L_2)$.

Lemma 3.2 The operator $M \in Cl(A; F)$ is p -limited with respect to the operator $L \in L(A; F)$ exactly and only if $M \in Cl(U_K L_2; F_K L_2)$ is p -limited with respect to the operator $L \in L(U_K L_2; F_K L_2)$. Moreover, the relative spectrum is the same in both cases.

For simplicity sake, let $A = \{u \in W_2^2(\Omega) + W_2^2(\Gamma) : \partial_R u = 0\}$, $F = L_2(\Omega) + L_2(\Gamma)$. Next, following the prescriptions above, we construct the spaces of random K -values $U_K L_2$ и $F_K L_2$. Random K -value $\xi \in U_K L_2$ has a form

$$\xi = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \xi_k \varphi_k.$$

In which $\{\varphi_k\}$ is the family of eigenfunctions of the Laplace operator $\Delta_{r,\theta} : A \rightarrow F$ orthonormalised in the sense of the scalar product (\cdot, \cdot) from $L_2(\Omega)$. Consider the linear stochastic Wentzell system of the fluid filtration equation in a circle and at its boundary. In this case (1), (2) is transformed to the form

$$(\lambda - \Delta_{r,\theta})\eta_t = \alpha \Delta_{r,\theta} \eta + \beta \eta, \eta \in C^\infty \quad (10)$$

$$(\lambda - \Delta_\theta)\eta_t = \gamma \Delta_\theta \eta + \partial_R \eta + \delta \eta, \eta \in C^\infty \quad (11)$$

in which

$$\Delta_{r,\theta} = (r-R) \frac{\partial}{\partial r} \left((R-r) \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}, \Delta_\theta = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}, \partial_R = \frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=R}.$$

To the system (10), (11) we add the initial condition

$$\eta(0) = \eta_0. \quad (12)$$

The solution of the problem (11)–(12) we will call a stochastic solution.

Theorem 3.1 For any $\eta_0 \in U_K L_2(\Omega)$ and any $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda \in \mathbb{R}$, such that $\alpha = \gamma, \beta = \delta$, a $\lambda \neq k^2$, in which $k \in \mathbb{N}$, there exists a single solution $\eta \in C^\infty(\mathbb{R}_+; U_K L_2)$ of problem (10)–(12).

The existence and singleness of the solution are proved by analogy with the deterministic case by virtue of Lemmas 3.1 and 3.2.

The research was funded by the Russian Science Foundation (project No. 23-21-10056).

References

1. Barenblatt, G.I., Zheltov, Iu.P., Kochina, I.N. Basic Concepts in the Theory of Seepage of Homogeneous Liquids in Fissured Rocks [Strata]. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 1960, Vol. 24, Iss. 5, pp. 1286–1303. DOI: 10.1016/0021-8928(60)90107-6
2. Goncharov N.S., Zagrebina S.A., Sviridyuk G.A. Non-Uniqueness of Solutions to Boundary Value Problems with Wentzell Condition. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modeling, Programming and Computer Software*, 2021, Vol. 14, Iss. 4, pp. 102–105. DOI: 10.14529/mmp210408
3. Favini A., Sviridyuk G.A., Manakova N.A. Linear Sobolev Type Equations with Relatively P-Sectorial Operators in Space of “Noises”. *Abstract and Applied Analysis*, 2015, vol. 2015, no. 697410. DOI: 10.1155/2015/697410
4. Favini A., Sviridyuk G.A., Zamyshlyayeva A.A. One Class of Sobolev Type Equations of Higher Order with Additive “White Noise”. *Communications on Pure and Applied Analysis*, 2016, Vol. 15, no. 1, pp. 185–196. DOI: 10.3934/cpaa.2016.15.185
5. Favini A., Sviridiuk G.A., Sagadeeva M.A. Linear Sobolev Type Equations with Relatively p-Radial Operators in Space of “Noises”. *Mediterranean Journal of Mathematics*, 2016, Vol. 13, no. 6, pp. 4607–4621. DOI: 10.1007/s00009-016-0765-x

6. Favini A., Zagrebina S.A., Sviridiuk G.A. Multipoint Initial-Final Value Problems for Dynamical Sobolev-Type Equations in the Space of Noises. *Electronic Journal of Differential Equations*, 2018, Vol. 2018, p. 128.

7. Favini A., Zagrebina S.A., Sviridiuk G.A. The Multipoint Initial – Final Value Condition for the Hoff Equations on Geometrical Graph in Spaces of K-“noises”. *Mediterranean Journal of Mathematics*, 2022, Vol. 19, Article no. 53. DOI: 10.1007/s00009-021-01940-0

8. Lions J.-L., Magenes E. Problèmes aux Limites non Homogènes et Applications. Vol. 1, *Travaux et Recherches Mathématiques*, no. 17. Dunod, Paris; 1968, 372 p.

9. Wentzell A.D. On Boundary Conditions For Multidimensional Diffusion Processes. *Theory of Probability and its Applications*, 1959, Vol. 4, Iss. 2, pp. 164–177. DOI: 10.1137/1104014

10. Gliklikh Yu.E. *Global and Stochastic Analysis with Applications to Mathematical Physics*. Springer, London, Dordrecht, Heidelberg, N.-Y., 2011, 436 p. DOI: 10.1007/978-0-85729-163-9

11. Kitaeva O.G., Shafranov D.E., Sviridiuk G.A. Exponential Dichotomies in the Barenblatt–Zhel'tov–Kochina Model in Spaces of Differential Forms with “Noise”. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming and Computer Software (Bulletin SUSU MMCS)*, 2019, Vol. 2, no. 12, pp. 47–57. DOI: 10.14529/mmp190204

12. Goncharov N.S. Stochastic Barenblatt–Zhel'tov–Kochina Model on the Interval with Wentzell Boundary Conditions. *Global and Stochastic Analysis*, 2020, Vol. 7, Iss. 1, pp. 11–23.

13. Sviridyuk G.A., Zamyshlyayeva A.A., Zagrebina S.A. Multipoint Initial-Final Problem for one Class of Sobolev Type Models of Higher Order with Additive “White Noise”. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2018, Vol. 11, no. 3, pp. 103–117. DOI: 10.14529/mmp180308

Received July 20, 2023

Information about the authors

Goncharov Nikita Sergeevich is Post-graduate Student, Equations of Mathematical Physics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: goncharovns@susu.ru.

Sviridyuk Georgiy Anatol'evich is Professor, Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Head of Mathematical Physics Non-Classical Equations Research Laboratory, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: sviridiukga@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-0795-2277>.

АНАЛИЗ СТОХАСТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ВЕНТЦЕЛЯ УРАВНЕНИЙ ФИЛЬТРАЦИИ ЖИДКОСТИ В КРУГЕ И НА ЕГО ГРАНИЦЕ

Н. С. Гончаров, Г. А. Свиридюк

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

E-mail: goncharovns@susu.ru, sviridyuk@susu.ru

Аннотация. Задачи с граничным условием Вентцеля для линейных эллиптических уравнений второго порядка изучались различными методами. Со временем условие стало пониматься как описание процесса, происходящего на границе области и на который влияют процессы внутри области. Поскольку в математической литературе граничные условия Вентцеля рассматривались с двух точек зрения (в классическом и неклассическом случаях), целью данной работы является анализ стохастической системы Вентцеля уравнений фильтрации в круге и на его границе в пространстве дифференцируемых K -«шумов». В частности, доказано существование и единственность решения, которое определяет количественные прогнозные изменения геохимического режима грунтовых вод при безнапорной фильтрации, протекающей на границе двух сред (в области и на ее границе).

Ключевые слова: система Вентцеля; уравнение фильтрации; производная Нельсона–Гликлиха; краевые условия Вентцеля.

Литература

1. Баренблатт, Г.И. Об основных представлениях теории фильтрации в трещиноватых средах / Г.И. Баренблатт, Ю.П. Желтов, И.Н. Кочина // Приклад. математика и механика. – 1960. – Т. 24, № 5. – С. 852–864.
2. Goncharov, N.S. Non-Uniqueness of Solutions to Boundary Value Problems with Wentzell Condition / N.S. Goncharov, S.A. Zagrebina, G.A. Sviridyuk // Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modeling, Programming and Computer Software. – 2021. – Vol. 14, Iss. 4. – P. 102–105.
3. Favini, A. Linear Sobolev Type Equations with Relatively P -Sectorial Operators in Space of «Noises» / A. Favini, G.A. Sviridyuk, N.A. Manakova // Abstract and Applied Analysis. – 2015. – Vol. 2015. – P. 697410.
4. Favini, A. One Class of Sobolev Type Equations of Higher Order with Additive “White Noise” / A. Favini, G.A. Sviridyuk, A.A. Zamyshlyayeva // Communications on Pure and Applied Analysis. – 2016. – Т. 15. № 1. – С. 185–196.
5. Favini, A. Linear Sobolev Type Equations with Relatively p -Radial Operators in Space of “Noises” / A. Favini, G.A. Sviridyuk, M.A. Sagadeeva // Mediterranean Journal of Mathematics. – 2016. – Vol. 13, no. 6. – P. 4607–4621.
6. Favini, A. Multipoint Initial-Final Value Problems for Dynamical Sobolev-type Equations in the Space of Noises / A. Favini, S.A. Zagrebina, G.A. Sviridyuk // Electronic Journal of Differential Equations. – 2018. – Vol. 2018. – P. 128.
7. Favini, A. The Multipoint Initial – Final Value Condition for the Hoff Equations on Geometrical Graph in Spaces of K -“noises” / A. Favini, S.A. Zagrebina, G.A. Sviridyuk // Mediterranean Journal of Mathematics. – 2022. – Vol. 19. – Article no. 53.
8. Лионс, Ж.-Л. Неоднородные граничные задачи и их приложения: В 3 т. / Ж.-Л. Лионс, Э. Мадженес. – М.: Мир, 1971.
9. Вентцель, А.Д. О граничных условиях для многомерных диффузионных процессов / А.Д. Вентцель // Теория вероятн. и ее применения. – 1959. – Т. 4, Вып. 2. – С. 172–185.

10. Gliklikh, Yu.E. Global and Stochastic Analysis with Applications to Mathematical Physics / Yu.E. Gliklikh. – Springer, London, Dordrecht, Heidelberg, N.-Y. – 2011. – 436 p.

11. Kitaeva, O.G. Exponential Dichotomies in the Barenblatt–Zhel'tov–Kochina Model in Spaces of Differential Forms with “Noise” / O.G. Kitaeva, D.E. Shafranov, G.A. Sviridiuk // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2019. – Т. 2, № 12. – С. 47–57.

12. Goncharov, N.S. Stochastic Barenblatt–Zhel'tov–Kochina Model on the Interval with Wentzell Boundary Conditions / N.S. Goncharov // Global and Stochastic Analysis. – 2020. – Vol. 7, Iss. 1. – P. 11–23.

13. Sviridyuk, G.A. Multipoint Initial-Final Problem for one Class of Sobolev Type Models of Higher Order with Additive “White Noise” / G.A. Sviridyuk, A.A. Zamyshlyayeva, S.A. Zagrebina // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2018. – Т. 11, № 3. – С. 103–117.

Поступила в редакцию 20 июля 2023 г.

Сведения об авторах

Гончаров Никита Сергеевич – аспирант, кафедра уравнений математической физики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: goncharovns@susu.ru.

Свиридюк Георгий Анатольевич – доктор физико-математических наук, профессор, научно-исследовательская лаборатория неклассических уравнений математической физики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: sviridiukga@susu.ru.

ON SOME CLASSES OF INVERSE PARABOLIC PROBLEMS OF RECOVERING THE THERMOPHYSICAL PARAMETERS

S.G. Pyatkov, O.A. Soldatov

Yugra State University, Khanty-Mansiysk, Russian Federation

E-mail s_pyatkov@ugrasu.ru

Abstract. In the article we examine the question of regular solvability in Sobolev spaces of parabolic inverse coefficient problems. A solution is sought in the class of regular solutions that has all derivatives occurring in the equation summable to some power. The overdetermination conditions are the values of a solution at some collection of points lying inside the domain. The proof is based on a priori estimates and the fixed point theorem.

Keywords: parabolic equation, inverse problem, initial-boundary value problem, existence, uniqueness.

Introduction

We consider the well-posedness questions of inverse parabolic problems. Let G be a domain in \mathbb{R}^n with boundary $\Gamma \in C^2$. The parabolic equation is of the form

$$c(t, x)u_t + A(t, x, D)u = f(t, x), \quad (t, x) \in Q = (0, T) \times G, \quad (1)$$

where the functions f, c and the elliptic operator A are as follows:

$$-A(t, x, D) = A_0(t, x, D_x) + \sum_{i=1}^r q_i(t) A_i(t, x, D_x), \quad f = f_0(t, x) + \sum_{i=r+1}^s f_i(t, x) q_i(t),$$

$$A_i = \sum_{k, l=1}^n a_{kl}^i(t, x) \partial_{x_k} \partial_{x_l} + \sum_{k=1}^n a_k^i(t, x) \partial_{x_k} + a_0^i, \quad c = c_0(t, x) - \sum_{i=r+1}^s f_i(t, x) q_i(t).$$

The equation (1) is furnished with the initial and boundary conditions

$$u_{t=0} = u_0, \quad Bu|_S = g(t, x), \quad S = (0, T) \times \Gamma, \quad (2)$$

where $Bu = u$ or $Bu = \frac{\partial u}{\partial N} + \sigma u = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} u_{x_i} v_j + \sigma u$ ($v = (v_1, v_2, \dots, v_n)$) is the outward unit normal to Γ ,

and the overdetermination conditions

$$u(t, b_j) = \psi_j(t), \quad b_j \in G, \quad j = 1, 2, \dots, s. \quad (3)$$

The unknowns in (1)–(3) are a solution u and the functions $q_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, s$). The problem (1)–(3) arise in describing the heat and mass transfer, diffusion, and filtration processes, ecology, and many other fields. The problem of determining thermophysical and mass transfer characteristics with the use of inverse modelling is studied in [1], where the results are used for describing the temperature regimes of the soils of the northern territories. We can refer to the monograph [2] devoted to inverse parabolic problems and to [3–6], where the main statements of inverse problems and some applications can be found. The number of theoretical results devoted to the problems (1)–(3) is sufficiently small. We should refer to the articles [7–10], where in the case of $n = 1$ the thermal conductivity depending on time is defined and existence and uniqueness theorems are established with the additional data being the values of a solution at some points lying in the domain or on its boundary. The thermal conductivity independent of one of the spacial variable and some other coefficients are identified in [11, 12] with the use of the Cauchy data on the lateral boundary of the cylinder and integral data. Existence of a solution is proven and stability estimates are exposed. The monograph [3] (see also the results in [13]) contains the existence theory for inverse problems of recovering the coefficients in the leading part of the equation independent of some part of variables with the overdetermination data given on sections of the spacial domain by planes. In view of the method, all coefficients also are independent of some spacial variables. More complete results for the problems (1)–(3) can be found in [14–17], where the well-posedness of

the inverse problems in question is established for the case of the additional data are the values of a solution on some spacial manifolds or at some collection of points. However, in these articles $c(t, x) = 1$ except for the article [15], where $c(t, x) = c(t)$ in the case of the pointwise overdetermination. The existence and uniqueness theorems in the case of the unknown heat capacity and the integral overdetermination data are exposed in [18–20], where $c(t, x) = c(t)$ or $c(t, x) = \text{const}$. Note that inverse problems with pointwise data have been studied by A.I. Prilepko and his followers and a number of classical results is presented in [2]. Similar results under different conditions on the data and in some other spaces can be found in [21, 22]. Our results are close to those in [23]. In contrast to this article, the heat capacity here is unknown. The main results of the article are exposed in Sect. 2.

Preliminaries

The definition of the Sobolev spaces $W_p^s(G; E)$, $W_p^s(Q; E)$ (E is a Banach space) can be found in [24]. If $E = R$ or $E = R^n$ then we omit the notation E and write $W_p^s(Q)$. The definitions of the Hölder spaces $C^{\alpha, \beta}(\bar{Q})$, $C^{\alpha, \beta}(\bar{S})$ can be found in [25]. By the norm of a vector, we mean the sum of the norms of its coordinates. Given the interval $J = (0, T)$, put $W_p^{s,r}(Q) = W_p^s(J; L_p(G)) \cap L_p(J; W_p^r(G))$, $W_p^{s,r}(S) = W_p^s(J; L_p(\Gamma)) \cap L_p(J; W_p^r(\Gamma))$. All function spaces as well as the coefficients of the equation (1) are assumed to be real. In what follows, we suppose that $p > n + 2$. The definition of the boundary of class C^s , $s \geq 1$, can be found in Ch. 1 in [25]. Denote by $B_\delta(b)$ the ball of radius δ centered at b . Fix a parameter $\delta > 0$ such that $\overline{B_\delta(b_i)} \cap \overline{B_\delta(b_j)} = \emptyset$ for $i \neq j$ and $\overline{B_\delta(b_i)} \cap \Gamma = \emptyset$, $i, j = 1, 2, \dots, s$. Denote $Q^\tau = (0, \tau) \times G$ and $G_\delta = \cup_i B_\delta(b_i)$. Construct nonnegative functions $\varphi_j \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ such that $\varphi_j = 1$ in $B_{\delta/2}(b_j)$, $\varphi_j \geq 0$ and $\varphi_j = 0$ for $x \notin B_{3\delta/4}(b_j)$. Let $\varphi = \sum_{j=1}^s \varphi_j(x)$.

The consistency and smoothness conditions can be written as

$$u_0(x) \in W_p^{2-2/p}(G^\pm), B(0, x, D)u_0|_\Gamma = g(0, x), g \in W_p^{k_0, 2k_0}(S), \tag{4}$$

where $k_0 = s_1 = 1 - 1/2p$ for $Bu = u$ and $k_0 = s_0 = 1/2 - 1/2p$ otherwise;

$$\varphi u_0(x) \in W_p^{3-2/p}(G), a_{ij}^k \in L_\infty(0, T; W_p^1(G_\delta)), a_l^k \in L_p(0, T; W_p^1(G_\delta)), \tag{5}$$

where $i, j = 1, 2, \dots, n, l = 0, 1, \dots, n, k = 0, 1, \dots, r$;

$$f \in C(\bar{Q}) \cap L_\infty(0, T; W_\infty^1(G_\delta)), \varphi f_l \in L_p(0, T; W_p^1(G)), f_l \in L_p(Q), \tag{6}$$

where $j = r + 1, \dots, r_1$ и $l = 0, r_1 + 1, \dots, s$. We use the inclusions of the form $f \in L_p(0, T; W_p^1(G_\delta))$ or similar, where the set G_δ consists of several connectedness components (in this case $B_\delta(b_j)$). By definition, this means that $f|_{B_\delta(b_j)} \in L_p(0, T; W_p^1(B_\delta(b_j)))$ for all j . This space is endowed with the norm equal the sum of the norms over the corresponding connectedness components We assume that

$$a_{ij}^k \in C(\bar{Q}), a_l^k \in L_p(Q), \sigma, a_{ij}^k|_S \in W_p^{s_0, 2s_0}(S), \tag{7}$$

where the last inclusion is required only if $Bu \neq u$,

$$\psi_j \in C^1([0, T]), \psi_j(0) = u_0(b_j), a_l^k(t, b_j), f_m(t, b_j) \in C([0, T]), \tag{8}$$

where $j = 1, \dots, s, m = 0, r + 1, \dots, s, l = 0, 1, \dots, n, k = 0, 1, \dots, r$. In view of (5), (8), the traces $f_m(t, b_p), a_l^k(t, b_j)$ are defined and $f_m(t, b_p), a_l^k(t, b_j) \in L_p(0, T)$; moreover,

$f_m(t, x), a_i^k(t, x) \in C(\overline{G_\delta}; L_p(0, T))$ (after a possible change on a set of zero measure 0) (see [26], Sect. 2, 3, 4, the relations (3.1)–(3.9), the corollary 4.3).

Consider the matrix B_0 of dimension $s \times s$ with rows

$$A_1(0, b_j, D)u_0(b_j), \dots, A_r(0, b_j, D)u_0(b_j), f_{r+1}(0, b_j)\psi_j'(0), \dots, f_{r_1}\psi_j'(0), f_{r_1+1}(0, b_j), \dots, f_s(0, b_j).$$

and assume that

$$\det B_0 \neq 0. \tag{9}$$

Consider the system

$$B_0 \vec{q}_0 = \vec{g}_0, \tag{10}$$

$$\vec{g}_0 = (c_0(0, b_1)\psi_{1r}(0) - A_0(0, b_1, D)u_0 - f_0(0, b_1), \dots, c_0(0, b_s)\psi_{sr}(0) - A_0(0, b_s, D)u_0 - f_0(0, b_s))^T.$$

In view of (9) the system (10) has a unique solution $q_0 = (q_{01}, \dots, q_{0s})$. Denote $a_{pl} = a_{pl}^0 + \sum_{i=1}^r a_{pl}^i q_{0i}$

and below we suppose that

$$L_0(\xi) = \sum_{p,l=1}^n a_{pl}(t, x)\xi_p\xi_l \geq \delta_0 |\xi|^2 \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n, \forall (t, x) \in Q.$$

$$C = c_0 - \sum_{i=r+1}^{r_1} q_{0i}f_i(t, x) \geq \delta_0 \quad \forall (t, x) \in Q,$$

where δ_0 is a positive constant. The operator $-A^0 = A_0(t, x, D_x) + \sum_{i=1}^r q_{0i}A_i(t, x, D_x)$ is elliptic and we

can consider the problem

$$C(t, x)u_t + A^0(t, x, D_x)u = f, u|_{t=0} = u_0(x), Bu|_S = g. \tag{11}$$

Theorem 1. Assume that the conditions (4), (7) hold and $f \in L_p(Q)$. Then there exists a unique solution $u \in W_p^{1,2}(Q)$ to the problem (11). If $g = 0$ then it satisfies the estimate

$$\|u\|_{W_p^{1,2}(Q^\tau)} \leq c \left[\|u_0\|_{W_p^{2-2/p}(G)} + \|f\|_{L_p(Q^\tau)} \right], \tag{12}$$

where the constant c is independent of $u_0, f, \tau \in (0, T]$. If additionally the condition (5) holds and $\varphi f \in L_p(0, T; W_p^1(G_\delta))$ then $\varphi u \in L_p(0, T; W_p^3(G))$, $\varphi u_t \in L_p(0, T; W_p^1(G))$ and if $g = 0$ then

$$\begin{aligned} \|u\|_{W_p^{1,2}(Q^\tau)} + \|\varphi u\|_{L_p(0, \tau; W_p^3(G))} + \|\varphi u_t\|_{L_p(0, \tau; W_p^1(G))} \leq c [& \|u_0\|_{W_p^{2-2/p}(Q^\tau)} + \\ & + \|\varphi u_0\|_{W_p^{3-2/p}(G)} + \|f\|_{L_p(Q^\tau)} + \|\varphi f\|_{L_p(0, \tau; W_p^1(G))}], \end{aligned} \tag{13}$$

where c is independent of $u_0, f, \tau \in (0, T]$.

Proof. The first claim results from Theorem 2.1 in [24]. The estimate (12) results from the conventional arguments (see, for instance, Theorem 2 in [22], Theorem 1 in [21]). Additional smoothness of a solution is established as in Theorem 1 in [27] (see also the proof of theorem 4, subsect. 3, sect. 2, Ch. 4 in [23]). The claim is also contained in Theorem 1 in [28] which can be applied here.

Denote the left-hand side of (13) by $\|u\|_{H^\tau}$ and the quantity $\|f\|_{L_p(Q^\tau)} + \|\varphi f\|_{L_p(0, \tau; W_p^1(G))}$ by $\|f\|_{W^\tau}$.

The corresponding Banach spaces are denoted by H^τ and W^τ , respectively. The space H^τ comprises the functions $u \in W_p^{1,2}(Q^\tau)$ such that $\varphi u \in L_p(0, T; W_p^3(G))$, $\varphi u_t \in L_p(0, T; W_p^1(G))$, u satisfies the homogeneous initial-boundary conditions in (11).

Main results

Theorem 2. Let the conditions (4)–(9) hold. Then there exists a number $\tau_0 \in (0, T]$ such that on $(0, \tau_0)$ there exists a unique solution $(u, q_1, q_2, \dots, q_s)$ to the problem (1)–(3) such that $u \in W_p^{1,2}(Q^{\tau_0})$, $\varphi u \in L_p(0, \tau_0; W_p^3(G))$, $\varphi u_t \in L_p(0, \tau_0; W_p^1(G))$, $q_j \in C([0, \tau_0])$, $j = 1, 2, \dots, s$.

Proof. Let $\vec{q} = (q_1, \dots, q_s)^T$. Find a solution Φ to the problem (11), where we take $f = f_0 + \sum_{i=\eta+1}^s f_i(t, x)q_{0i}$ and the functions g, u_0 are our data in (11). By Theorem 1, there exists a solution to the problem (11) such that $\Phi \in W_p^{1,2}(Q)$, $\varphi\Phi \in L_p(0, T; W_p^3(G))$, $\varphi\Phi_t \in L_p(0, T; W_p^1(G))$. Make the change $u = v + \Phi$. We obtain the problem

$$Lv = c(t, x)v_t + S(\vec{\mu})v = (A^0 - A)\Phi + (-c(t, x) + C(t, x))\Phi_t + \sum_{i=\eta+1}^s f_i(t, x)\mu_i(t), \quad (14)$$

where $(\vec{\mu}) = -(A^0 + A(\vec{\mu}))$, $A(\vec{\mu}) = \sum_{i=1}^r \mu_i(t)A_i(t, x, D_x)$, $c = C - c^0(\vec{\mu}, t, x)$, $c^0(\vec{\mu}, t, x) = \sum_{i=r+1}^{\eta} f_i\mu_i$, $\mu_i(t) = q_i(t) - q_{0i}$, $\vec{\mu} = (\mu_1, \dots, \mu_s)$;

$$v_{t=0} = 0, Bv_S = 0, v(t, b_j) = \psi_j(t) - \Phi(t, b_j) = \tilde{\psi}_j, j = 1, \dots, s. \quad (15)$$

In view of the properties of the function Φ , $D^\alpha \varphi\Phi \in W_p^{1,2}(Q)$ for all j and $|\alpha| \leq 1$. The embedding theorems yield $D^\alpha \varphi\Phi_i(t, x) \in C^{1-(n+2)/2p, 2-(n+2)/p}(\bar{Q})$ (see Sect. 6.3 and Theorem 1 (the Sect. Remarks p. 424) in [29]) and thereby $D^\alpha \Phi(t, b_j) \in C([0, T])$. In this case the function $a_{ij}^k(t, b_j)D_x^\alpha \Phi(t, b_j)$, $a_i^k(t, b_j)D_x^\alpha \Phi(t, b_j)$ belong to $C([0, T])$. Hence, $A^0\Phi(t, b_j) \in C([0, T])$ (after a possible change on a set of zero measure). Similarly, $C(t, b_j) \in C([0, T])$. Consider the right-hand side in the equation for Φ . We have that $f_k(t, b_j) \in C([0, T])$ (in view of (6), (8)). From the equation we infer $\Phi_t(t, b_j) \in C([0, T])$ for all j . Thus, we have reduced the problem (1)–(3) to a simpler problem

(14)–(15). Let $B_{R_0} = \{\vec{\mu} \in C([0, \tau]) : \|\vec{\mu}\|_{C([0, \tau])} \leq R_0\}$. Consider the expression $L(\vec{\xi}) = \sum_{ij=1}^n \tilde{a}_{ij}\xi_i\xi_j$,

$\tilde{a}_{ij} = \sum_{k=1}^r a_{ij}^k\mu_k$ and find the quantity R_0 such that

$$|L(\vec{\xi})| \leq \delta_0 |\xi|^2 / 2 \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n, |c - C| = \left| \sum_{i=r+1}^{\eta} \mu_i f_i \right| \leq \delta_0 / 2, \quad \forall (t, x) \in Q, \forall \vec{\mu} \in B_{R_0}.$$

In this case the operator $S(\vec{\mu})$ is elliptic and Theorem 1 holds with $S(\vec{\mu})$ rather than A^0 . Given a vector $\vec{\mu} \in B_{R_0}$, find a solution v to the problem (1)–(2) on $(0, \tau)$ such that $\varphi v \in L_p(0, \tau; W_p^3(G))$, $\varphi v_t \in L_p(0, \tau; W_p^1(G))$. Study the properties of this map $\vec{\mu} \rightarrow v(\vec{\mu})$. Theorem 1 yields

$$v = L^{-1}f, f = \sum_{i=1}^r \mu_i A_i \Phi(t, x) + \sum_{i=r+1}^{\eta} \mu_i f_i \Phi_t + \sum_{i=\eta+1}^s \mu_i f_i(t, x). \quad (16)$$

We have the estimate

$$\|v\|_{H^\tau} = \|L^{-1}f\|_{H^\tau} \leq c \|f\|_{W^\tau}, \quad (17)$$

The conditions on the coefficients imply the estimate

$$\|f\|_{W^\tau} \leq c_2 \|\bar{\mu}\|_{C([0,\tau])}, \quad (18)$$

where the constant c_2 depends on the quantities $\|f_i\|_{W^\tau}$ ($i \geq r_1 + 1$), $\|f_i\|_{L_\infty(0,\tau;W_\infty^1(G_\delta))}$ ($r + 1 \leq i \leq r_1$), $\|\Phi\|_{H^\tau}$ (we can replace τ with T in these norms and thus we can take c_2 independent of τ). Take $\bar{\mu}_i \in B_{R_0}$ ($i = 1, 2$) and consider the corresponding solutions v_1, v_2 to the problem (14)–(15). Let $\bar{\mu}_i = (\mu_{1i}, \mu_{2i}, \dots, \mu_{si}), i = 1, 2$. Subtracting the latter equation (1) from the former, we obtain that the difference $\omega = v_2 - v_1, v_i = v(\bar{\mu}_i)$ meets the equation

$$\begin{aligned} \frac{(c_1 + c_2)}{2} \omega_t + S \left(\frac{\bar{\mu}_1 + \bar{\mu}_2}{2} \right) \omega &= \sum_{j=1}^r (\mu_{j2}(t) - \mu_{j1}(t)) A_j(t, x, D) (v_1 + v_2) / 2 + \\ &\sum_{j=r+1}^{r_1} (\mu_{j2}(t) - \mu_{j1}(t)) f_j(t, x) (v_{1t} + v_{2t}) / 2 + \sum_{j=1}^r (\mu_{j2}(t) - \mu_{j1}(t)) A_j(t, x, D) \Phi \\ &+ \sum_{j=r+1}^{r_1} (\mu_{j2}(t) - \mu_{j1}(t)) f_j \Phi_t + \sum_{j=r_1+1}^S f_j(t, x) (\mu_{j2}(t) - \mu_{j1}(t)) = f. \end{aligned} \quad (19)$$

We have that $(\bar{\mu}_1 + \bar{\mu}_2) / 2 \in B_{R_0}$ and, thus, the following estimate (see (17)) holds:

$$\|\omega\|_{H^\tau} \leq c \|\tilde{f}\|_{W^\tau}, \quad (20)$$

The estimates (18), (20) ensure that

$$\|\omega\|_{H^\tau} \leq c \|\tilde{f}\|_{W^\tau} \leq c_2 c \|\bar{\mu}_2 - \bar{\mu}_1\|_{C([0,\tau])}, \quad (21)$$

where c_2 depends on the norms $\|(v_1 + v_2) / 2\|_{H^\tau}, \|f_i\|_{W^\tau}$ ($i \geq r_1 + 1$), $\|f_i\|_{L_\infty(0,\tau;W_\infty^1(G_\delta))}$ ($r + 1 \leq i \leq r_1$), $\|\Phi\|_{H^\tau}$. Let $v = v(\bar{\mu})$ be a solution to the problem (14)–(15). Taking $x = b_j$ in (1) and taking into account that $v_t(t, b_j) = \tilde{\psi}_j'$, we obtain the system

$$c(t, b_j) \tilde{\psi}_j' + S(\bar{\mu})v(t, b_j) = \sum_{i=1}^r \mu_i A_i(t, b_j, D) \Phi(t, b_j) + \sum_{i=r+1}^{r_1} \mu_i f_i \Phi_t(t, b_j) + \sum_{i=r_1+1}^S f_i(t, b_j) \mu_j(t). \quad (22)$$

The right-hand side can be written as $B(t)\bar{\mu}$, where the rows of the matrix $B(t)$ are as follows:

$$A_1(t, b_j, D) \Phi(t, b_j), \dots, A_r(t, b_j, D) \Phi(t, b_j), f_{r+1} \Phi_t(t, b_j), \dots, f_{r_1} \Phi_t(t, b_j), f_{r_1+1}(t, b_j), \dots, f_s(t, b_j).$$

The matrix $B(0)$ agrees with B_0 from (9) and thereby $\det B(0) \neq 0$. The functions $f_i(t, b_j), a_{kl}^i(t, b_j), a_k^i(t, b_j)$ are continuous for all values of the indices. Moreover, $D^\alpha \varphi \Phi(t, x) \in C(\bar{Q})$ for $|\alpha| \leq 2$. Thus, the entries of B are continuous in t and there exists $\tau_0 \leq T$ and a constant $\delta_3 > 0$ such that

$$|\det B(t)| \geq \delta_3 > 0 \forall t \in [0, \tau_0]. \quad (23)$$

In this case the system (22) is written in the form

$$\bar{\mu}(t) = B^{-1}H(\bar{\mu})(t) = R(\bar{\mu}), H(\bar{\mu}) =$$

$$(c(t, b_1) \tilde{\psi}_1' + S(\bar{\mu})v(t, b_1), c(t, b_2) \tilde{\psi}_2' + S(\bar{\mu})v(t, b_2), \dots, c(t, b_s) \tilde{\psi}_s' + S(\bar{\mu})v(t, b_s))^T \quad (24)$$

The right-hand side here contains an operator taking the vector $\bar{\mu}$ into the vector with the components $C(t, b_j) \tilde{\psi}_j' - c^0(\bar{\mu}, t, b_j) \tilde{\psi}_j' + S(\bar{\mu})v(t, b_j)$ ($j = 1, 2, \dots, s$), where v is a solution to the problem (14),

(15). The properties of the map $\bar{\mu} \rightarrow v(\bar{\mu})$ we have already studied. Demonstrate that there exists $\tau_1 \leq \tau_0$ such that the operator $R(\bar{\mu}) = B^{-1}H(\bar{\mu})(t)$, $R: C([0, \tau_1]) \rightarrow C([0, \tau_1])$ takes the ball B_{R_0} into itself and is a contraction. Consider the quantity $\psi_j'(0)$. By construction,

$$C(0, b_j)\tilde{\psi}_j'(0) = C(0, b_j)(\psi_j'(0) - \Phi'(0, b_j)) = C(0, b_j)\psi_j'(0) + A(0, b_j, D)u_0(b_j) - f_0 - \sum_{i=r+1}^s f_i(0, b_j)q_{0i} = 0, j = 1, \dots, s,$$

since the numbers q_{0i} are defined from (10). Let

$$\bar{\psi} = (C(0, b_1)\tilde{\psi}_1', C(0, b_2)\tilde{\psi}_2', \dots, C(0, b_s)\tilde{\psi}_s')^T.$$

In this case $\bar{\psi} \in C([0, \tau])$ ($\tau \leq \tau_0$) and $\bar{\psi}(0) = 0$. There exists a number $\tau_1 \leq \tau_0$ such that $\|B^{-1}(t)\bar{\psi}\|_{C([0, \tau_1])} \leq R_0/2$. Note that $R(0) = B^{-1}(t)\bar{\psi}(t)$. Next, we obtain estimates assuming that $\bar{\mu} \in B_{R_0}$ and $\tau \leq \tau_1$. In this case $\bar{\psi} \in C([0, \tau])$ ($\tau \leq \tau_0$) and $\bar{\psi}(0) = 0$. There exists a number $\tau_1 \leq \tau_0$ such that $\|B^{-1}(t)\bar{\psi}\|_{C([0, \tau_1])} \leq R_0/2$. Note that $R(0) = B^{-1}(t)\bar{\psi}(t)$. Next, we obtain estimates assuming that $\bar{\mu} \in B_{R_0}$ and $\tau \leq \tau_1$. We have

$$\begin{aligned} \|R(\bar{\mu}_1) - R(\bar{\mu}_2)\|_{C([0, \tau])} &\leq \sum_{j=1}^s \sum_{i=r+1}^{\eta_j} \|(\mu_{1i} - \mu_{2i})f_i(t, b_j)\tilde{\psi}_j'\|_{C([0, \tau])} + \\ &\sum_{i=1}^s \|A_0v_1(t, b_i) - A_0v_2(t, b_i)\|_{C([0, \tau])} + \sum_{i=1}^s \sum_{k=1}^r \|\mu_{1k}A_kv_1(t, b_i) - \mu_{2k}A_kv_2(t, b_i)\|_{C([0, \tau])}. \end{aligned} \quad (25)$$

Next, we employ the conditions on the data and the embedding $W_p^\theta(G) \subset C(\bar{G})$ for $\theta > n/p$ (see Theorems 4.6.1, 4.6.2 in [30]). Take $\theta \in (n/p, 1 - 2/p)$. Consider the last summand. We have

$$\begin{aligned} \|\mu_{1k}A_kv_1(t, b_i) - \mu_{2k}A_kv_2(t, b_i)\|_{C([0, \tau])} &\leq \|(\mu_{1k} - \mu_{2k})(A_kv_1(t, b_i) + A_kv_2(t, b_i))\|_{C([0, \tau])} / 2 + \\ &+ \left\| \frac{(\mu_{1k} + \mu_{2k})}{2} (A_k(v_1(t, b_i) - v_2(t, b_i))) \right\|_{C([0, \tau])} \leq \\ &\|\mu_{1k} - \mu_{2k}\|_{C([0, \tau])} c_4 \sum_{|\alpha| \leq 2} \|D^\alpha(v_1(t, b_j) + v_2(t, b_j))\|_{C([0, \tau])} + \\ &\|\mu_{1k} + \mu_{2k}\|_{C([0, \tau])} c_5 \sum_{|\alpha| \leq 2} \|D^\alpha v_1(t, b_j) - D^\alpha v_2(t, b_j)\|_{C([0, \tau])} \leq \\ &\|\mu_{1k} + \mu_{2k}\|_{C([0, \tau])} c_7 \|\varphi(v_1(t, x) - v_2(t, x))\|_{C([0, \tau]; W_p^{2+\theta}(G))}, \end{aligned} \quad (26)$$

where the constant c_i are independent of τ . Let $v \in H^\tau$. In this case $\varphi v \in L_p(0, \tau; W_p^3(G))$, $\varphi v_t \in L_p(0, \tau; W_p^1(G))$ and thereby $\varphi v \in C([0, \tau]; W_p^{3-2/p}(G))$ (see Theorem III 4.10.2 in [29] and [30]).

The inequality

$$\|\varphi v\|_{C([0, \tau]; W_p^{3-2/p}(G))} \leq c_8 \left(\|\varphi v\|_{L_p(0, \tau; W_p^3(G))} + \|\varphi v_t\|_{L_p(0, \tau; W_p^1(G))} \right), \quad (27)$$

is valid, where the constant c_8 is independent of $\tau \in (0, T]$. Indeed, consider the function $w(t, x) = v(t, x)$ for $t \leq \tau$, $w(t, x) = v(2\tau - t, x)$ for $t \in (\tau, 2\tau)$ and $w(t, x) = 0$ for $t \geq 2\tau$. We use the

fact that $v(0, x) = 0$. Next, we write out (27) on $[0, T]$ for the function w , the constant in this inequality is independent of τ . Next, we estimate the right-hand side of the inequality obtained from above with the use of the definition of w and obtain that the constant c_8 in (27) is independent of τ . Let $\theta_1(3 - 2/p) = 2 + \theta$. We have that $\theta_1 \in (0, 1)$. Denote $\omega = v_2 - v_1$. Next, we use the interpolation properties of the Sobolev spaces [30] and (27). We infer

$$\begin{aligned} \|\varphi\omega\|_{C([0,\tau];W_p^{2+\theta}(G))} &\leq c\|\varphi\omega\|_{C([0,\tau];W_p^{3-2/p}(G))}^{\theta_1}\|\varphi\omega\|_{C([0,\tau];L_p(G))}^{1-\theta_1} \\ c_1\tau^\gamma\|\varphi\omega_t\|_{L_p(0,\tau;L_p(G))}^{1-\theta_1}\|\varphi\omega\|_{H^\tau}^{\theta_1} &\leq c_2\tau^\gamma\|\varphi\omega\|_{H^\tau}, \gamma = (1-1/p)(1-\theta_1), \end{aligned} \quad (28)$$

where we employ the obvious inequality

$$\|v\|_{C([0,\tau];L_p(G))} \leq \tau^{1-1/p}\|v_t\|_{L_p(0,\tau;L_p(G))}, v(0) = 0.$$

The inequality (28) yields

$$\|\varphi\omega\|_{C([0,\tau];W_p^{2+\theta}(G))} \leq c_9\tau^\gamma\|\varphi\omega\|_{H^\tau}, \quad (29)$$

where the constant c_9 is independent of τ . Аналогично получим

$$\|\varphi(v_1 + v_2)\|_{C([0,\tau];W_p^{2+\theta}(G))} \leq c_9\tau^\gamma\|\varphi(v_1 + v_2)\|_{H^\tau}.$$

In view of the inequalities (17), (18) (written for the functions v_i), (21), (26), and (29), we conclude that

$$\|\mu_{1k}A_kv_1(t, b_i) - \mu_{2k}A_kv_2(t, b_i)\|_{C([0,\tau])} \leq c_{13}\tau^\gamma\|\mu_{1k} - \mu_{2k}\|_{C([0,\tau])}, \quad (30)$$

where c_{12} is independent of $\tau \leq \tau_1$ (it depends on R_0). Similar estimate holds for the second summand in (25). The first summand is estimated by

$$\sum_{j=1}^s \sum_{i=r+1}^{\eta_1} \|(\mu_{1i} - \mu_{2i})f_i(t, b_j)\tilde{\psi}'_j\|_{C([0,\tau])} \leq c_{14}\|\bar{\mu}_1 - \bar{\mu}_2\|_{C([0,\tau])} \left(\sum_{j=1}^s \|\tilde{\psi}'_j\|_{C([0,\tau])} \right). \quad (31)$$

The final estimate is of the form (see (25))

$$\|R(\bar{\mu}_1) - R(\bar{\mu}_2)\|_{C([0,\tau])} \leq \|\mu_{1k} - \mu_{2k}\|_{C([0,\tau])} c_{15} \left(\tau^\gamma + \sum_{j=1}^s \|\tilde{\psi}'_j\|_{C([0,\tau])} \right). \quad (32)$$

Choosing $\tau_2 \leq \tau_1$ such that $c_{15} \left(\tau^\gamma + \sum_{j=1}^s \|\tilde{\psi}'_j\|_{C([0,\tau])} \right) \leq \frac{1}{2}$ for $\tau \leq \tau_2$, we have proven that R is a contraction and takes the ball B_{R_0} into itself for $\tau \leq \tau_2$. The fixed point theorem implies the existence of a solution to the system (24). Let $v = v(\bar{\mu})$. Show that this function satisfies the overdetermination conditions in (15). Take $x = b_j$ in (14). We obtain the system

$$c(t, b_j)v_t(t, b_j) + Av(t, b_j) = \sum_{i=1}^r \mu_i A_i(t, b_j, D)\Phi + \sum_{i=r+1}^{\eta_1} f_i \mu_i \Phi_i(t, b_j) + \sum_{j=\eta_1+1}^s f_j(t, b_j)\mu_j(t). \quad (33)$$

Subtracting these equalities from (21), we infer $v_t(t, b_j) - \psi_j' = 0$ for all j and thereby these conditions are fulfilled. Uniqueness of a solution follows from the estimates exhibited above.

Remark 2. The corresponding stability estimate for solutions also holds.

The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme No. FENG-2023-0004, "Analytical and numerical study of inverse problems on recovering parameters of atmosphere or water pollution sources and (or) parameters of media").

References

1. Permyakov, P.P. *Identification of Parameters of the Mathematical Model of Heat and Moisture Transfer in Frozen Soils*, Novosibirsk, Nauka Publ., 1989, 83 p. (in Russ.).
2. Prilepko A.I., Orlovsky D.G., Vasin I.A. *Methods for Solving Inverse Problems in Mathematical Physics*, New York: Marcel Dekker, Inc., 1999. 744 p. DOI: 10.1201/9781482292985
3. Belov Ya.Ya. *Inverse Problems for Parabolic Equations*. Utrecht, VSP, 2002, 211 p.
4. Isakov V. *Inverse Problems for Partial Differential Equations*. Springer Cham, 2018, 406 p. DOI: 10.1007/978-3-319-51658-5
5. Kabanikhin S.I. *Inverse and Ill-posed Problems: Theory and Applications*. Berlin, Boston: De Gruyter, 2011, 459 p. DOI: 10.1515/9783110224016
6. Klibanov M.V., Li J. *Inverse Problems and Carleman Estimates: Global Uniqueness, Global Convergence and Experimental Data*. Berlin, Boston: De Gruyter, 2021, 344 p. DOI: 10.1515/9783110745481
7. Hussein M.S., Huntul M.J. *Simultaneous Identification of Thermal Conductivity and Heat Source in the Heat Equation*. Iraqi Journal of Science, 2021, Vol. 62, no. 6, pp. 1968–1978.
8. Hussein M.S., Lesnic D., Ivanchov M.I. Simultaneous Determination of Time-Dependent Coefficients in the Heat Equation. *Computers and Mathematics with Applications*, 2014, Vol. 67, Iss. 5, pp. 1065–1091. DOI: 10.1016/j.camwa.2014.01.004
9. Ivanchov M. *Inverse Problems for Equations of Parabolic Type*. Math. Studies. Monograph Series, Vol. 10, Lviv: WNTL Publishers, 2003.
10. Ivanchov N.I., Pabyrivska N.V. On Determination of Two Time-Dependent Coefficients in a Parabolic Equation. *Siberian Mathematical Journal*, 2002, Vol. 43, pp. 323–329. DOI: 10.1023/A:1014749222472
11. Iskenderov A.D. Multi-Dimensional Inverse Problems for Linear and Quasilinear Parabolic Equations. *Sov. Math. Dokl.*, 1975, Vol. 16, pp. 1564–1568.
12. Iskenderov A.D., Akhundov A.Ya. Inverse Problem for a Linear System of Parabolic Equations. *Doklady Mathematics*, 2009, Vol. 79, no. 1, pp. 73–75. DOI: 10.1134/S1064562409010219
13. Frolenkov I.V., Romanenko G.V. On the Solution of an Inverse Problem for a Multidimensional Parabolic Equation. *Sibirskii Zhurnal Industrial'noi Matematiki*, 2012, Vol. 15, no. 2 (50), pp. 139–146. (in Russ.).
14. Pyatkov S.G., Samkov M.L. On some Classes of Coefficient Inverse Problems for Parabolic Systems of Equations. *Siberian Advances in Mathematics*, 2012, Vol. 22, no. 4, pp. 287–302.
15. Pyatkov S.G., Tsybikov B.N. On Some Classes of Inverse Problems for Parabolic and Elliptic Equations. *J. Evol. Equat.*, 2011, Vol. 11, no. 1, pp. 155–186.
16. Pyatkov S.G. On Some Classes of Inverse Problems for Parabolic Equations. *J. Inv. Ill-Posed problems*, 2011, Vol. 18, no. 8, pp. 917–934.
17. Pyatkov S.G. On Some Classes of Inverse Problems with Overdetermination Data on Spatial Manifolds. *Siberian Mathematical Journal*, 2016, Vol. 57, no. 5, pp. 870–880.
18. Kozhanov A.I. The Heat Transfer Equation with an Unknown Heat Capacity Coefficient. *Journal of Applied and Industrial Mathematics*, 2020, Vol. 14, no. 1, pp. 104–114.
19. Kozhanov A.I. Parabolic Equations with an Unknown Coefficients Depending on Time. *Comput. Math. Math. Phys.*, 2005, Vol. 45, no. 12, pp. 2085–2101.
20. Kamynin V.L. Unique Solvability of the Inverse Problem of Determination of the Leading Coefficient in a Parabolic Equation. *Differential Equations*, 2011, Vol. 47, no. 1, pp. 91–101.
21. Pyatkov S.G., Rotko V.V. Inverse Problems with Pointwise Overdetermination for some Quasilinear Parabolic Systems. *Siberian Advances in Mathematics*, 2020, Vol. 30, no. 2, pp. 124–142.
22. Pyatkov S.G., Rotko V.V. On some Parabolic Inverse Problems with the Pointwise Overdetermination. *AIP Conference Proceedings*, 2017, Vol. 1907, 020008. DOI: 10.1063/1.5012619
23. Pyatkov S.G. Identification of Thermophysical Parameters in Mathematical Models of Heat and Mass Transfer. *Journal of Computational and Engineering Mathematics*, 2022, Vol. 9, no. 2, pp. 52–66.
24. Denk R., Hieber M., Prüss J. Optimal L^p - L^q -Estimates for Parabolic Boundary Value Problems with Inhomogeneous Data. *Mathematische Zeitschrift*, 2007, Vol. 257, no. 1, pp. 93–224. DOI: 10.1007/s00209-007-0120-9

25. Ladyzhenskaya O.A., Solonnikov V.A., Ural'tseva N.N. Linear and Quasi-linear Equations of Parabolic Type. *Translations of Mathematical Monographs*, 1968, Vol. 23, 648 p. DOI: 10.1090/mmono/023

26. Amann H. Compact Embeddings of Vector-Valued Sobolev and Besov Spaces. *Glasnik matematički*, 2000, Vol. 35, no. 1, pp. 161–177.

27. Mikhailov V.P. *Partial Differential Equations*. Moscow, Mir Publ., 1978, 396 p.

28. Nikol'skiĭ S.M. *Approximation of Functions of Several Variables and Imbedding Theorems*. Grundle Math. Wissensch., 205, Springer-Verlag, New York, 1975, 418 p.

29. Amann H. *Linear and Quasilinear Parabolic Problems. Vol. I: Abstract Linear Theory*. Monographs in Mathematics, Vol. 89, Birkhäuser Verlag Basel 1995, 338 p. DOI: 10.1007/978-3-0348-9221-6

30. Triebel H. *Interpolation Theory, Function Spaces, Differential Operators*. Berlin, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1978, 528 p. DOI: 10.1002/zamm.19790591227

Received May 5, 2023

Information about the authors

Pyatkov Sergey Grigorievich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, School of Digital Engineering, Yugra State University, Khanty-Mansiysk, Russian Federation, e-mail: s_pyatkov@ugrasu.ru.

Soldatov Oleg Al'bertovich is Post-graduate Student, Yugra State University, Khanty-Mansiisk, Russian Federation, e-mail: Oleg.soldatov.97@bk.ru.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2023, vol. 15, no. 3, pp. 23–33

УДК 517.956

DOI: 10.14529/mmph230303

О НЕКОТОРЫХ КЛАССАХ ОБРАТНЫХ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ ЗАДАЧ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ТЕРМОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ

С.Г. Пятков, О.А. Солдатое

Югорский государственный университет, г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация

E-mail: s_pyatkov@ugrasu.ru

Аннотация. В работе мы рассматриваем вопросы регулярной разрешимости в соболевских пространствах обратных коэффициентных параболических задач. Решение ищется в классе регулярных решений, которые имеют все производные, входящие в уравнение суммируемые с некоторой степенью. В качестве условия переопределения берутся значения решения в некотором наборе точек, лежащих внутри области. Доказательство основано на априорных оценках и теореме о неподвижной точке.

Ключевые слова: параболическое уравнение; обратная задача; начально-краевая задача; существование, единственность.

Литература

1. Пермяков, П.П. Идентификация параметров математической модели теплового переноса в мерзлых грунтах / П.П. Пермяков. – Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние, 1989. – 83 с.

2. Prilepko, A.I. Methods for Solving Inverse Problems in Mathematical Physics / A.I. Prilepko, D.G. Orlovsky, I.A. Vasin. – New York: Marcel Dekker, Inc., 1999. – 744 p.

3. Belov, Ya.Ya. Inverse problems for parabolic equations / Ya.Ya. Belov. – Utrecht: VSP, 2002. – 211 p.

4. Isakov, V. Inverse Problems for Partial Differential Equations / V. Isakov. – Springer Cham, 2018. – 406 p.

5. Kabanikhin, S.I. Inverse and Ill-posed Problems: Theory and Applications / S.I. Kabanikhin. – Berlin, Boston: De Gruyter, 2011. – 459 p.

6. Klibanov, M.V. Inverse Problems and Carleman Estimates: Global Uniqueness, Global Convergence and Experimental Data / M.V. Klibanov, J. Li. – Berlin, Boston: De Gruyter, 2021. – 344 p.
7. Hussein, M.S. Simultaneous Identification of Thermal Conductivity and Heat Source in the Heat Equation / M.S. Hussein, M.J. Huntul // *Iraqi Journal of Science*. – 2021. – Vol. 62, no. 6. – P. 1968–1978.
8. Hussein, M.S. Simultaneous Determination of Time-Dependent Coefficients in the Heat Equation / M.S. Hussein, D. Lesnic, M.I. Ivanchov // *Computers and Mathematics with Applications*. – 2014. – Vol. 67, Iss. 5. – P. 1065–1091.
9. Ivanchov, M. Inverse Problems for Equations of Parabolic Type / M. Ivanchov // *Math. Studies. Monograph Series*. – Lviv: WNTL Publishers, 2003. – Vol. 10.
10. Ivanchov, N.I. On Determination of Two Time-Dependent Coefficients in a Parabolic Equation / N.I. Ivanchov, N.V. Pabyrivska // *Siberian Mathematical Journal*. – 2002. – Vol. 43. – P. 323–329.
11. Iskenderov, A.D. Multidimensional Inverse Problems for Linear and Quasi-Linear Parabolic Equations / A.D. Iskenderov // *Dokl. Akad. Nauk SSSR*. – 1975. – Vol. 225. – P. 1005–1008.
12. Iskenderov, A.D. Inverse Problem for a Linear System of Parabolic Equations / A.D. Iskenderov, A.Ya. Akhundov // *Doklady Mathematics*. – 2009. – Vol. 79, no. 1. – P. 73–75. DOI: 10.1134/S1064562409010219
13. Фроленков, И.В. О решении одной обратной задачи для многомерного параболического уравнения / И.В. Фроленков, Г.В. Романенко // *Сиб. журн. индустр. Матем.* – 2012. – Т. 15, № 2. – С. 139–146.
14. Пятков, С.Г. О некоторых классах коэффициентных обратных задач для параболических систем уравнений / С.Г. Пятков, М.Л. Самков // *Матем. тр.* – 2012. – Т. 15, № 1. – С. 155–177.
15. Pyatkov, S.G. On some classes of inverse problems for parabolic and elliptic equations / S.G. Pyatkov, B.N. Tsybikov // *J. Evol. Equat.* – 2011. – Vol. 11, no. 1. – P. 155–186.
16. Pyatkov, S.G. On Some Classes of Inverse Problems for Parabolic Equations / S.G. Pyatkov // *J. Inv. Ill-Posed problems*. – 2011. – Vol. 18, no. 8. – P. 917–934.
17. Пятков, С.Г. О некоторых классах обратных задач с данными переопределения на пространственных многообразиях / С.Г. Пятков // *Сиб. матем. журн.* – 2016. – Т. 57, № 5. – P. 1114–1126.
18. Кожанов, А.И. Уравнение теплопроводности с неизвестным коэффициентом теплоёмкости / А.И. Кожанов // *Сиб. журн. индустр. матем.* – 2020. – Т. 23, № 1. – С. 93–106.
19. Кожанов, А.И. Параболические уравнения с неизвестным коэффициентом, зависящим от времени / А.И. Кожанов // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* – 2005. – Т. 45, № 12. – С. 2168–2184.
20. Камынин, В.Л. Об однозначной разрешимости обратной задачи определения старшего коэффициента в параболическом уравнении. Дифференциальные уравнения. – 2011. – Т. 47, № 1. – С. 92–102.
21. Pyatkov, S.G. Inverse Problems with Pointwise Overdetermination for Some Quasilinear Parabolic Systems / S.G. Pyatkov, V.V. Rotko // *Mat. Tr.* – 2019. – Vol. 22, no. 1. – P. 178–204.
22. Pyatkov, S.G. On some Parabolic Inverse Problems with the Pointwise Overdetermination / S.G. Pyatkov, V.V. Rotko // *AIP Conference Proceedings*. – 2017. – Vol. 1907. – 020008.
23. Pyatkov, S.G. Identification of Thermophysical Parameters in Mathematical Models of Heat and Mass Transfer / S.G. Pyatkov // *Journal of Computational and Engineering Mathematics*. – 2022. – Vol. 9, no. 2. – P. 52–66.
24. Denk, R. Optimal L^p - L^q -Estimates for Parabolic Boundary Value Problems with Inhomogeneous Data / R. Denk, M. Hieber, J. Prüss // *Mathematische Zeitschrift*. – 2007. – Vol. 257, no. 1. – P. 93–224.
25. Ladyzhenskaya, O.A. Linear and Quasi-linear Equations of Parabolic Type / O.A. Ladyzhenskaya, V.A. Solonnikov, N.N. Uraltseva // *Translations of Mathematical Monographs*. – 1968. – Vol. 23. – 648 p.
26. Amann, H. Compact Embeddings of Vector-Valued Sobolev and Besov Spaces / H. Amann // *Glasnik matematički*. – 2000. – Vol. 35, no. 1. – P. 161–177.
27. Mikhailov, V.P. Partial Differential Equations / V.P. Mikhailov. – Moscow: Mir, 1978. – 396 p.
28. Nikol'skiĭ, S.M. Approximation of Functions of Several Variables and Imbedding Theorems / S.M. Nikol'skiĭ // *Grundle Math. Wissensch.*, 205. – Springer-Verlag, New York, 1975. – 418 p.

29. Amann, H. Linear and Quasilinear Parabolic Problems. Vol. I: Abstract Linear Theory / H. Amann // Monographs in Mathematics. Vol. 89. – Birkhäuser Verlag Basel, 1995. – 338 p.

30. Triebel, H. Interpolation Theory, Function Spaces, Differential Operators / H. Triebel. – Berlin, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1978. – 528 p.

Поступила в редакцию 5 мая 2023 г.

Сведения об авторах

Пятков Сергей Григорьевич – доктор физико-математических наук, профессор, Инженерная школа цифровых технологий, Югорский государственный университет, г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация, e-mail: s_pyatkov@ugrasu.ru.

Солдатов Олег Альбертович – аспирант, Югорский государственный университет, г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация, e-mail: Oleg.soldatov.97@bk.ru.

ТЕЧЕНИЕ ГАРТМАНА В СЛОЕ ЖИДКОСТИ С ПРОСТРАНСТВЕННО НЕОДНОРОДНЫМИ СВОЙСТВАМИ

Р.С. Окатьев^{1,2}, П.Г. Фрик^{1,2}, И.В. Колесниченко¹

¹ Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь, Российская Федерация

² Пермский государственный национальный исследовательский университет, г. Пермь, Российская Федерация

E-mail: okatev.r@icmm.ru

Аннотация. Рассмотрена задача о течении пространственно неоднородной электропроводной жидкости между параллельными плоскостями, перпендикулярно которым наложено магнитное поле. Распределения электропроводности и вязкости жидкости задаются линейными по толщине слоя функциями. Угловой коэффициент распределений характеризует максимальное отклонение свойств жидкости от соответствующих средних значений. Показано, что наличие неоднородности свойств жидкости приводит к искажению профилей скорости. Полученные профили характеризуются асимметрией и наличием точек перегиба. В качестве количественной меры асимметрии введена величина, равная отношению расходов в верхней и нижней половинах слоя. Определена зависимость этой величины от среднего числа Гартмана и параметров распределений неоднородности свойств. Показано, что начиная с некоторого относительно небольшого значения среднего числа Гартмана точки перегиба в профилях скорости появляются при любых значениях параметров распределений. Приведены оценки характерных перепадов температур и концентраций непроводящей примеси для жидкого натрия, при которых проявляются описанные эффекты.

Ключевые слова: магнитная гидродинамика; течение Гартмана; неоднородные свойства; электропроводность.

Введение

Магнитное поле оказывает существенное воздействие на течения проводящих сред. Классическим примером изменения профиля скорости потока под действием магнитного поля является задача Гартмана о течении проводящей жидкости между параллельными плоскостями, перпендикулярно которым наложено магнитное поле [1]. Важно, что магнитное поле не только уплощает профиль скорости, концентрируя вязкие напряжения в пограничных слоях, которые становятся все уже по мере роста магнитного поля, но и существенно сдвигает порог устойчивости, что было обнаружено в первом же экспериментальном исследовании течения ртути в поперечном магнитном поле [2]. Систематические исследования зависимости границы устойчивости при течении ртути в каналах прямоугольного сечения в поперечном магнитном поле показали, что критическое число Рейнольдса Re^* ($Re = Uh/\nu$, где U – средняя скорость потока, h – полуширина слоя, а ν – кинематическая вязкость жидкости) растет линейно с ростом числа Гартмана ($Ha = Bh\sqrt{\sigma/\eta}$, где B – индукция наложенного магнитного поля, σ – электрическая проводимость, η – динамическая вязкость жидкости), то есть $Re^*/Ha = C$, и константа C при увеличении отношения размера канала поперек поля к размеру вдоль поля (то есть при приближении к случаю неограниченного слоя) $C \approx 215$ [3]. Отметим, что число Рейнольдса, отнесенное к числу Гартмана, является, по сути, числом Рейнольдса, в котором в качестве масштаба использована толщина гартмановского пограничного слоя. Таким образом, полученный результат означает, что устойчивость всего течения определяется устойчивостью пограничного слоя.

Дальнейшие эксперименты с различными металлами и каналами, выполненные в различных диапазонах значений индукции магнитного поля, позволили принять, что для широкого класса течений и $Ha > 20$ можно пользоваться оценкой $200 < C < 400$ [4, 5]. Эта оценка указывает на то,

что в сильных магнитных полях течения металла могут оставаться ламинарными даже при очень больших значениях числа Рейнольдса. Так, в проектируемых жидкометаллических элементах охлаждения токамаков ожидаемые числа Гартмана достигают 10^4 , что сдвигает границу устойчивости до $Re \sim 10^6$ и выше. Однако именно исследования течений жидкого металла в контексте возможности их использования в охлаждающих системах термоядерных установок показали, что влияние магнитного поля не столь однозначно и в течениях с большими перепадами температуры возникают пульсации температуры (и скорости), значительно превосходящие даже те, что могли бы быть в отсутствие магнитного поля [6, 7]. Так, в случае опускного течения ртути в подогреваемом с одной стороны вертикальном канале колебания температуры при сильном нагреве подавляются только при $Ha > Re/10$ [8], то есть для ламинаризации потока магнитное поле должно быть на порядок сильнее, чем в отсутствие нагрева. Эти пульсации температуры получили название магнитоconvективных, и их возникновение было объяснено тем, что в результате действия электромагнитных сил и сил плавучести происходит трансформация профиля скорости, в котором появляются точки перегиба, способствующие развитию неустойчивости (см. обзор [5]).

Цель данной работы состоит в том, чтобы выяснить, насколько неоднородности свойств жидкого металла в слое могут исказить гартмановский профиль скорости и могут ли эти искажения сопровождаться появлением точек перегиба. Точки перегиба не являются достаточным условием возникновения неустойчивости, но могут способствовать ей. Ниже будет рассмотрена стандартная задача Гартмана о течении жидкости в поперечном магнитном поле с учетом возможных вариаций проводимости и вязкости жидкости поперек слоя.

Неоднородность свойств жидкости может быть вызвана, к примеру, вариациями температуры или наличием примесей. В данной работе вопрос о причинах возникновения неоднородности не обсуждается и не рассматриваются эффекты, связанные с изменением плотности и появлением сил плавучести. Это сделано сознательно, чтобы разобраться с изолированным эффектом. Однако стоит отметить, что мотивацией для изучения этой задачи послужили разработки различных систем МГД-перемешивания [9, 10] и МГД-сепарации металлов с примесями [11, 12], в которых возникают потребности как в интенсификации перемешивания потока в магнитном поле (турбулизации потока в режимах, когда он остается ламинарным под действием поля), так и, наоборот, в подавлении интенсивного перемешивания примеси.

Задача Гартмана

Рассматривается одномерное течение жидкости $\mathbf{v} = \{V(z), 0, 0\}$ в плоском слое, ограниченном двумя параллельными плоскостями, находящимися на расстоянии $2h$ друг от друга в поперечном магнитном поле $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ (рис. 1). Движение жидкости вызвано перепадом давления, имеющим заданный градиент ∇p .

В отсутствие внешнего электрического поля выражение для электромагнитной силы принимает вид

$$\mathbf{F}^{em} = \mathbf{j} \times \mathbf{B} = \sigma B^2 (\mathbf{v} \times \mathbf{e}_z) \times \mathbf{e}_z, \quad (1)$$

что позволяет записать безразмерные уравнения Навье–Стокса для несжимаемой жидкости в виде

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = Pe \mathbf{e}_x + \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{v} + \frac{Ha^2}{Re} (\mathbf{v} \times \mathbf{e}_z) \times \mathbf{e}_z, \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (2)$$

В качестве единиц измерения длины, скорости, времени, давления и индукции магнитного поля выбраны соответственно величины h , U , h/U , ρU^2 и B , где U – средняя скорость течения, ρ – плотность жидкости. В уравнения входят безразмерный приложенный градиент давления P и два безразмерных параметра – число Гартмана

$$Ha = Bh\sqrt{\sigma/\eta}, \quad (3)$$

квадрат которого определяет отношение электромагнитных сил к силам вязкости и число Рейнольдса

$$Re = \frac{Uh\rho}{\eta}. \quad (4)$$

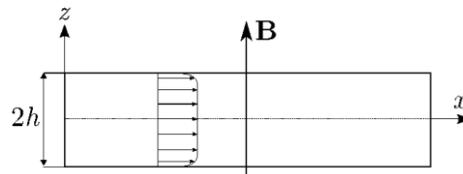


Рис. 1. Задача Гартмана с характерным профилем скорости для однородной среды

В стационарном случае задача (2) сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению

$$V'' = -\text{Re} P + \text{Ha}^2 V. \quad (5)$$

Здесь штрихом сверху обозначена производная по координате z . Решение этого уравнения с учетом граничных условий $V(-1) = V(1) = 0$ было получено Гартманом [1] и имеет вид

$$V(z) = \frac{\text{Re} P}{\text{Ha}^2} \left(1 - \frac{\text{ch}(\text{Ha}z)}{\text{ch}(\text{Ha})} \right). \quad (6)$$

Интегрирование этого решения с учетом нормировки расхода

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 V(z) dz = 1 \quad (7)$$

позволяет избавиться от градиента давления и дает окончательный профиль скорости в виде

$$V(z) = \frac{\text{Ha}}{\text{Ha} - \text{th}(\text{Ha})} \left(1 - \frac{\text{ch}(\text{Ha}z)}{\text{ch}(\text{Ha})} \right), \quad (8)$$

откуда следует, что число Рейнольдса не влияет на профиль скорости.

Неоднородное распределение свойств жидкости

Неоднородность свойств жидкости (конкретно, вязкости и проводимости) поперек слоя может существенно влиять на профиль скорости течения. Неоднородность может быть вызвана, к примеру, вариациями температуры или наличием примесей. В данной работе вопрос о причинах возникновения неоднородности не обсуждается, но рассматриваются эффекты, которые такая неоднородность может вызвать.

В случае пространственно неоднородных вязкости и проводимости уравнение Навье–Стокса (2) переписывается в виде

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = P \mathbf{e}_x + \frac{1}{\text{Re}_0} \xi \Delta \mathbf{v} + \frac{1}{\text{Re}_0} \nabla \xi \cdot \nabla \mathbf{v} + \phi \frac{\text{Ha}_0^2}{\text{Re}_0} (\mathbf{v} \times \mathbf{e}_z) \times \mathbf{e}_z. \quad (9)$$

Здесь $\xi = \eta(\mathbf{r})/\eta_0$ и $\phi = \sigma(\mathbf{r})/\sigma_0$ – безразмерные вязкость и проводимость соответственно, а нижний индекс у чисел Гартмана и Рейнольдса означает, что они определяются по средней проводимости σ_0 и средней вязкости η_0 .

Уравнение для определения стационарного профиля скорости в задаче Гартмана с учетом неоднородных свойств жидкости запишется в виде

$$V'' = -\frac{\text{Re}_0 P}{\xi} + \text{Ha}_0^2 \left(\frac{\phi}{\xi} \right) V - \frac{d \ln \xi}{dz} V'. \quad (10)$$

Для решения уравнения (10) необходимо задать вид распределений свойств жидкости поперек потока $\xi(z)$ и $\phi(z)$. Одним из наиболее простых вариантов неоднородного распределения свойств в потоке является линейная зависимость проводимости и вязкости от поперечной координаты. Выберем эту зависимость в таком виде, что при $z=0$ значения обеих характеристик совпадают со средними значениями

$$\phi(z) = 1 + k_\sigma z, \quad (11)$$

$$\xi(z) = 1 + k_\eta z. \quad (12)$$

Параметры k_σ и k_η характеризуют степень отклонения соответствующей величины от ее среднего значения. К примеру, при $k_\eta = 0,1$ вязкость вблизи верхней стенки канала будет на 10 % больше среднего значения, а вблизи нижней стенки – на 10 % меньше.

При подстановке (11) и (12) в (10) получим

$$V'' = -\frac{\text{Re}_0 P}{1 + k_\eta z} + \text{Ha}_0^2 \left(\frac{1 + k_\sigma z}{1 + k_\eta z} \right) V - \frac{k_\eta}{1 + k_\eta z} V'. \quad (13)$$

В силу симметрии (уравнение инвариантно к преобразованию $\{z \rightarrow -z, k_\sigma \rightarrow -k_\sigma, k_\eta \rightarrow -k_\eta\}$) достаточно рассмотреть лишь положительные значения одного из параметров, а профили скорости для отрицательных значений этого параметра можно получить отражением относительно оси $z = 0$.

На рис. 2 приведены профили скорости для значений среднего числа Гартмана 5 и 25. При отсутствии неоднородности проводимости жидкости (случай а) отклонение от обычного гартмановского профиля определяется неоднородностью вязкости. С локальным увеличением числа Гартмана градиенты скорости в ядре течения уменьшаются, в связи с чем уменьшается влияние неоднородности вязкости на профиль скорости, и поэтому отклонения от профиля течения однофазной жидкости оказываются заметными лишь в пограничных слоях.

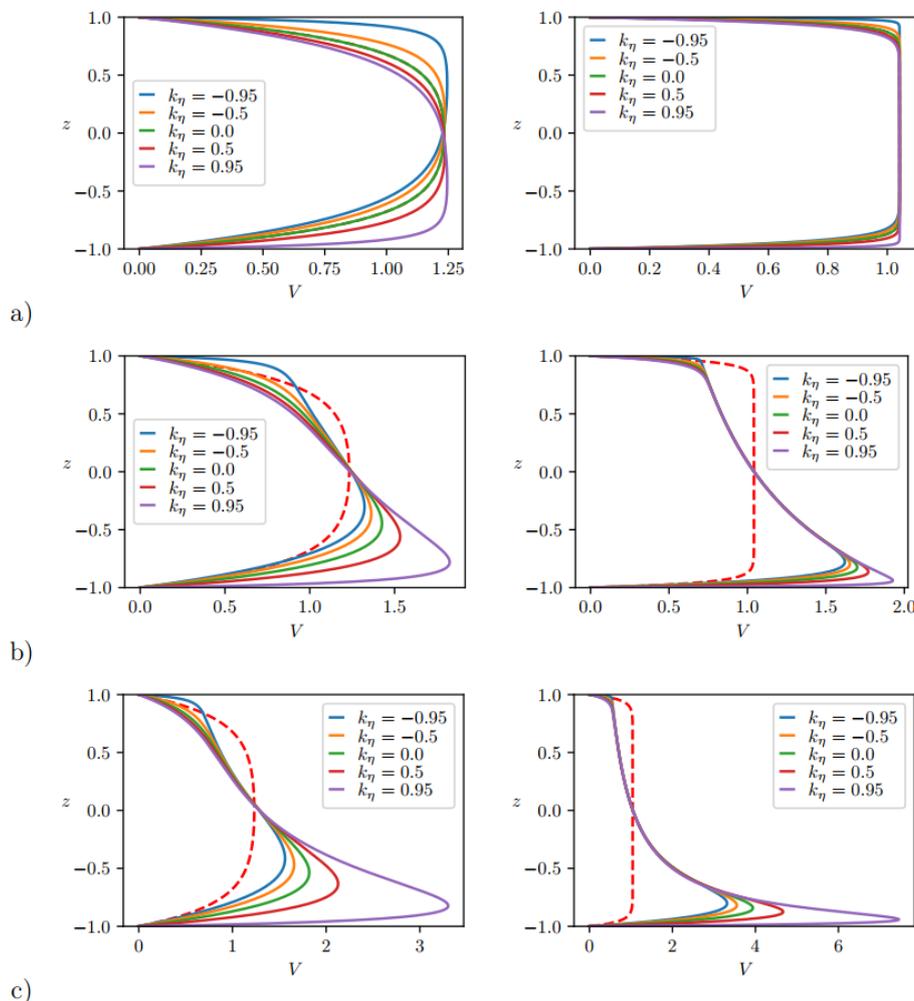


Рис. 2. Профили скорости при $\text{Ha} = 5$ (слева) и $\text{Ha} = 25$ (справа); а) $k_\sigma = 0$, б) $k_\sigma = 0,5$, в) $k_\sigma = 0,95$; красной пунктирной линией обозначен профиль скорости для течения Гартмана в случае жидкости с однородными свойствами

Представленные профили иллюстрируют появление несимметрии течения относительно центра канала. В качестве количественной характеристики отклонения от симметрии можно выбрать отношение расходов в верхней и нижней половинах канала

$$Q = \frac{\int_0^1 V(z) dz}{\int_{-1}^0 V(z) dz}, \quad (14)$$

распределение которого на плоскости параметров (k_σ, k_η) для различных значений числа Гартмана представлено на рис. 3. Белая линия на этих распределениях соответствует симметрии профиля скорости относительно центра канала. Показательными являются два предельных случая. В отсутствие внешнего поля неоднородность проводимости, очевидно, никак не влияет на течение жидкости и искажение профиля скорости определяется лишь неоднородностью вязкости. Напротив, при течении в сильном магнитном поле электромагнитные силы существенно превосходят вязкие силы и несимметрия профиля определяется неоднородностью электропроводности и практически не зависит от вязкости.

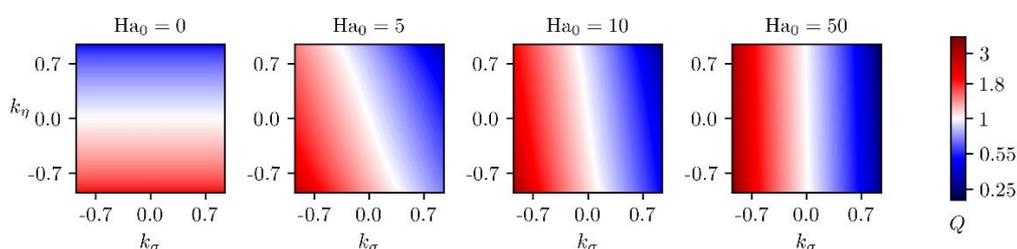


Рис. 3. Распределение относительного расхода Q на плоскости параметров неоднородности свойств жидкости (k_σ, k_η) при различных значениях среднего числа Гартмана. Цветовая шкала представлена в логарифмическом масштабе

Важной особенностью полученных профилей является появление точек перегиба, начиная с некоторых значений параметров, характеризующих неоднородность свойств. На рис. 4 показан пример для небольшого значения магнитного поля ($Ha_0 = 5$), при котором точки перегиба возникают только при значительной неоднородности проводимости среды. При малых Ha_0 существует диапазон значений параметров k_σ и k_η , в рамках которого точки перегиба в профиле скорости не появляются. С увеличением Ha_0 этот диапазон существенно снижается и при $Ha_0 \approx 10$ точки перегиба появляются при любых значениях параметров. Рис. 5 иллюстрирует рост второй производной с ростом параметра неоднородности k_η (левая панель), справа представлены границы появления точек перегиба на плоскости параметров (k_σ, k_η).

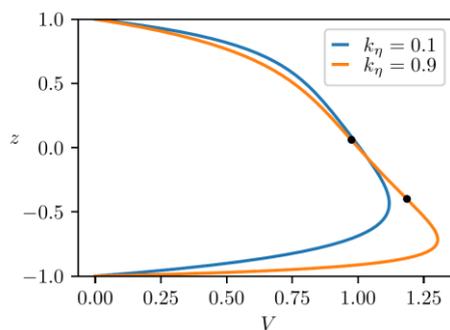


Рис. 4. Профили скорости при различных значениях параметра неоднородности вязкости, $Ha_0 = 5, k_\sigma = 0,4$: синим цветом показан профиль без точек перегиба, оранжевый профиль имеет две точки перегиба (на профиле обозначены черными точками)

Очевидно, что существуют распределения неоднородности свойств жидкости, при которых точки перегиба получаются при сколь угодно малых Ha_0 и любых ненулевых значениях параметров распределения. Такие неоднородности возникают при локальном изменении свойств во

внутренней точке потока. На практике такая ситуация наиболее интересна, так как возникает при впрыске примеси или локальном нагреве жидкости. Простейшей моделью локального изменения свойств может быть гауссово возмущение вида

$$\phi(z) = 1 + k_\sigma \exp\{-\delta z^2\}, \quad \xi(z) = 1 + k_\eta \exp\{-\delta z^2\}, \quad (15)$$

где δ характеризует ширину локализации неоднородности. Профили скорости, соответствующие такому распределению, всегда имеют точки перегиба (рис. б).

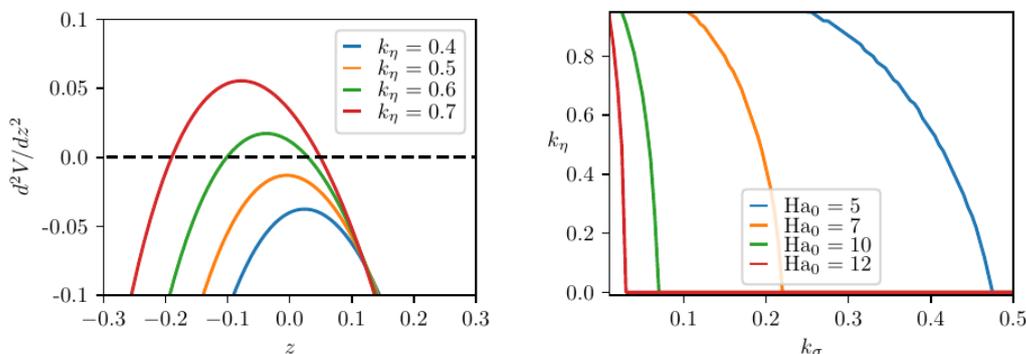


Рис. 5. Вторая производная профиля скорости при различных значениях параметра неоднородности вязкости для $Ha_0 = 5$ и $k_\sigma = 0,4$ (слева) и нейтральные кривые, характеризующие появление точек перегиба в профиле скорости, на плоскости параметров (k_σ, k_η) (справа)

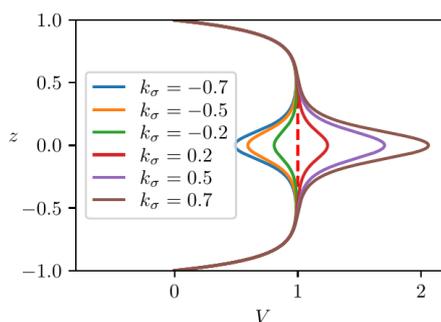


Рис. 6. Профили скорости с гауссовым распределением неоднородности свойств, $k_\eta = 0,1$, $Ha_0 = 10$

Обсуждение и выводы

Рассмотрено влияние неоднородности свойств проводящей жидкости поперек слоя на формирующийся в магнитном поле профиль скорости несжимаемой жидкости. Показано, что даже небольшие неоднородности электропроводности и вязкости могут приводить к существенной трансформации гартмановского профиля скорости, причем, даже простейшее линейное распределение характеристик жидкости поперек слоя может приводить к формированию профиля скорости с точками перегиба. Для линейной зависимости вязкости и электропроводности от поперечной координаты построена граница появления точек перегиба на плоскости параметров, определяющих максимальное отклонение обеих величин от среднего значения.

Представляет интерес оценка, насколько значимы должны быть вариации свойств жидкости, чтобы обсуждаемые эффекты стали заметны. Для определенности рассмотрим поток жидкого натрия при средней температуре 200°C . При такой температуре проводимость жидкого натрия составляет $7,81 \text{ МСм/м}$, а динамическая вязкость $4,52 \cdot 10^{-4} \text{ кг/м}\cdot\text{с}$. Примем для определенности, что ширина канала, по которому течет жидкость, составляет 10 см , и оценим перепады температуры поперек слоя, которые могут привести к появлению в профиле скорости точек перегиба. Для этого воспользуемся рис. 5 и проведем оценки для соответствующих значений числа Гартмана. Результаты оценок показаны в таблице, в которой представлены значения индукции магнитного поля, обеспечивающие в таком потоке соответствующие числа Гартмана, значения вариации проводимости, обеспечивающие появление точек перегиба и значения температуры на границах слоя, которые приведут к соответствующей вариации проводимости. По рис. 5 видно, что влияние вариаций вязкости в этом случае слабое и его можно не учитывать. Видно, что в

сильных магнитных полях эффект достигается при достаточно скромных перепадах температуры (при поле порядка 2 мТл точки перегиба возникают при разности температуры порядка 20 °С). Последняя колонка в таблице дает значение объемной доли непроводящей примеси, которая обеспечивает необходимую вариацию проводимости. Для последней оценки использована модель для эффективной проводимости среды с непроводящими частицами [13]

$$\sigma_e = \frac{2 - 2\varphi}{2 + \varphi} \sigma_0, \quad (16)$$

где φ – объемная доля непроводящих частиц. Приведенные оценки показывают, что при полях порядка 2 мТл для появления точек перегиба достаточно объемной доли примеси около 2 %.

Оценки характерных значений параметров для жидкого натрия

Na_0	B , мТл	k_σ	T^- , °С	T^+ , °С	φ^*
7	1,0	0,22	130÷140	290÷300	0,158
10	1,5	0,07	180÷190	230÷240	0,048
12	1,8	0,025	190	210	0,017

Таким образом, точки перегиба в профиле скорости могут возникнуть при относительно небольших вариациях свойств проводящей жидкости даже при линейном распределении поперек слоя, а локализованные неоднородности (например гауссовы) всегда дают точки перегиба. Однако остается открытым важный вопрос о достаточном условии неустойчивости, то есть вопрос о реальной границе устойчивости таких течений. Ответ на него требует прямого численного решения полной системы уравнений либо лабораторных экспериментов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и Пермского края № 22-19-20106, <https://rscf.ru/project/22-19-20106/>.

Литература

1. Hartmann, J. Hg Dynamics I. Theory of the Laminar Flow of an Electrically Conductive Liquid in a Homogeneous Magnetic Field / J. Hartmann. – København: Levin & Munksgaard, Ejnar Munksgaard, 1937. – 28 p.
2. Hartmann, J. Hg Dynamics II. Experimental Investigations on the Flow of Mercury in a Homogeneous Magnetic Field / J. Hartmann, F. Lazarus. – København: Levin & Munksgaard, 1937. – 45 p.
3. Брановер, Г.Г. Магнитная гидродинамика несжимаемых сред / Г.Г. Брановер, А.Б. Цинобер. – М.: Наука, 1970. – 379 с.
4. Laminar-Turbulent Transition in Magnetohydrodynamic Duct, Pipe, and Channel Flows / O. Zikanov, D. Krasnov, T. Boeck *et al.* // Applied Mechanics Reviews. – 2014. – Vol. 66, no. 3. – 030802.
5. Mixed Convection in Pipe and Duct Flows with Strong Magnetic Fields / O. Zikanov, I. Belyaev, Y. Listratov *et al.* // Applied Mechanics Reviews. – 2021. – Vol. 73, no. 1. – 010801.
6. Experimental Investigation of MHD Heat Transfer in a Vertical Round Tube Affected by Transverse Magnetic Field / I.A. Melnikov, E.V. Sviridov, V.G. Sviridov, N.G. Razuvanov // Fusion Engineering and Design. – 2016. – Vol. 112. – P. 505–512.
7. Buoyancy Effects in Vertical Rectangular Duct with Coplanar Magnetic Field and Single Sided Heat Load – Downward and Upward Flow / I.R. Kirillov, D.M. Obukhov, V.G. Sviridov *et al.* // Fusion Engineering and Design. – 2018. – Vol. 127. – P. 226–233.
8. Limits of Strong Magneto-Convective Fluctuations in Liquid Metal Flow in a Heated Vertical Pipe Affected By Transverse Magnetic Field / I. Belyaev, P. Sardov, I. Melnikov, P. Frick // International Journal of Thermal Sciences. – 2021. – Vol. 161. – 106773.
9. The Effect of Traveling and Rotating Magnetic Fields on The Structure of Aluminum Alloy During its Crystallization in a Cylindrical Crucible / S. Denisov, V. Dolgikh, S. Khripchenko *et al.* // Magnetohydrodynamics. – 2014. – Vol. 50, no. 4. – P. 407–422.
10. Liquid Metal Flows Driven by Rotating and Traveling Magnetic Fields / J. Stiller, K. Koal, W.E. Nagel *et al.* // European Physical Journal: Special Topics. – 2013. – Vol. 220, no. 1. – P. 111–122. DOI: 10.1140/epjst/e2013-01801-8

11. Kolesnichenko, I. Investigation of Electromagnetic Force Action on Two-Phase Electrically Conducting Media in a Flat Layer / I. Kolesnichenko // *Magnetohydrodynamics*. – 2013. – Vol. 49, no. 1–2. – P. 217–222.

12. Application of Electromagnetic (EM) Separation Technology to Metal Refining Processes: A Review / L. Zhang, S. Wang, A. Dong *et al.* // *Metallurgical and Materials Transactions B*. – 2014. – Vol. 45. – P. 2153–2185.

13. Dobychnin, E.I. Force Action of an Electromagnetic Field on the Particles of an Inhomogeneous Medium / E.I. Dobychnin, V.I. Popov // *Magnetohydrodynamics*. – 1971. – Vol. 7, no. 2. – P. 163–166.

Поступила в редакцию 2 мая 2023 г.

Сведения об авторах

Окательев Роман Сергеевич – младший научный сотрудник, лаборатория технологической гидродинамики, Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь, Российская Федерация; Пермский государственный национальный исследовательский университет, г. Пермь, Российская Федерация, e-mail: okatev.r@icmm.ru.

Фрик Петр Готлобович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией физической гидродинамики, Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь, Российская Федерация; Пермский государственный национальный исследовательский университет, г. Пермь, Российская Федерация, e-mail: frick@icmm.ru.

Колесниченко Илья Владимирович – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией технологической гидродинамики, Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь, Российская Федерация, e-mail: kiv@icmm.ru.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2023, vol. 15, no. 3, pp. 34–42

DOI: 10.14529/mmp230304

HARTMANN FLOW IN A FLUID LAYER WITH SPATIALLY INHOMOGENEOUS PROPERTIES

R.S. Okatev^{1,2}, P.G. Frick^{1,2}, I.V. Kolesnichenko¹

¹ *Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russian Federation*

² *Perm State University, Perm, Russian Federation*

E-mail: okatev.r@icmm.ru

Abstract. In this study we consider the flow of a spatially-inhomogeneous electrically conductive fluid between parallel planes in a transverse magnetic field. The distributions of electrical conductivity and viscosity of the fluid are given by linear functions. The slopes of these distributions characterize the maximum deviation of the fluid properties from their mean values. We show that inhomogeneity of the fluid properties leads to distortion of the velocity profiles. The resulting profiles are asymmetric and have inflection points. We use a quantity equal to the ratio of flow rates in the upper and lower halves of the layer as a quantitative measure of asymmetry. We determine the relationship between this quantity, the average Hartmann number, and the parameters of the distributions of inhomogeneous properties. We show that starting from a relatively small mean Hartmann number, the inflection points in the velocity profiles appear for any values of the distribution parameters. We provide estimates of characteristic temperatures and concentrations of non-conducting impurity for liquid sodium, at which the described effects appear.

Keywords: magnetohydrodynamics; Hartmann flow; inhomogeneous properties; electric conductivity.

References

1. Hartmann J. *Hg Dynamics I. Theory of the Laminar Flow of an Electrically Conductive Liquid in a Homogeneous Magnetic Field*. København: Levin & Munksgaard, Ejnar Munksgaard, 1937, 28 p.

2. Hartmann, J., Freimut L. *Hg Dynamics II: Experimental Investigations on the Flow of Mercury in a Homogeneous Magnetic Field*. København: Levin & Munksgaard, 1937, 45 p.
3. Branover G.G., Tsynober A.B. *Magnitnaya gidrodinamika neszhimayemykh sred* (Magnetohydrodynamics of Incompressible Media), Moscow, Nauka Publ., 1970, 379 p.
4. Zikanov O., Krasnov D., Boeck T., Thess A., Rossi M. Laminar-Turbulent Transition in Magnetohydrodynamic Duct, Pipe, and Channel Flows. *Applied Mechanics Reviews*, 2014, vol. 66, no. 3, 030802 (17 pages). DOI: 10.1115/1.4027198
5. Zikanov O., Belyaev I., Listratov Y., Frick P., Razuvanov N., Sviridov V. Mixed Convection in Pipe and Duct Flows with Strong Magnetic Fields. *Applied Mechanics Reviews*, 2021, Vol. 73, no. 1, 010801 (35 pages). DOI: 10.1115/1.4049833
6. Melnikov I.A., Sviridov E.V., Sviridov V.G., Razuvanov N.G. Experimental Investigation of MHD Heat Transfer in a Vertical Round Tube Affected by Transverse Magnetic Field, *Fusion Engineering and Design*, 2016, Vol. 112, pp. 505–512. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2016.06.003
7. Kirillov I.R., Obukhov D.M., Sviridov V.G., Razuvanov N.G., Belyaev I.A., Poddubnyi I.I., Kostichev P.I. Buoyancy Effects in Vertical Rectangular Duct with Coplanar Magnetic Field and Single Sided Heat Load – Downward and Upward Flow, *Fusion Engineering and Design*, 2018, Vol. 127, pp. 226–233. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2018.01.006
8. Belyaev I., Sardov P., Melnikov I., Frick P. Limits of Strong Magneto-Convective Fluctuations in Liquid Metal Flow in a Heated Vertical Pipe Affected by Transverse Magnetic Field. *International Journal of Thermal Sciences*, 2021, Vol. 161, 106773. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2020.106773
9. Denisov S., Dolgikh V., Khripchenko S., Kolesnichenko I., Nikulin L. The Effect of Traveling and Rotating Magnetic Fields on The Structure of Aluminum Alloy During its Crystallization in a Cylindrical Crucible. *Magnetohydrodynamics*, 2014, Vol. 50, no. 4, pp. 407–422. DOI: 10.22364/mhd.50.4.8
10. Stiller J., Koal K., Nagel W.E., Pal J., Cramer A. Liquid Metal Flows Driven by Rotating and Traveling Magnetic Fields. *European Physical Journal: Special Topics*, 2013, Vol. 220, no. 1, pp. 111–122. DOI: 10.1140/epjst/e2013-01801-8
11. Kolesnichenko I. Investigation of Electromagnetic Force Action on Two-Phase Electrically Conducting Media in a Flat Layer. *Magnetohydrodynamics*, 2013, Vol. 49, no. 1–2, pp. 217–222. DOI: 10.22364/mhd.49.1-2.27
12. Zhang L., Wang S., Dong A., Gao J., Damoah L. Application of Electromagnetic (EM) Separation Technology to Metal Refining Processes: A Review. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2014, Vol. 45, pp. 2153–2185. DOI: 10.1007/s11663-014-0123-y
13. Dobychin E.I., Popov V.I. Force Action of an Electromagnetic Field on the Particles of an Inhomogeneous Medium. *Magnetohydrodynamics*, 1971, Vol. 7, no. 2, pp. 163–166.

Received May 2, 2023

Information about the authors

Okatev Roman Sergeevich is Junior Research Fellow, Laboratory of Technological Hydrodynamics, Institute of Continuous Media Mechanics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Perm, Russian Federation; Perm State University, Perm, Russian Federation, e-mail: okatev.r@icmm.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-2741-1531>

Frick Peter Gotlobovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Laboratory of Hydrodynamics, Institute of Continuous Media Mechanics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Perm, Russian Federation; Perm State University, Perm, Russian Federation, e-mail: frick@icmm.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-7156-1583>

Kolesnichenko Ilya Vladimirovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory of Technological Hydrodynamics, Institute of Continuous Media Mechanics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Perm, Russian Federation, e-mail: kiv@icmm.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9378-5334>

РАСЧЁТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СЖАТИЯ ПОСЛЕ УДАРА (CAI-ТЕСТ) ТКАНЕВОГО КОМПОЗИТА СО СКВОЗНЫМ ДЕФЕКТОМ

С.Б. Сапожников, О.С. Буслаева

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

E-mail: sapozhnikovsb@susu.ru

Аннотация. Рассмотрен новый подход к расчётной оценке нагрузки разрушения при сжатии (compression after impact – CAI) тканевого композита со сквозным дефектом – отверстием. При моделировании учтена возможность неупругого деформирования полимера и разрушение волокон. В расчётах использован пакет ANSYS WB и стандартные модели материалов из его библиотеки: ортотропная и изотропная упругопластическая среды. Материалы, составляющие композит, закреплены на общих узлах сетки конечных элементов, чем обеспечивается совместная работа и сложные свойства, не присущие стандартным моделям материалов (mFEA-подход). В экспериментах использован промышленный стеклопластик СТЭФ толщиной 4 мм на основе волокон типа E и эпоксифенольной смолы. Дефекты от низкоскоростного удара заменены в расчётах сквозным отверстием. Кривые нелинейного деформирования и разрушения, полученные в расчётах, удовлетворительно согласуются с экспериментальными вплоть до разрушения.

Ключевые слова: тканевый композит; CAI-тест; моделирование; нелинейность; mFEA-подход; ударный дефект; эксперимент.

Введение

Композитные материалы, армированные волокнами, находят все более широкое применение в авиастроении, в первую очередь из-за их высокой удельной прочности и жесткости, а также усталостной прочности. Однако слоистые композиты с полимерной матрицей имеют свои недостатки. Например, слабая трансверсальная прочность делает их восприимчивыми к ударным повреждениям [1, 2]. Более того, слабые повреждения могут быть незаметны, но, тем не менее, могут значительно снизить остаточную прочность композита на сжатие. Следовательно, более детальное понимание поведения композитов после удара при сжимающей нагрузке имеет важное значение для проектирования композитных конструкций [3–6].

При проектировании авиационных конструкций остаточную прочность обычно исследуют путем проведения испытаний на сжатие поврежденных образцов, подвергнутых удару с разным уровнем энергии [7, 8]. Несмотря на то, что был принят ряд «внутренних» и стандартизированных тестов (например, [9, 10]), каждый из них использует один и тот же базовый подход: исходные образцы испытывают на удар падающим грузом, чтобы вызвать определенную степень повреждения; поврежденные образцы затем закрепляют в опорном приспособлении и нагружают на сжатие для определения остаточной прочности.

Соотношения между энергией удара и прочностью на сжатие после удара (compression after impact – CAI) композитных слоистых материалов были изучены в работах [11–14]. Сообщалось о значительных экспериментальных и вычислительных затратах по определению и прогнозированию CAI-прочности композитов [15–20]. С целью упрощения экспериментальных исследований в [21] провели испытания на сжатие композитных панелей со встроенными искусственными дефектами – расслоениями, что привело к отказу от необходимости испытаний на удар. Сравнение результатов, полученных при ударном и искусственном расслоениях образцов, показало, что оба типа образцов разрушаются из-за роста расслоения. Остаточная прочность в обоих случаях была одинаковой, но образцы с искусственным расслоением показали более высокую жесткость, чем образцы после удара. С целью косвенного учёта внутрислойных дефектов, вызывающих снижение жесткости образцов, в ряде работ предложено ударный дефект заменять сквозным отверстием [22–25].

Эксперименты, которые обычно требуют большого количества образцов, являются дорогостоящими и трудоемкими. Это побудило аэрокосмическую промышленность, в частности, искать

экономически эффективные средства по замене испытаний конструкций моделированием [26, 27]. В [14] и [28] разработаны численные модели для прогнозирования ударного повреждения и САI-прочности композитов, армированных углеродными волокнами. Эволюция повреждений во время испытаний на низкоскоростной удар и САI-испытаний была оценена одной и той же прогностической моделью. Детализированная трехмерная модель повреждения была представлена в [12], чтобы предсказать как низкоскоростное ударное повреждение, так и САI-прочность слоистых композитов. Эта достаточно сложная модель была реализована как подпрограмма VUMAT в коммерческом пакете Abaqus/Explicit, и полученная остаточная прочность хорошо согласовывалась с экспериментальными результатами.

В данной работе предложен новый подход с использованием типовых моделей механического поведения материалов в коммерческом МКЭ-пакете ANSYS, что не требует создания пользовательских моделей. При этом комбинация простых моделей поведения в одном конечном элементе позволяет получить сложный отклик дефектной конструкции при сжатии после удара с потерей устойчивости, имитируя накопление внутрислойных микрповреждений в тканевом композите за счёт введения явной пластичности.

Материалы

Для исследования низкоскоростного ударного воздействия и остаточной прочности был выбран коммерческий стеклопластик СТЭФ (производство АО «Электроизолит») толщиной 4 мм ($4,1 \pm 0,1$ мм) на основе эпоксифенольного связующего горячего отверждения. В качестве армирующего наполнителя в композите используется 20 слоев стеклоткани (Е-стекло) полотняного переплетения. Плотность композита была $1,77\text{--}1,79$ г/см³. Объемная доля волокон была определена методом выжигания и составила 42 %. Образцы для испытаний имели размеры в плоскости 150×100 мм (основа×уток).

Модули упругости СТЭФ по основе и утку составляют $E_x = E_y = 24 \pm 2$ ГПа, предел прочности при растяжении по основе и утку $X_T = Y_T = 400 \pm 20$ МПа, предел прочности на сжатие по основе и утку $X_c = Y_c = 440 \pm 20$ МПа, модуль упругости по нормали $E_z = 9,5 \pm 0,4$ ГПа, предел прочности на сжатие по нормали $Z_c = 480 \pm 15$ МПа. Символ «±» обозначает среднеквадратическое значение, определенное по серии испытаний [25].

Испытания на низкоскоростной удар

Испытания на низкоскоростной удар были проведены на вертикальном башенном копре INSTRON CEAST 9350 на образцах с размерами в плоскости 150×100 мм, которые вырезали из листа стеклопластика. В качестве опоры было использовано стальное кольцо с внутренним диаметром 72 мм (рис. 1).

Во всех испытаниях на удар использовался конусный ударник INSTRON 7529.841 с радиусом 12,7 мм. Масса ударника во всех случаях составляла 5,095 кг. Во время испытаний энергии удара варьировались в диапазоне 2...25 Дж. Энергия удара была подобрана таким образом, чтобы длина трещин в уточном направлении не превышала половины ширины образца.

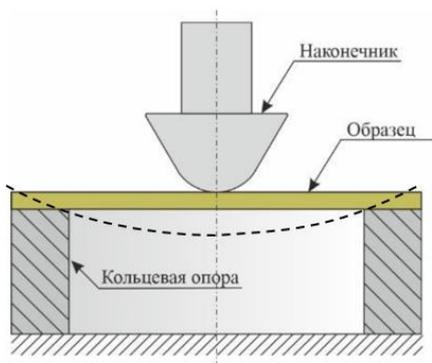


Рис. 1. Схема испытаний на низкоскоростной удар. Пунктир – изогнутая ось образца

В результате низкоскоростного удара в образце возникают дефекты типа расслоений и разрывов волокон на тыльной стороне (рис. 2).

В зависимости от энергии удара площадь зоны разрушения была различной (рис. 2).

В результате испытаний было замечено, что, начиная с определенной энергии удара, развитие площади дефекта замедляется. Это связано с началом разрушения волокон на тыльной стороне, о чем свидетельствуют зависимости длины трещины в уточном направлении (разрушение нитей основы) от энергии удара. Энергия 10 Дж соответствуют началу разрушения волокон и появления трещин в образцах на тыльной стороне.

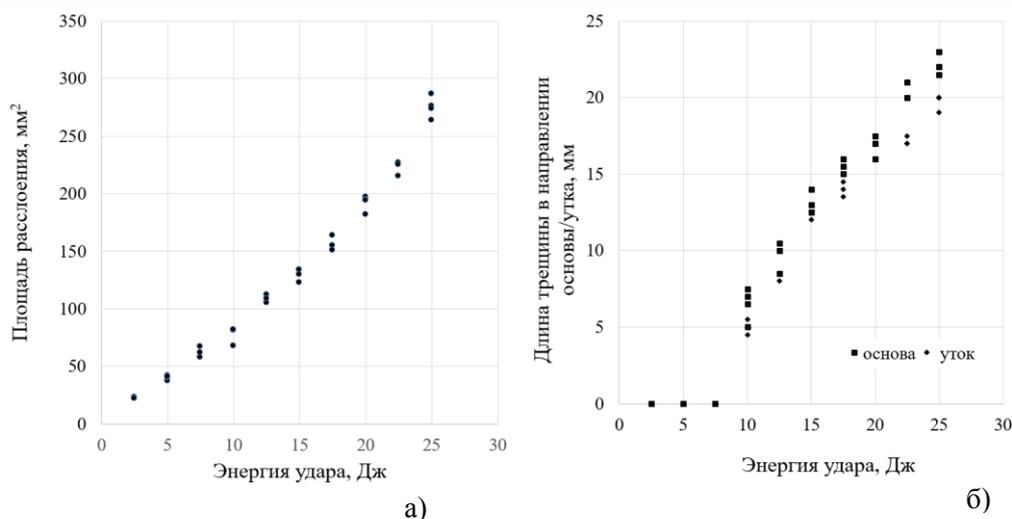


Рис. 2. Зависимость площади расслоения и длины трещины от энергии удара

Определение остаточной прочности при сжатии

Испытания на сжатие после удара были проведены на универсальной испытательной машине INSTRON 5900R с использованием специальной оснастки с боковой поддержкой образца в процессе нагружения (рис. 3). Скорость нагружения составляла 2 мм/мин в соответствии с рекомендациями [29].

Результаты испытаний по определению остаточной прочности представлены на рис. 4.

Может показаться, что снижение прочности на сжатие после удара не слишком существенное, однако сравнение с пределом прочности при сжатии X_c показывает, что даже бездефектный образец имеет вдвое меньшую прочность за счёт потери устойчивости с выпучиванием в направлении нормали к плоскости композита.

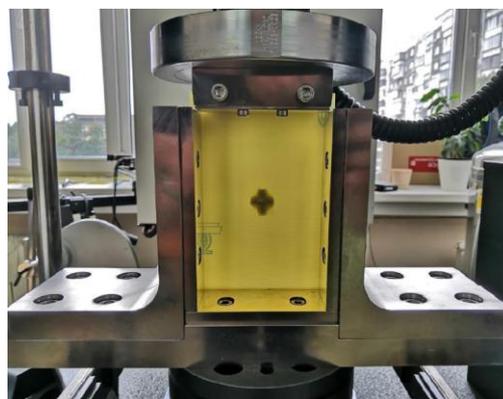


Рис. 3. Образец с дефектом, установленный в CAI-оснастку

Численное моделирование сжатия после удара

В проведенных экспериментах боковые кромки пластины удерживаются заостренными опорами (шарнирное опирание), а нижняя и верхняя части закреплены так, чтобы препятствовать изгибу (заделка).

В зависимости от напряжений потеря устойчивости может происходить при упругих деформациях или за пределами упругости. К сожалению, для композитных материалов указать теоретически границу такого перехода затруднительно. И проблема дополнительно усложняется наличием дефекта от ударного воздействия. В связи с этим предложено использовать численный подход, основанный на методе конечных элементов.

Численное моделирование деформирования и разрушения пластины из стеклопластика СТЭФ с ударным дефектом было проведено в коммерческом пакете ANSYS (Explicit Dynamics). Поскольку рассматриваемая задача симметричная, то для сокращения процессорного времени при моделировании была рассмотрена 1/4 часть пластины со сквозным круглым отверстием, полностью включающей реальный дефект (консервативный подход). Возможность использования такого подхода была подтверждена в работах [22–25].

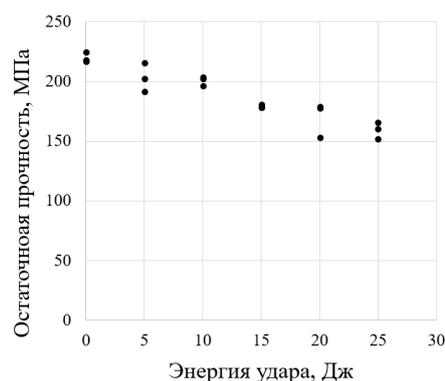


Рис. 4. Зависимость остаточной прочности от энергии удара

Поскольку деформирование стеклопластика перед разрушением является неупругим, то при численном моделировании сжатия пластины с отверстием до разрушения необходимо это учесть. В работе [30] при оценке прочности композита с отверстием при растяжении в рамках МКЭ была предложена схема замены тканевого стеклопластика совокупностью нескольких материалов (изотропных или ортотропных) на одной сетке конечных элементов (mFEA-подход).

В данной работе на примере пластины из СТЭФ с размерами 150x100x4 мм разработана модель, состоящая из двух вложенных материалов. Один из этих материалов (№ 1) имитирует сухую стеклоткань, а второй (№ 2) – полимерную матрицу. Стеклоткань моделируется упругим ортотропным материалом с нулевым коэффициентом Пуассона, а матрица – изотропным упруго-пластическим материалом (билинейная схема).

Чтобы механические свойства такого составного материала соответствовали свойствам однородного стеклопластика СТЭФ, разработана программа в среде MathCAD, которая позволила на основе классической теории слоистых пластин [31] предсказывать макроскопические упругие свойства ортотропной среды по свойствам вложенных материалов. Упругие свойства, которые были применены в расчетах следующие:

Материал № 1: модули упругости $E_x = 16$ ГПа, $E_y = 15$ ГПа, $E_z = 5$ ГПа, коэффициенты Пуассона $\mu_{xy} = 0$, $\mu_{yz} = \mu_{xz} = 0,05$, модули сдвига $G_{xy} = G_{yz} = G_{xz} = 4500$ МПа.

Материал № 2: модуль упругости $E = 8000$ МПа, коэффициент Пуассона $\mu = 0,35$, предел текучести $\sigma_T = 150$ МПа, модуль упрочнения (билинейная аппроксимация диаграммы деформирования) $E^s = 5000$ МПа.

Поскольку вложенные материалы в конечном элементе имеют общие узлы, их упругие свойства суммируются, чтобы получить свойства СТЭФ. В связи с этим полученные данные представляют собой некоторые «эффективные» свойства материалов № 1 и № 2, не сводимые к свойствам волокон или эпоксидной смолы.

Параметры упругопластической модели матрицы (предел текучести и модуль упрочнения), отвечающие в действительности за явления проскальзывания отслоившихся волокон по матрице в композите, варьировали, чтобы получить адекватное прогнозирование нелинейного участка на диаграммах сжатия образцов из СТЭФ *без дефектов* (калибровка упругопластической модели). Разрушение в САI-тестах происходило от сжатия вдоль волокон (деформации равномерного сжатия складывались с деформациями сжатия от изгиба). Деформации разрушения пластической матрицы не оказывали влияния на нагрузку разрушения, так как ортотропные слои разрушались раньше.

Сетка конечных элементов модели показана на рис. 5. Общность узлов во вложенных материалах получена с использованием опции *share topology* в подпрограмме SpaceClaim в рамках пакета ANSYS.

Общие узлы необходимы, с одной стороны, для снижения размерности задачи, а с другой стороны – для исключения нежелательных мод разрушения (расслоение), которые потребовали бы введения прочностных характеристик межслойного интерфейса. Количество элементов (средний размер конечного элемента в модели составил 3 мм) было достаточным для корректного отображения выпучивания по первой форме потери устойчивости (с одним максимумом).

В пакете ANSYS Workbench (v.2020R2) использован явный решатель (explicit dynamics), позволяющий рассматривать как большие перемещения (это важно для потери устойчивости), так и разрушение с удалением конечных элементов из сетки, формируя «макротрещину». Следует также добавить, что приемлемое время расчёта (и правдоподобное деформирование по первой форме с одной полуволной синусоиды) имеет место лишь при временах процесса более 20 мс. При времени нагружения менее 20 мс в решении появляются две полуволны синусоиды, что не соответствует экспериментальным наблюдениям.

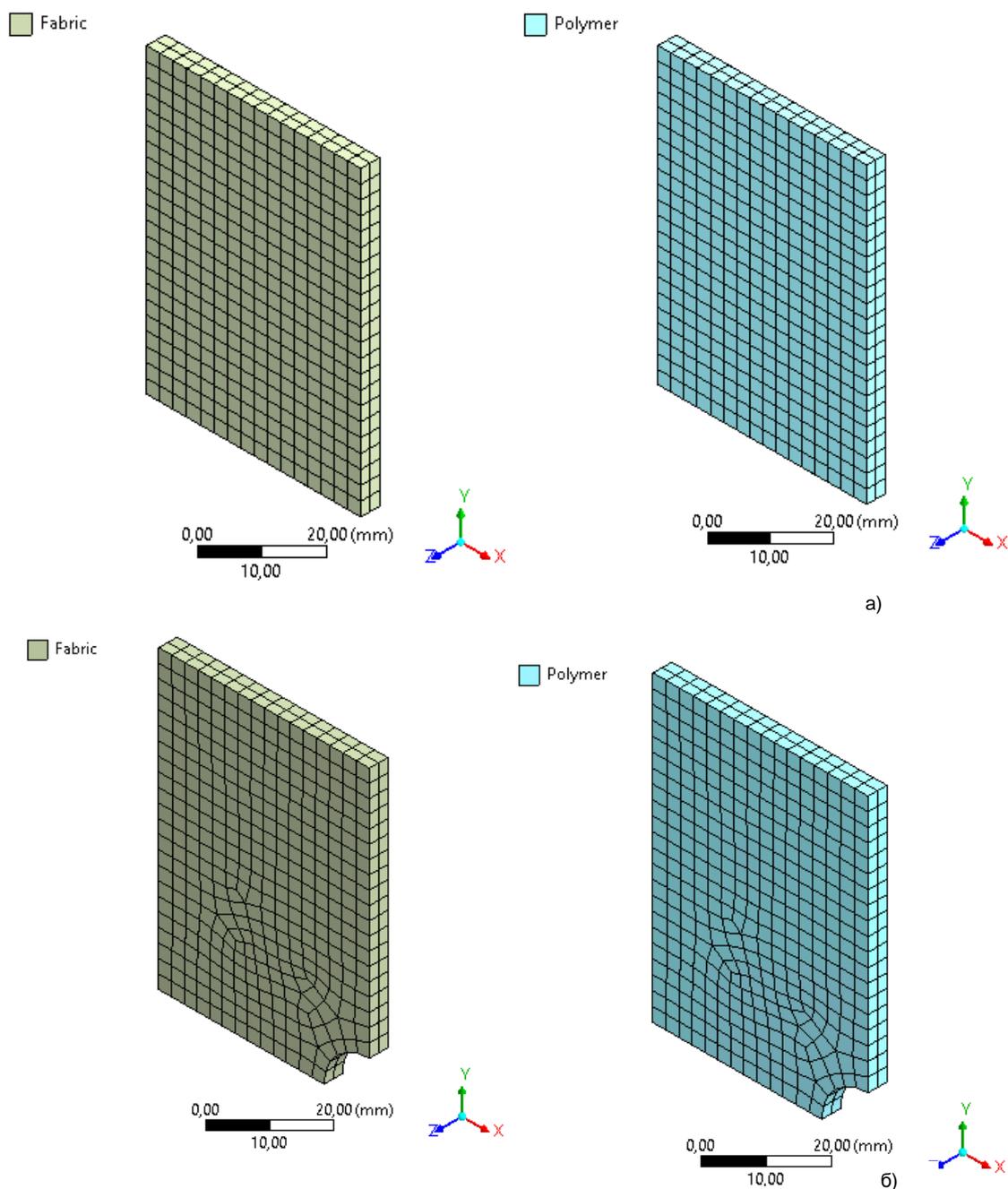


Рис. 5. Сетки КЭ для пластины без отверстия (а) и с отверстием (б)

Граничные условия в модели полностью соответствовали схеме нагружения в CAI-тесте (рис. 6).

Здесь нагрузку прикладывали кинематически (поверхность С) в направлении оси Y (0...3 мм); линия А (ограничения по перемещения $U_z = 0$) соответствовала заострённым боковым шарнирным опорам; поверхности В и D – это оси симметрии. В опоре В выводили реакцию в виде зависимости усилия от времени.

Образцы с дефектами – отверстиями диаметром 6, 13, 17 и 22 мм, что соответствует энергиям удара в испытаниях 10, 15, 20 и 25 Дж соответственно – были нагружены по схеме CAI с учётом симметрии (рис. 7).

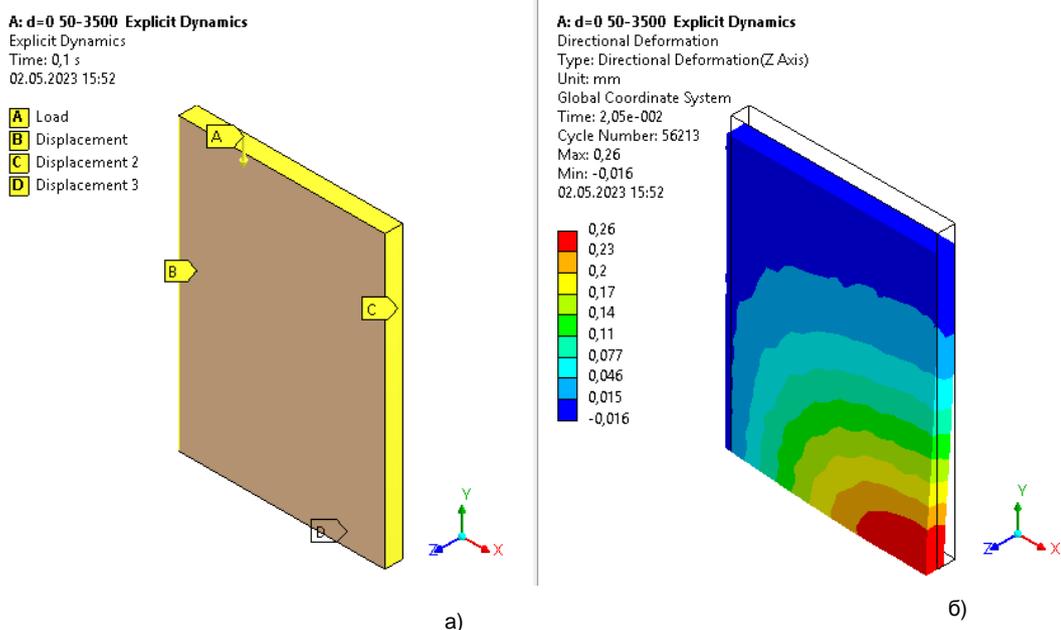


Рис.6. Схема нагружения (а) и характер выпучивания (б)

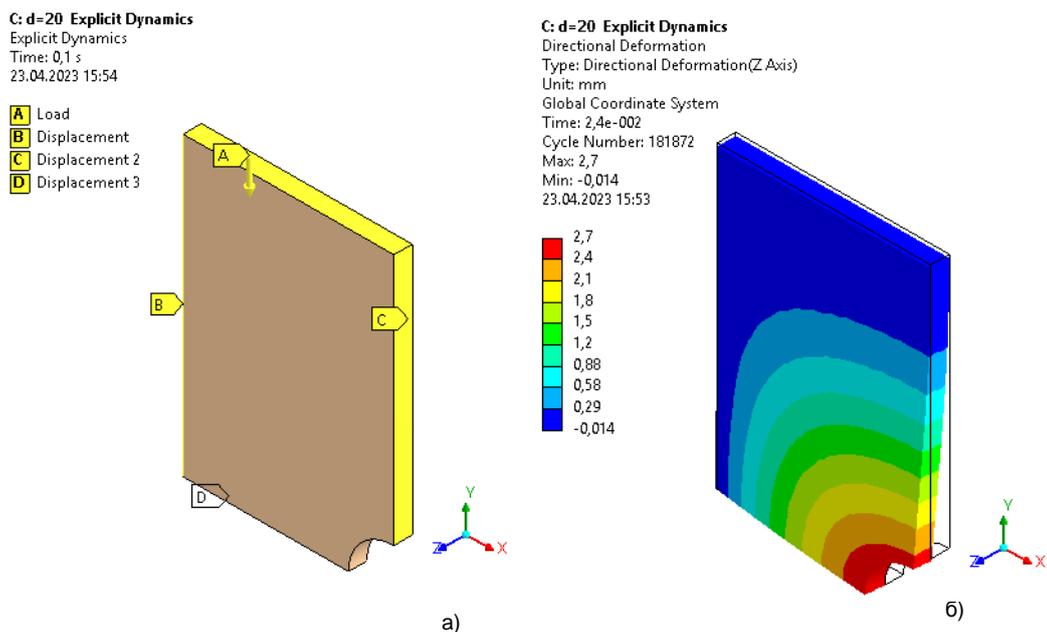


Рис. 7. Образец с отверстием диаметром 20 мм, схема нагружения (а) и картина перемещений U_z на этапе неупругого деформирования (б)

В результате расчета были получены кривые «напряжение – деформация» для всех образцов (рис. 8). Здесь сплошной линией показаны экспериментальные данные, пунктирной – расчетные данные. Линии сдвинуты относительно друг друга для наглядности. На рис. 8 показаны: 1 – без отверстия образец, 2 – отверстие диаметром 6 мм, 3 – отверстие диаметром 13 мм, 4 – отверстие диаметром 17 мм, 5 – отверстие диаметром 22 мм, что соответствует энергиям удара 0 Дж, 10 Дж, 15 Дж, 20 Дж и 25 Дж, соответственно.

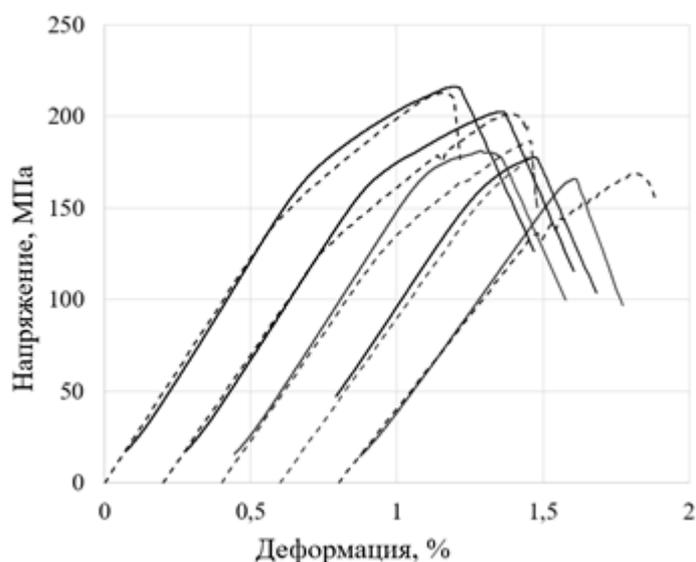


Рис. 8. Кривые «напряжение – деформация» в функции диаметра дефекта/энергии удара

Расчётные значения напряжений потери устойчивости (разрушения) исследованных образцов с дефектами 0 мм, 6 мм, 13 мм, 17 мм и 22 мм равны 213 МПа (погрешность с экспериментальными данными составила 3 %), 201 МПа (погрешность 1 %), 186 (погрешность 4 %), 177 (погрешность 4 %) и 169 МПа (погрешность составила 6 %), соответственно.

Полученные значения хорошо согласуются с экспериментальными данными. Отклонения не превышают 10 %, что для задач потери устойчивости за пределами упругости композитов может считаться серьёзным достижением, позволяющим рекомендовать предложенный подход для использования в проектной практике.

Выводы

Основными механизмами разрушения стеклопластика СТЭФ при низкоскоростном ударном воздействии (до 25 Дж) являются расслоения и разрыв волокон утка на тыльной стороне образца.

Повреждения, возникающие в пластине при ударе до 10 Дж, что соответствует длине трещины на тыльной стороне порядка 5 мм, практически не вызывают снижения остаточной прочности при сжатии.

Деформирование и разрушение пластины при сжатии происходит многостадийно: вначале имеет место упругое, затем упругопластическое деформирование, далее начинается потеря устойчивости (облегчённая упругопластическим деформированием матрицы) и, наконец, разрушение на сжатой стороне пластины, где суммируются деформации равномерного сжатия и изгиба.

Рассмотрена методика расчётной оценки нагрузок потери устойчивости и разрушения при сжатии за пределами упругости слоистого композита с учётом дефекта от ударного воздействия в виде эквивалентного отверстия. Методика ориентирована на использование метода конечных элементов в явной постановке и замену многослойного тканевого композита совокупностью ортотропных и изотропных (упругопластических) фаз. Предложен алгоритм поиска параметров моделей ортотропного и изотропного тел в данной схеме замещения. Результаты испытаний бездефектной пластины в CAI-оснастке использованы для калибровки упругопластических параметров изотропной фазы.

Для более точного предсказания характера деформирования и, возможно, нагрузок потери устойчивости (и разрушения) в ближайшем будущем планируется описать поведение изотропной фазы с помощью полилинейной схемы и рассмотреть развитие расслоений при ударе введением межслойного интерфейса.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-29-13007

Литература

1. Effect of Matrix Damage on Compressive Strength in the Fiber Direction for Laminated Composites / G. Eyer, O. Montagnier, C. Hochard, J.-P. Charles // *Composites Part A Applied Science and Manufacturing*. – 2017. – Vol. 94. – P. 86–92.
2. Prediction of Compressive Strength of Carbon-Epoxy Laminates Containing Delamination by Using a Mixed-Mode Damage Model / M.F.S.F. de Moura, J.P.M. Goncalves, A.T. Marques, P.M.S.T. de Castro // *Compos Struct.* – 2000. – Vol. 50, Iss. 2. – P. 151–157.
3. Cantwell, W.J. An Assessment of the Impact Performance of CFRP Reinforced with High-Strain Carbon Fibres / W.J. Cantwell, P.T. Curtis, J. Morton // *Composites Science and Technology*. – 1986. – Vol. 25, Iss. 2. – P. 133–148.
4. Prichard, J.C. The Role of Impact Damage in Post-Impact Compression Testing / J.C. Prichard, P.J. Hogg // *Composites*. – 1990. – Vol. 21, Iss. 6. – P. 503–511.
5. Some Experimental Findings in Compression-Afterimpact (CAI) Tests of CF/PEEK (APC-2) and Conventional CF/Epoxy Flat Plates / T. Ishikawa, S. Sugimoto, M. Matsushima, Y. Hayashi // *Compos Sci Technol.* – 1995. – Vol. 55, Iss. 4. – P. 349–363.
6. Soutis, C. Prediction of the post-impact compressive strength of CFRP laminated composites / C. Soutis, P.T. Curtis // *Composites Science and Technology*. – 1996. – Vol. 56, Iss. 6. – P. 677–684.
7. Khondker, O.A. Impact and compression-after-impact performance of weft-knitted glass textile composites / O.A. Khondkera, K.H. Leong, I. Herszberg, H. Hamada // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. – 2005. – Vol. 36, Iss. 5. – P. 638–648.
8. Dogan, A. Low-Velocity Impact Response of E-Glass Reinforced Thermoset And Thermoplastic Based Sandwich Composites / A. Dogan, V. Arıkan // *Composites Part B: Engineering*. – 2017. – Vol. 127. – P. 63–69.
9. ASTM. Standard Test Method for Compressive Residual Strength Properties of Damaged Polymer Matrix Composite Plates. D7137/D7137M-12. – West Conshohocken. – PA. – 2012.
10. Airbus Standard. Determination of Compression Strength after Impact. AITM 1-0010. – 2010.
11. Falzon, B.G. Predicting Impact Damage. Residual Strength and Crashworthiness of Composite Structures / B.G. Falzon, W. Tan // *SAE International Journal of Materials and Manufacturing*. – 2016. – Vol. 9, Iss. 3. – P. 718–728.
12. Predicting Low Velocity Impact Damage and Compression-After-Impact (CAI) Behaviour of Composite Laminates / W. Tan, B.G. Falzon, L.N.S. Chiu, M. Price // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. – 2015. – Vol. 71. – P. 212–226.
13. Dale, M. Low Velocity Impact and Compression after Impact Characterization of Woven Carbon/Vinylester at Dry and Water Saturated Conditions / M. Dale, B.A. Acha, L.A. Carlsson // *Composite Structures*. – 2012. – Vol. 94, Iss. 5. – P. 1582–1589.
14. Mendes, P.A.A.E. Numerical Prediction of Compression after Impact Behavior of Woven Composite Laminates / P.A.A.E. Mendes, M.V. Donadon // *Composite Structures*. – 2014. – Vol. 113. – P. 476–491.
15. Bull, D.J. Observations of Damage Development from Compression-After-Impact Experiments using Ex Situ Micro-Focus Computed Tomography / D.J. Bull, S.M. Spearing, I. Sinclair // *Composites Science and Technology*. – 2014. – Vol. 97. – P. 106–114.
16. Carti, D.D.R. Effect of Resin and Fibre Properties on Impact and Compression after Impact Performance of CFRP / D.D.R. Carti, P.E. Irving // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. – 2002. – Vol. 33, Iss. 4. – P. 483–493.
17. Compression after Impact Strength of Composite Sandwich Panels / G.A.O. Davies, D. Hitchings, T. Besant *et al.* // *Composite Structures*. – 2004. – Vol. 63, Iss. 1. – P. 1–9.
18. Ghelli, D. Low Velocity Impact and Compression after Impact Tests on Thin Carbon/Epoxy Laminates. / D. Ghelli, G.Minak // *Composites Part B: Engineering*. – 2011. – Vol. 42, Iss. 7. – P. 2067–2079.
19. Habib, F.A. A New Method for Evaluating the Residual Compression Strength of Composites after Impact / F.A. Habib // *Composite Structures*. – 2001. – Vol. 53, Iss. 3. – P. 309–316.
20. Kazemahvazi, S. Residual strength of GRP laminates with multiple randomly distributed fragment impacts. / S. Kazemahvazi, M. Nilsson, D. Zenkert // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. – 2014. – Vol. 60. – P. 66–74.

21. Asp, L.E. An Experimental Investigation of the Influence of Delamination Growth on the Residual Strength of Impacted Laminates / L.E. Asp, N. Soren, S. Singh // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. – 2001. – Vol. 32, Iss. 3. – P. 1229–1235.
22. Baaran, J. Efficient Prediction of Damage Resistance and Tolerance of Composite Aerospace Structures / J. Baaran, L. Kärger, A. Wetzel // *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering*. – 2008. – Vol. 222, Iss. 2. – P. 179–188.
23. An Efficient Numerical Approach to The Prediction of Laminate Tolerance to Barely Visible Impact Damage / A.H. Baluch, O. Falcó, J.L. Jiménez *et al.* // *Composite Structures*. – 2019. – Vol. 225. – Paper No. 111017.
24. Fedulov, B. The Analysis of the Worst-Case Distribution of the Damage in Composite Material Imposed by a Low-Velocity Impact / B. Fedulov, A. Fedorenko // *Procedia Structural Integrity*. – 2019. – Vol. 18. – P. 399–405.
25. Thin Indicator Films to Assess the Residual Strength of a GFRP after a Local Contact Action / O.S. Buslaeva, S.B. Sapozhnikov, A.V. Bezmelnitsyn *et al.* // *Mechanics of Composite Materials*. – Vol. 57, Iss. 1. – P. 47–56.
26. Papanicolaou, G.C. New Approach for Residual Compressive Strength Prediction of Impacted CFRP Laminates / G.C. Papanicolaou // *Composites*. – 1995. – Vol. 26, Iss. 7. – P. 517–523.
27. A Experimental and computational study of the damage process in CFRP composite beams under low-velocity impact / O.T. Topac, B. Gozluclu, E. Gurses, D. Coker // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. – 2017. – Vol. 92. – P. 167–182.
28. Thin Indicator Films to Assess the Residual Strength of a GFRP after a Local Contact Action / O.S. Buslaeva, S.B. Sapozhnikov, A.V. Bezmelnitsyn *et al.* // *Mechanics of Composite Materials*. – Vol. 57, Iss. 1. – P. 47–56.
29. ГОСТ 33495-2015. Композиты полимерные. Метод испытания на сжатие после удара. – М.: ФГУП «Стандартинформ», 2002. – 20 с.
30. Sapozhnikov, S.B. Multiphase Fea-Approach for Non-Linear Deformation Prediction and Fibre-Reinforced Plastics Failure / S.B. Sapozhnikov, K.A. Guseynov, M.V. Zhikharev // *Mechanics of Composite Materials*. – 2023. – Vol. 59, no. 2. – P. 283–298.
31. Guseinov, K. Features of Three-Point Bending Tests for Determining Out-Of-Plane Shear Modulus of Layered Composites / K. Guseinov, S.B. Sapozhnikov, O.A. Kudryavtsev // *Mechanics of Composite Materials*. – 2022. – Vol. 58, Iss. 2. – P. 155–168.

Поступила в редакцию 7 июня 2023 г.

Сведения об авторах

Сапожников Сергей Борисович – доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: sapozhnikovsb@susu.ru.

Буслаева Ольга Станиславовна – кандидат технических наук, доцент, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

NUMERICAL AND EXPERIMENTAL STUDY OF COMPRESSION AFTER IMPACT (CAI-TEST) OF A FABRIC COMPOSITE WITH OPEN HOLE DEFECTS**S.B. Sapozhnikov, O.S. Buslaeva***South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation**E-mail: sapozhnikovsb@susu.ru*

Abstract. We examine a new approach to the computational assessment of the compressive fracture load (compression after impact, CAI) of a fabric composite with an open hole defect. The simulation takes into account the possibility of inelastic deformation of the polymer and the failure of fibers. Numerical calculations were conducted in ANSYS WB using standard material models from its library: orthotropic and isotropic elastic-plastic media. The materials used are fixed on common nodes of the finite element mesh, which ensures joint work and complex properties that are not inherent in standard material models (mFEA approach). In the experiments, STEF industrial GFRP 4 mm thick based on type E-type fibers and epoxyphenolic resin was used. Defects from a low-speed impact are replaced in the calculations by an open hole defect. The curves of nonlinear deformation and fracture obtained in the calculations are in good agreement with the experimental ones up to fracture.

Keywords: fabric composite; CAI-test; modelling; nonlinearity; mFEA approach; impact defect; experiment.

References

1. Eyer G., Montagnier O., Hochard C., Charles J.-P. Effect of Matrix Damage on Compressive Strength in the Fiber Direction for Laminated Composites. *Composites Part A Applied Science and Manufacturing*, 2017, Vol. 94, pp. 86–92. DOI: 10.1016/j.compositesa.2016.12.012
2. de Moura M.F.S.F., Goncalves J.P.M., Marques A.T., de Castro P.M.S.T. Prediction of Compressive Strength of Carbon-Epoxy Laminates Containing Delamination by Using a Mixed-Mode Damage Model. *Compos Struct.*, 2000, Vol. 50, Iss. 2, pp. 151–157. DOI: 10.1016/S0263-8223(00)00091-X
3. Cantwell W.J., Curtis P.T., Morton J. An Assessment of the Impact Performance of CFRP Reinforced with High-Strain Carbon Fibres. *Composites Science and Technology*, 1986, Vol. 25, Iss. 2, pp. 133–148. DOI: 10.1016/0266-3538(86)90039-4
4. Prichard J.C., Hogg P.J. The Role of Impact Damage in Post-Impact Compression Testing. *Composites*, 1990, Vol. 21, Iss. 6, pp. 503–511. DOI: 10.1016/0010-4361(90)90423-T
5. Ishikawa T., Sugimoto S., Matsushima M., Hayashi Y. Some Experimental Findings in Compression-Afterimpact (CAI) Tests of CF/PEEK (APC-2) and Conventional CF/Epoxy Flat Plates. *Compos. Sci. Technol.*, 1995, Vol. 55, Iss. 4, pp. 349–363.
6. Soutis C., Curtis P.T. Prediction of the post-impact compressive strength of CFRP laminated composites. *Composites Science and Technology*, 1996, Vol. 56, Iss. 6, P. 677–684. DOI: 10.1016/0266-3538(96)00050-4
7. Khondkera O.A., Leong K.H., Herszberg I., Hamada H. Impact and Compression-After-Impact Performance of Weft-Knitted Glass Textile Composites. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2005, Vol. 36, Iss. 5, pp. 638–648. DOI: 10.1016/j.compositesa.2004.07.006
8. Dogan A., Arıkan V. Low-Velocity Impact Response of E-Glass Reinforced Thermoset And Thermoplastic Based Sandwich Composites. *Composites Part B: Engineering*, 2017, Vol. 127, pp. 63–69. DOI: 10.1016/j.compositesb.2017.06.027
9. ASTM. *Standard Test Method for Compressive Residual Strength Properties of Damaged Polymer Matrix Composite Plates*. D7137/D7137M-12, West Conshohocken, PA, 2012. DOI: 10.1520/d7137_d7137m-12
10. Airbus Standard. *Determination of Compression Strength after Impact*. AITM 1-0010, 2010.

11. Falzon B.G., Tan W. Predicting Impact Damage. Residual Strength and Crashworthiness of Composite Structures. *SAE International Journal of Materials and Manufacturing*, 2016, Vol. 9, Iss. 3, pp. 718–728. DOI: 10.4271/2016-01-0497
12. Tan W., Falzon B.G., Chiu L.N.S., Price M. Predicting Low Velocity Impact Damage and Compression-After-Impact (CAI) Behaviour of Composite Laminates. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2015, Vol. 71, pp. 212–226. DOI: 10.1016/j.compositesa.2015.01.025
13. Dale M., Acha B.A., Carlsson L.A. Low Velocity Impact and Compression after Impact Characterization of Woven Carbon/Vinylester at Dry and Water Saturated Conditions. *Composite Structures*, 2012, Vol. 94, Iss. 5, pp. 1582–1589. DOI: 10.1016/j.compstruct.2011.12.025
14. Mendes P.A.A.E., Donadon M.V. Numerical Prediction of Compression after Impact Behavior of Woven Composite Laminates. *Composite Structures*, 2014, Vol. 113, pp. 476–491. DOI: 10.1016/j.compstruct.2014.03.051
15. Bull D.J., Spearing S.M., Sinclair I. Observations of Damage Development from Compression-after-Impact Experiments using ex situ Micro-Focus Computed Tomography. *Composites Science and Technology*, 2014, Vol. 97, pp. 106–114. DOI: 10.1016/j.compscitech.2014.04.008
16. Cartié D.D.R., Irving P.E. Effect of Resin and Fibre Properties on Impact and Compression after Impact Performance of CFRP. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2002, Vol. 33, Iss. 4, pp. 483–493. DOI: 10.1016/S1359-835X(01)00141-5
17. Davies G.A.O., Hitchings D., Besant T., Clarke A., Morgan C. Compression after Impact Strength of Composite Sandwich Panels. *Composite Structures*, 2004, Vol. 63, Iss. 1, pp. 1–9. DOI: 10.1016/S0263-8223(03)00119-3
18. Ghelli D., Minak G. Low Velocity Impact and Compression after Impact Tests on Thin Carbon/Epoxy Laminates. *Composites Part B: Engineering*, 2011, Vol. 42, Iss. 7, pp. 2067–2079. DOI: 10.1016/j.compositesb.2011.04.017
19. Habib F.A. A New Method for Evaluating the Residual Compression Strength of Composites after Impact. *Composite Structures*, 2001, Vol. 53, Iss. 3, pp. 309–316.
20. Kazemahvazi S., Nilsson M., Zenkert D. Residual Strength of GRP Laminates with Multiple Randomly Distributed Fragment Impacts. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2014, Vol. 60, pp. 66–74. DOI: 10.1016/j.compositesa.2014.01.015
21. Asp L.E., Soren N., Singh S. An Experimental Investigation of the Influence of Delamination Growth on the Residual Strength of Impacted Laminates. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2001, Vol. 32, Iss. 3, pp. 1229–1235. DOI: 10.1016/S1359-835X(01)00075-6
22. Baaran J., Kärger L., Wetzal A. Efficient Prediction of Damage Resistance and Tolerance of Composite Aerospace Structures. *Proc. Institution of Mechanical Engineers. Part G.P. J. Aerospace Eng.*, 2008, Vol. 222, Iss. 2, pp. 179–188. DOI: 10.1243/09544100JAERO278
23. Baluch A.H., Falcó O., Jiménez J.L., Tijs Bas H.A.H., Lopes C.S. An Efficient Numerical Approach to The Prediction of Laminate Tolerance to Barely Visible Impact Damage. *Composite Structures*, 2019, Vol. 225, Paper No. 111017. DOI: 10.1016/j.compstruct.2019.111017
24. Fedulov B., Fedorenko A. The Analysis of the Worst-Case Distribution of the Damage in Composite Material Imposed by a Low-Velocity Impact. *Procedia Structural Integrity*, 2019, Vol. 18, pp. 399–405. DOI: 10.1016/j.prostr.2019.08.181
25. Buslaeva O.S., Sapozhnikov S.B., Bezmelnitsyn A.V., Ignatova A.V., Kudryavtsev O.A. Thin Indicator Films to Assess the Residual Strength of a GFRP after a Local Contact Action. *Mechanics of Composite Materials*, Vol. 57, Iss. 1, pp. 47–56. DOI: 10.1007/s11029-021-09932-7
26. Papanicolaou G.C. New Approach for Residual Compressive Strength Prediction of Impacted CFRP Laminates. *Composites*, 1995, Vol. 26, Iss. 7, pp. 517–523. DOI: 10.1016/0010-4361(95)96809-K
27. Topac O.T., Gozluklu B., Gurses E., Coker D. A Experimental and Computational Study of the Damage Process in CFRP Composite Beams under Low-Velocity Impact. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2017, Vol. 92, pp. 167–182. DOI: 10.1016/j.compositesa.2016.06.023
28. Buslaeva O.S., Sapozhnikov S.B., Bezmelnitsyn A.V., Ignatova A.V., Kudryavtsev O.A. Thin Indicator Films to Assess the Residual Strength of a GFRP after a Local Contact Action. *Mechanics of Composite Materials*, Vol. 57, Iss. 1, pp. 47–56. DOI: 10.1007/s11029-021-09932-7
29. GOST 33495-2015. *Polymer Composites. Test Method for Compression after Impact*. Moscow, FGUP “Standartinform”, 2002, 20 p. (in Russ.).

30. Sapozhnikov S.B., Guseynov K.A., Zhikharev M.V. Multiphase Fea-Approach for Non-Linear Deformation Prediction and Fibre-Reinforced Plastics Failure. *Mechanics of Composite Materials*, 2023, Vol. 59, no. 2, pp. 283–298. DOI: 10.1007/s11029-023-10096-9

31. Guseinov K., Sapozhnikov S.B., Kudryavtsev O.A. Features of Three-Point Bending Tests for Determining Out-of-Plane Shear Modulus of Layered Composites. *Mechanics of Composite Materials*, 2022, Vol. 58, Iss. 2, pp. 155–168. DOI: 10.1007/s11029-022-10020-7

Received June 7, 2023

Information about the authors

Sapozhnikov Sergei Borisovich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Chief Scientist Officer, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: sapozhnikovsb@susu.ru.

Buslaeva Olga Stanislavovna is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАКРИТИЧЕСКИХ ДЕФОРМАЦИЙ ПОЛОГИХ СФЕРИЧЕСКИХ ПАНЕЛЕЙ ПОСТОЯННОЙ ТОЛЩИНЫ

В.В. Чупин, Д.Е. Черногубов

Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Российская Федерация

E-mail: v.v.chupin@urfu.ru, d.e.chernogubov@urfu.ru

Аннотация. Разработан алгоритм исследования напряженно-деформированного состояния упругих тонкостенных оболочечных систем, состоящих из оболочек вращения. Для решения нелинейной задачи сильного изгиба тонкой изотропной оболочки вращения, в которой не накладывается никаких ограничений на величины углов поворота нормали к исходной координатной поверхности, а относительная линейная деформация мала по сравнению с единицей, использовался метод Ньютона–Канторовича, сводящий нелинейную краевую задачу к итерационной последовательности линейных краевых задач. При решении линейных краевых задач применялся метод сведения их к ряду задач Коши, которые интегрировались численно, методом Рунге–Кутты. Для обеспечения устойчивости решения жестких задач Коши применен метод дискретной ортогонализации С.К. Годунова. На основе данного алгоритма написана программа для ЭВМ, позволяющая определять параметры напряженно-деформированного состояния оболочек в широком диапазоне изменения геометрических, физических, силовых параметров и граничных условий. Исследовано напряженно-деформированное состояние пологих сферических панелей постоянной толщины с защемлением на внешнем контуре под действием равномерного внешнего давления. Исследован процесс формирования петель на кривой деформирования в зависимости от высоты оболочки. Изменение высоты оболочки при неизменном радиусе опорного контура моделирует начальную неправильность в ее изготовлении.

Ключевые слова: оболочка; деформация; сильный изгиб.

Введение

Тонкостенные оболочечные конструкции применяются в различных областях современной техники. В таких конструкциях под действием нагрузок могут возникать перемещения, не укладывающиеся в рамки линейной теории, что приводит к необходимости учета геометрической нелинейности [1–3]. Использование нелинейной теории позволяет определять напряженно-деформированное состояние (НДС) различного вида оболочек как в случае малых, так и больших прогибов. Однако с помощью этих уравнений значения критических нагрузок оказываются значительно больше значений, получаемых в результате экспериментов. Так, для сферических оболочек теоретически полученные значения критических нагрузок почти в 4 раза больше экспериментальных [4, 5]. Причин такого несоответствия результатов несколько. Это наличие у оболочки начальных неправильностей, начальных напряжений, отличие условий нагружения и закрепления от учитываемых в математической модели, неоднородность свойств материала, несимметричность деформирования и т. п. [4, 6]. Применение современных пакетов прикладных программ, основанных на методе конечных элементов [6], позволяет определять НДС и проводить сравнение с полученными решениями [7], но решение задач с высокой нелинейностью даже при использовании таких программ вызывает определенные трудности при получении решения. Таким образом, развитие методов расчета оболочек и учет их начальных несовершенств является актуальным и имеет важное прикладное значение.

Задача исследования сильного изгиба упругой оболочки вращения

Рассматривается геометрически нелинейная задача сильного изгиба тонкой изотропной оболочки вращения, в которой не накладывается никаких ограничений на величины углов поворота нормали к исходной координатной поверхности, а относительная линейная деформация мала по сравнению с единицей. Нагрузка, действующая на оболочку, осесимметричная.

Для оболочки, испытывающей осесимметричную деформацию, уравнения равновесия в координатах деформированной поверхности имеют вид [8]

$$\begin{aligned} \frac{d(\tilde{r}\tilde{N}_s)}{d\tilde{s}} - \tilde{N}_\theta \cos \tilde{\varphi} + \tilde{r} \frac{\tilde{Q}_s}{\tilde{R}_s} + \tilde{r}\tilde{q}_s &= 0; \\ \frac{d(\tilde{r}\tilde{Q}_s)}{d\tilde{s}} - \tilde{r} \left(\frac{\tilde{N}_s}{\tilde{R}_s} + \frac{\tilde{N}_\theta}{\tilde{R}_\theta} \right) + \tilde{r}\tilde{q}_\zeta &= 0; \\ \frac{d(\tilde{r}\tilde{M}_s)}{d\tilde{s}} - \tilde{M}_\theta \cos \tilde{\varphi} - \tilde{r}\tilde{Q}_s - \tilde{m}_s &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь N_s, Q_s, M_s – продольные, поперечные силы и изгибающие моменты в меридиональном направлении, N_θ, M_θ – усилия в окружном направлении, R_s, R_θ – радиусы главных кривизн в меридиональном и окружном направлениях, r – радиус параллельного круга, s – длина дуги меридиана, q_s – касательная и q_ζ – нормальная составляющие распределенных нагрузок, m_s – внешний распределенный момент. Тильдами сверху отмечены величины, относящиеся к деформированному состоянию оболочечного элемента.

Геометрические соотношения для оболочки в предположении осесимметричной деформации

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{u}_x}{d\tilde{s}} &= \tilde{\varepsilon}_s \cos \tilde{\varphi} + \cos \tilde{\varphi} - \cos \varphi; \\ \frac{d\tilde{u}_z}{d\tilde{s}} &= \tilde{\varepsilon}_s \sin \tilde{\varphi} + \sin \tilde{\varphi} - \sin \varphi; \\ \frac{d\tilde{\theta}_s}{d\tilde{s}} &= \frac{d\tilde{\varphi}}{d\tilde{s}} - \frac{d\varphi}{d\tilde{s}} = (1 + \tilde{\varepsilon}_s)\tilde{\chi}_s + \frac{\tilde{\varepsilon}_s}{R_s}; \\ \tilde{\varepsilon}_\theta &= \frac{\tilde{u}_x}{r}; \quad \tilde{\chi}_\theta = \frac{\sin \tilde{\varphi}}{\tilde{r}} - \frac{\sin \varphi}{r}; \\ \tilde{\chi}_s &= \frac{1}{\tilde{R}_s} - \frac{1}{R_s}; \quad \tilde{\varepsilon}_s = \frac{d\tilde{u}}{d\tilde{s}} + \frac{\tilde{w}}{R_s} + \frac{1}{2}(\tilde{\theta}_s)^2 + \dots \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\varepsilon_s, \varepsilon_\theta, \chi_s, \chi_\theta$ – относительные деформации удлинения и изменения кривизны срединной поверхности оболочки в меридиональном и окружном направлениях.

Соотношения упругости, связывающие усилия и моменты с компонентами полной деформации с учетом гипотезы недеформируемых нормалей, имеют вид:

$$\begin{aligned} \tilde{N}_s &= C_{11}\tilde{\varepsilon}_s + C_{12}\tilde{\varepsilon}_\theta + K_{11}\tilde{\chi}_s + K_{12}\tilde{\chi}_\theta; \quad \tilde{N}_\theta = C_{21}\tilde{\varepsilon}_s + C_{22}\tilde{\varepsilon}_\theta + K_{21}\tilde{\chi}_s + K_{22}\tilde{\chi}_\theta; \\ \tilde{S} &= C_{66}\tilde{\varepsilon}_{s\theta} + 2K_{66}\tilde{\chi}_{s\theta}; \quad \tilde{M}_s = K_{11}\tilde{\varepsilon}_s + K_{12}\tilde{\varepsilon}_\theta + D_{11}\tilde{\chi}_s + D_{12}\tilde{\chi}_\theta; \\ \tilde{M}_\theta &= K_{21}\tilde{\varepsilon}_s + K_{22}\tilde{\varepsilon}_\theta + D_{21}\tilde{\chi}_s + D_{22}\tilde{\chi}_\theta; \quad \tilde{H} = K_{66}\tilde{\varepsilon}_{s\theta} + D_{66}\tilde{\chi}_{s\theta}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь N_s, N_θ, S – мембранные усилия, M_s, M_θ, H – изгибающие и крутящий моменты, $\varepsilon_{s\theta}$ – относительная деформация сдвига, $\chi_{s\theta}$ – кручение координатной поверхности, C_{mp}, K_{mp}, D_{mp} ($m, p = 1, 2$) – коэффициенты упругости.

Для изотропных оболочек

$$\begin{aligned} C_{11} = C_{22} &= \frac{Eh}{1-\nu^2}; \quad C_{12} = \nu C_{11}; \quad C_{66} = \frac{Eh}{2(1+\nu)}; \quad D_{11} = D_{22} = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)}; \\ D_{12} &= \nu D_{11}; \quad D_{66} = \frac{Eh^3}{24(1+\nu)}; \quad K_{11} = K_{12} = K_{22} = K_{66} = 0, \end{aligned}$$

где E – модуль упругости, ν – коэффициент Пуассона, h – толщина оболочки.

Для получения разрешающей системы уравнений уравнения (1)–(3) необходимо дополнить граничными условиями.

Например, для жестко защемленного левого края и свободного правого

$$\begin{aligned} \tilde{u}_x = \tilde{u}_z = \tilde{\theta}_s &= 0, \quad \text{при } s = s_0, \\ \tilde{N}_x = \tilde{N}_z = \tilde{M}_s &= 0, \quad \text{при } s = s_N. \end{aligned}$$

Для решения задачи использовался метод Ньютона–Канторовича, сводящий нелинейную краевую задачу к итерационной последовательности линейных краевых задач. При решении линейных краевых задач применялся метод сведения их к ряду задач Коши, которые интегрировались численно методом Рунге–Кутты. Для обеспечения устойчивости решения жестких задач Коши применен метод дискретной ортогонализации С.К. Годунова.

Основные результаты

Исследовано напряженно-деформированное состояние пологих сферических панелей постоянной толщины с защемлением на внешнем контуре под действием равномерного внешнего давления (рис. 1).

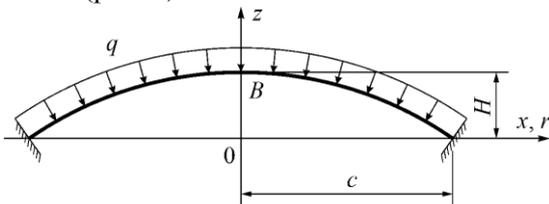


Рис. 1. Расчетная схема оболочки

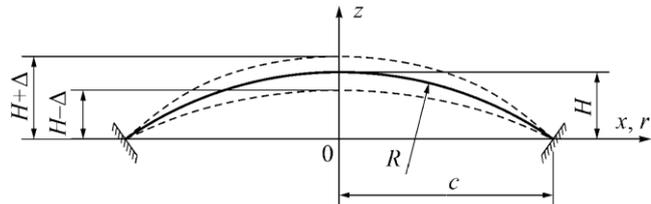


Рис. 2. Схемы сферических оболочек

Оболочки (рис. 2) имеют характеристики: модуль упругости $E = 200$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0,3$, толщина $h = 1$ мм, радиус опорного контура $c = 100$ мм. Образующие оболочек очерчены по окружностям, их параметры приведены в табл. 1. Параметр пологости [1] вычислялся по формуле $b = \sqrt[4]{12(1 - \nu^2)} \frac{c}{\sqrt{Rh}}$.

Таблица 1

Параметры исследуемых оболочек			
№	R, мм	Δ, мм	Параметр пологости b
1	516,5	0	8,00
2	543,84	-0,5	7,80
3	574,32	-1,0	7,59
4	608,51	-1,5	7,37
5	647,14	-2,0	7,15
6	491,85	0,5	8,20
7	469,51	1,0	8,39
8	449,17	1,5	8,58
9	430,59	2,0	8,76

На рис. 3 и 4 приведены кривые деформирования оболочек в координатах: внешнее давление – прогиб полюса при разных высотах ($H + \Delta$), где $\Delta = -2 \dots 2$ мм. Номера кривых соответствуют строкам в табл. 1.

При уменьшении высоты оболочки происходит снижение внешней нагрузки в предельных точках, а при увеличении высоты оболочки значение внешнего давления в первой предельной точке существенно не изменяется.

Кривая 6 имеет петли, а на кривых 7, 8, 9 петли пропадают и остается одна предельная точка.

Для отыскания момента исчезновения петли получены две кривые, приведенные на рис. 5. Параметры оболочек, соответствующие этим кривым, приведены в табл. 2.

Таблица 2

Параметры оболочек			
№	R, мм	Δ, мм	Параметр пологости b
1	501,41	0,3	8,12
2	496,58	0,4	8,16
3	480,41	0,75	8,29
4	479,97	0,76	8,30

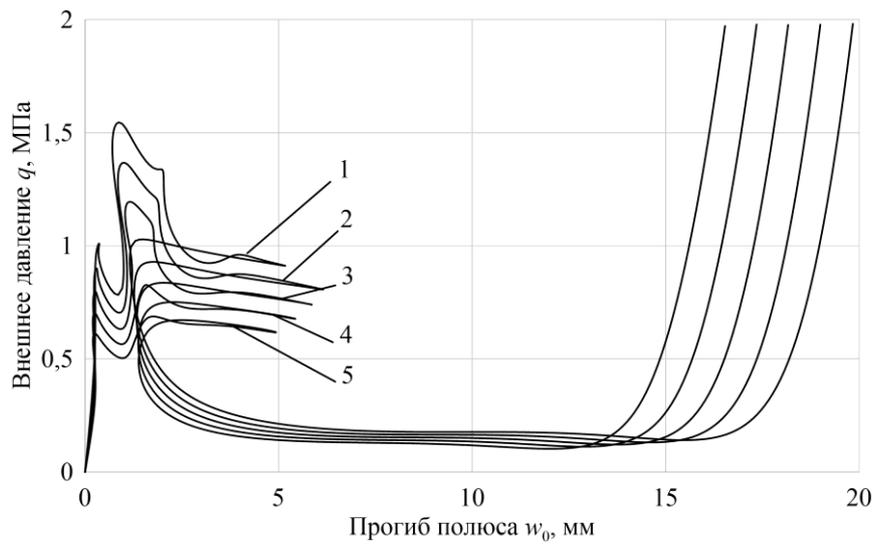


Рис. 3. Кривые деформирования оболочек

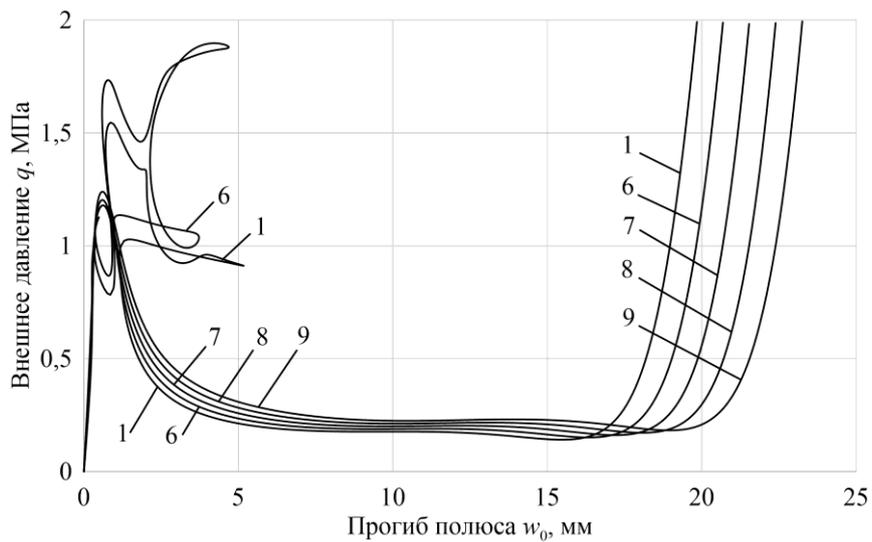


Рис. 4. Кривые деформирования оболочек

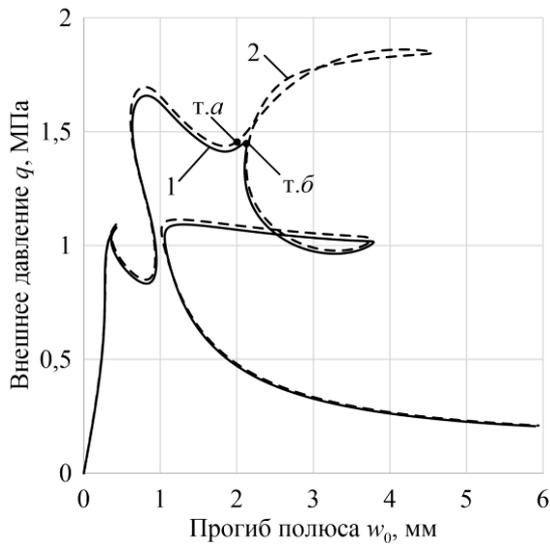


Рис. 5. Кривые деформирования оболочек

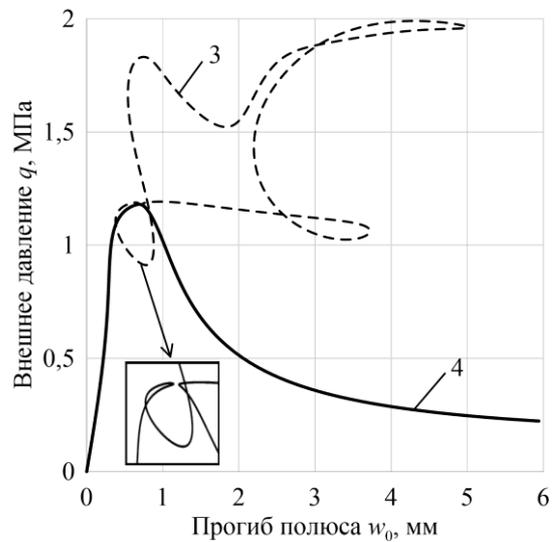


Рис. 6. Кривые деформирования оболочек

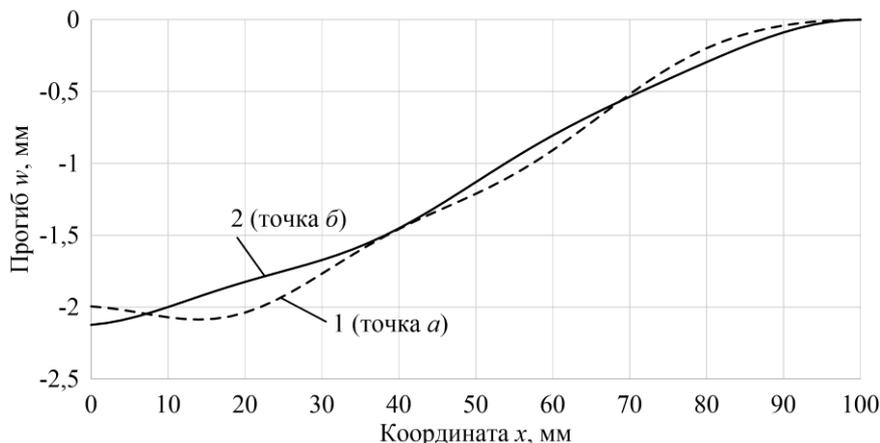


Рис. 7. Кривые прогибов

На рис. 7 приведены кривые прогибов оболочек для точек *a*, *b* (рис. 5). При переходе от точки *a* к *b* происходит «прощелкивание» четырех кольцевых поясов вдоль образующей оболочки.

Для определения момента исчезновения всех петель и перехода к кривой с одной предельной точкой получены две кривые, приведенные на рис. 6. Параметры оболочек, соответствующие этим кривым, приведены в табл. 2.

В окрестности первой предельной точки происходит смыкание двух ветвей петли, в результате получается гладкая кривая с одной предельной точкой.

Все расчеты выполнены по разработанной авторами программе, что подтверждает эффективность использованных алгоритмов.

Литература

1. Новожилов, В.В. Основы нелинейной теории упругости / В.В. Новожилов. – М.: Гостехиздат, 1948. – 211 с.
2. Гаврюшин, С.С. Разработка методов расчета и проектирования упругих оболочечных конструкций приборных устройств: дисс. ... д-ра техн. наук / С.С. Гаврюшин. – Москва, 1994. – 316 с.
3. Гаврюшин, С.С. Численное моделирование процессов нелинейного деформирования тонких упругих оболочек / С.С. Гаврюшин // Математическое моделирование и численные методы. – 2014. – Вып. 1. – С. 115–130.
4. Григолюк, Э.И. Влияние осесимметричных начальных неправильностей сферической оболочки на ее критическую нагрузку / Э.И. Григолюк, Е.А. Лопаницын // Известия МГТУ МАМИ. – 2008. – № 1(5). – С. 233–246.
5. Григолюк, Э.И. Несимметричное поведение полой сферической оболочки при конечных прогибах / Э.И. Григолюк, Е.А. Лопаницын // Доклады Академии наук. – 2003. – Т. 388, № 4. – С. 477–481.
6. Моделирование нелинейного деформирования и потери устойчивости упругих неоднородных оболочек / В.А. Баженов, Н.А. Соловей, О.П. Кривенко, О.А. Мищенко // Строительная механика инженерных конструкций и сооружений. – 2014. – № 5. – С. 14–33.
7. Подкопаев, С.А. Методика исследования закритического поведения осесимметричных мембран, используемых в промышленном интернете вещей / С.А. Подкопаев, С.С. Гаврюшин // Математическое моделирование и экспериментальная механика деформируемого твердого тела: Межвузовский сборник научных трудов. Выпуск 3. – Тверь: Тверской государственный технический университет, 2020. – С. 73–83.
8. Чупин, В.В. Сильный изгиб и устойчивость составных оболочек вращения при осесимметричном нагружении с учетом пластических деформаций : монография / В.В. Чупин, Д.Е. Черногубов. – Деп. в ВИНТИ РАН 10.09.2018, № 102-В2018. – 285 с.

Поступила в редакцию 15 марта 2023 г.

Сведения об авторах

Чупин Владимир Васильевич – доктор технических наук, профессор, кафедра строительной механики, Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: v.v.chupin@urfu.ru.

Черногубов Дмитрий Евгеньевич – кандидат технических наук, доцент, кафедра строительной механики, Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: d.e.chernogubov@urfu.ru.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2023, vol. 15, no. 3, pp. 55–61

DOI: 10.14529/mmph230306

STUDYING THE COSTCRITICAL DEFORMATIONS OF SHUTTER SPHERICAL PANELS OF CONSTANT THICKNESS

V.V. Chupin, D.E. Chernogubov

Ural Federal University, Ekaterinburg, Russian Federation
E-mail: v.v.chupin@urfu.ru, d.e.chernogubov@urfu.ru

Abstract. An algorithm for studying the stress-strain state of elastic thin-walled shell systems consisting of shells of revolution has been developed. To solve the nonlinear problem of strong bending of a thin isotropic shell of revolution, in which no restrictions are imposed on the angles of rotation of the normal to the original coordinate surface and the relative linear deformation is small compared to unity, we used the Newton-Kantorovich, which reduces the nonlinear boundary value problem to an iterative sequence of linear boundary value problems. A method was applied to reduce the linear boundary problems to several Cauchy problems, which were integrated numerically using the Runge-Kutta method. To ensure the stability of the solution of stiff Cauchy problems, S.K. Godunov's method of discrete orthogonalization was applied. Based on this algorithm, a computer program was written to determine the parameters of the stress-strain state of shells with a wide range of changes in geometric, physical, and force parameters and boundary conditions. The stress-strain state of sloping spherical panels of constant thickness with pinching on the outer contour under uniform external pressure has been studied. The process of the formation of loops on the deformation curve depending on the height of the shell has been investigated. Changes in the height of the shell with a constant support contour radius simulates the initial irregularity in its manufacture.

Keywords: shell; deformation; strong bending.

References

1. Novozhilov V.V. *Osnovy nelineynoy teorii uprugosti* (Fundamentals of Nonlinear Elasticity). Moscow, Gostehizdat Publ, 1948, 211 p. (in Russ.).
2. Gavryushin S.S. *Razrabotka metodov rascheta i proektirovaniya uprugikh obolocheknykh konstruktivnykh priborov: diss. ... d-ra tekhn. nauk* (Development of Methods for Calculating and Designing Elastic Shell Structures of Instrument Devices: Dissertation. dr. eng. sci.). Moscow, 1994, 316 p. (in Russ.).
3. Gavryushin S.S. Chislennoe modelirovanie protsessov nelineynogo deformirovaniya tonkikh uprugikh obolochek (Numerical Modeling of the Processes of Nonlinear Deformation of Thin Elastic Shells). *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody*. 2014, Iss. 1, pp. 115–130. (in Russ.).
4. Grigolyuk E.I., Lopanitsyn E.A. Vliyaniye osesimmetrichnykh nachal'nykh nepravil'nostey sfericheskoy obolochki na ee kriticheskuyu nagruzku (Influence of Axisymmetric Initial Irregularities of a Spherical Shell on its Critical Load). *Izvestiya MGTU MAMI*, 2008, no. 1(5), pp. 233–246. (in Russ.).
5. Grigolyuk É.I., Lopanitsyn E.A. Asymmetric Behavior of a Sloping Spherical Shell under Finite Deflections. *Doklady Physics*, 2003, Vol. 48, no. 2, pp. 80–83.

6. Bazhenov V.A., Solovei N.A., Krivenko O.P., Mishchenko O.A. Modeling of Nonlinear Deformation and Buckling of Elastic Inhomogeneities Shells. *Stroitel'naya mekhanika inzhenernykh konstruksiy i sooruzheniy*, 2014, no. 5, pp. 14–33. (in Russ.).

7. Podkopaev S.A., Gavryushin S.S. Metodika issledovaniya zakriticheskogo povedeniya osesimmetrichnykh membran, ispol'zuemykh v promyshlennom internete veshchey (Methodology for Studying the Supercritical Behavior of Axisymmetric Membranes used in the Industrial Internet of Things). *Matematicheskoe modelirovanie i eksperimental'naya mekhanika deformiruemogo tverdogo tela: Mezhvuzovskiy sbornik nauchnykh trudov. Vypusk 3* (Mathematical modeling and experimental mechanics of deformable solids: Interuniversity collection of scientific papers. Issue 3). Tver': Tverskoy gosudarstvennyy tekhnicheskij universitet Publ., 2020, pp. 73–83. (in Russ.).

8. Chupin V.V., Chernogubov D.E. *Sil'nyy izgib i ustoychivost' sostavnykh obolochek vrashcheniya pri osesimmetrichnom nagruzhении s uchetom plasticheskikh deformatsiy: monografiya* (Strong Bending and Stability of Compound Shells of Revolution under Axisymmetric Loading with Allowance for Plastic Deformations: Monograph). *Dep. v VINITI RAN* 10.09.2018, no. 102-V2018, 285 pp. (in Russ.).

Received March 15, 2023

Information about the authors

Chupin Vladimir Vasilyevich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Department of Structural Mechanics, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russian Federation, e-mail: v.v.chupin@urfu.ru.

Chernogubov Dmitry Evgenievich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, Department of Structural Mechanics, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russian Federation, e-mail: d.e.chernogubov@urfu.ru.

EFFECTS OF BASIS SET SUPERPOSITION ERROR ON DFT MODEL OF C₂N/GRAPHENE BILAYER

D.V. Babailova, K.V. Alantev, M.V. Kaplun, E.V. Anikina, T.Yu. Nikonova

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: anikinaev@susu.ru

Abstract. We investigated the structural and energetic properties of the C₂N/graphene bilayer using the electron density functional theory. We compared two approaches for wave function decomposition: plane waves (PW) and localized pseudoatomic orbitals (PAOs). We showed that for the weakly bonded bilayer, it is essential to consider correction to the basis set superposition error in binding energy calculations and geometry optimization. Otherwise, the interlayer binding energy and layer separation could be overestimated by 45–90 % and underestimated by 4–12 %, respectively. Also, to have the quantitative agreement between PAOs and PW results, the atomic-like basis set should be optimized. Overall, calculated with dispersion corrections, the interlayer binding energy (0,17–0,22 J/m²) is of the van der Waals nature.

Keywords: C₂N/graphene bilayer; density functional theory; local pseudoatomic orbitals (PAOs), plane waves (PW), basis set superposition error (BSSE).

Introduction

Due to its structural and electronic properties, graphene is a thoroughly investigated material in the field of nanoelectronics [1]. However, its usage in electronic devices is limited because of its zero band gap [2]. There are several approaches to opening the graphene band gap, one of them, which do not drastically affect the monolayer geometry, is the usage of a substrate with the needed characteristics [3]. Already successfully synthesized C₂N monolayer [4] has an atomic structure similar to graphene (except for the nitrogen pores), so it could become an appropriate substrate which will not induce considerable strains of graphene. To check this hypothesis, we can start the investigation with numerical simulations of the C₂N/graphene bilayer structure. Therefore, we aim to obtain the physically sound model of the C₂N/graphene bilayer using the density functional theory (DFT).

Since the monolayers in the bilayer structure could be arranged differently, it could lead to a quite large simulation cell [5], which will result in time-consuming and heavy calculations with the plane waves (PW). This approach to wave function decomposition does not depend on the amount and type of atoms in the cell but could be cumbersome for modeling systems with large vacuum volumes. Alternatively, a basis set of localized pseudoatomic orbitals (PAOs) could give fast and less resource-consuming results. However, the localized nature of PAOs gives rise to the basis set superposition error (BSSE) [6]. This error leads to an artificial attraction between the investigated subsystems [7]. Moreover, it could be especially significant for cases where subsystems are similar in size. Therefore, to check how strongly this BSSE could influence the calculated properties of the C₂N/graphene bilayer, we simulated this structure using both PW and PAO basis sets.

Models and simulation details

Calculations with the localized pseudo-atomic orbitals were performed via the SIESTA software package [8]. For plane-wave simulations, we used the VASP code [9]. In both packages, the periodic boundary conditions were implemented. Pseudopotentials for the SIESTA calculations were taken from the FHI database [10]. For VASP modeling we utilized the 2012 version of pseudopotentials. 2s²2p² electrons for C and 2s²2p³ electrons for N were considered valence. Since the interaction between C₂N and graphene layers is mostly weak (via van der Waals force), we used the generalized gradients approximation, GGA (Perdew–Burke–Ernzerhof functional, PBE [11]), with the Grimme semi-empirical dispersion corrections, DFT-D2 [12], and the vdW exchange-correlation functional of Dion et al. [13]

with exchange modified by Berland and Hyldgaard [14]. After test calculations, we excluded spin polarization from consideration not to waste computational resources since the difference between spin-polarized and not spin-polarized bilayer total energy was less than 1 meV.

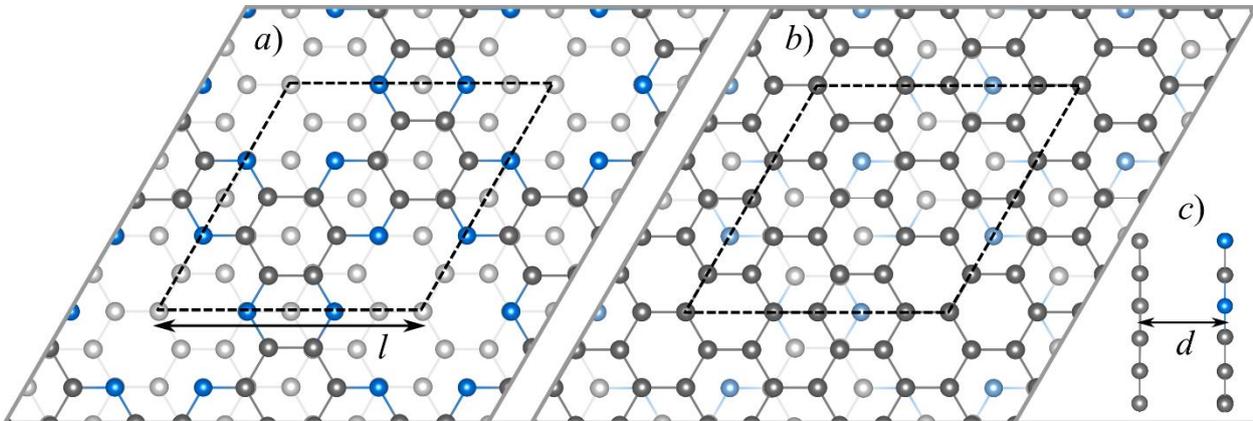


Fig. 1. Simulated structure of the C₂N/graphene bilayer: top views from a) C₂N and b) graphene side; c) side view. Carbon and nitrogen atoms are represented as grey and blue balls, respectively. Cell boundary is noted by a black dashed line

The hexagonal simulation cell contained 1 unit cell of C₂N (12 carbon and 6 nitrogen atoms) and 12 graphene unit cells (24 carbon atoms), see Fig. 1. The optimized translational parameter was 8,47 Å and 8,48–8,49 Å for VASP and SIESTA calculations, respectively. In this work we considered the bilayer system without any tension, so the translation parameter optimization was performed by finding l , which corresponds to the minimum of the bilayer total energy $E_{tot}(l)$. The resulting parameter is ~0,9% smaller than that for a free isolated graphene monolayer (8,55–8,57 Å) and ~1,9% larger than that for a free isolated C₂N monolayer (8,31–8,33 Å), calculated within the same approximations. Selected simulation parameters presented in Table 1 allowed us to obtain the interlayer binding energy with a precision of less than 0,25 meV/atom. More details about calculation parameters optimization can be found in [15]. The plane wave basis energy cutoff was 600 eV, for pseudo-atomic orbitals we used optimal parameters for C₂N monolayer from [16] and for graphene from [17].

Table 1

Simulation parameters

DFT package	SIESTA	VASP
XC approximations	PBE+D2 BH-vdW	PBE+D2
k -points	19×19×1	15×15×1
Space partitioning (mesh detailing in the real space): MeshCutoff (SIESTA) / PREC (VASP)	360 Ry	Accurate
Total energy convergence criterion	10 ⁻⁶ eV	
Force convergence criterion	5·10 ⁻⁵ Ry/Bohr (≈1,3 meV/Å)	10 ⁻³ eV/Å
Vacuum layer, Å	35	

Interlayer binding energy was calculated as:

$$E_{bind} = E_{bilayer} - E_{C_2N} - E_{graphene} - E_{CP}, \quad (1)$$

where $E_{bilayer}$, E_{C_2N} , and $E_{graphene}$ are the total energy of the bilayer, an isolated C₂N monolayer, and an isolated graphene, respectively; E_{CP} is the Boys–Bernardi correction to the basis set superposition error [18]. For PW calculations this correction equals zero.

Geometry optimization with BSSE correction

Since BSSE for the basis of atomic-like orbitals results in the artificial attraction between layers, if we allow the system to relax without any constrictions, we will obtain too small layer separation. Therefore, to investigate the influence of BSSE on the bilayer geometry, we performed a series of calculations

with the fixed interlayer distance for each considered basis set (optimized and default) and XC approximation. The distance was changed manually with 0,05 Å step (0,01 Å near the total energy minimum to determine the precision). The resulting dependencies of the bilayer total energy before and after taking into account Boys–Bernardi correction to BSSE on the layer separation are presented in Fig. 2.

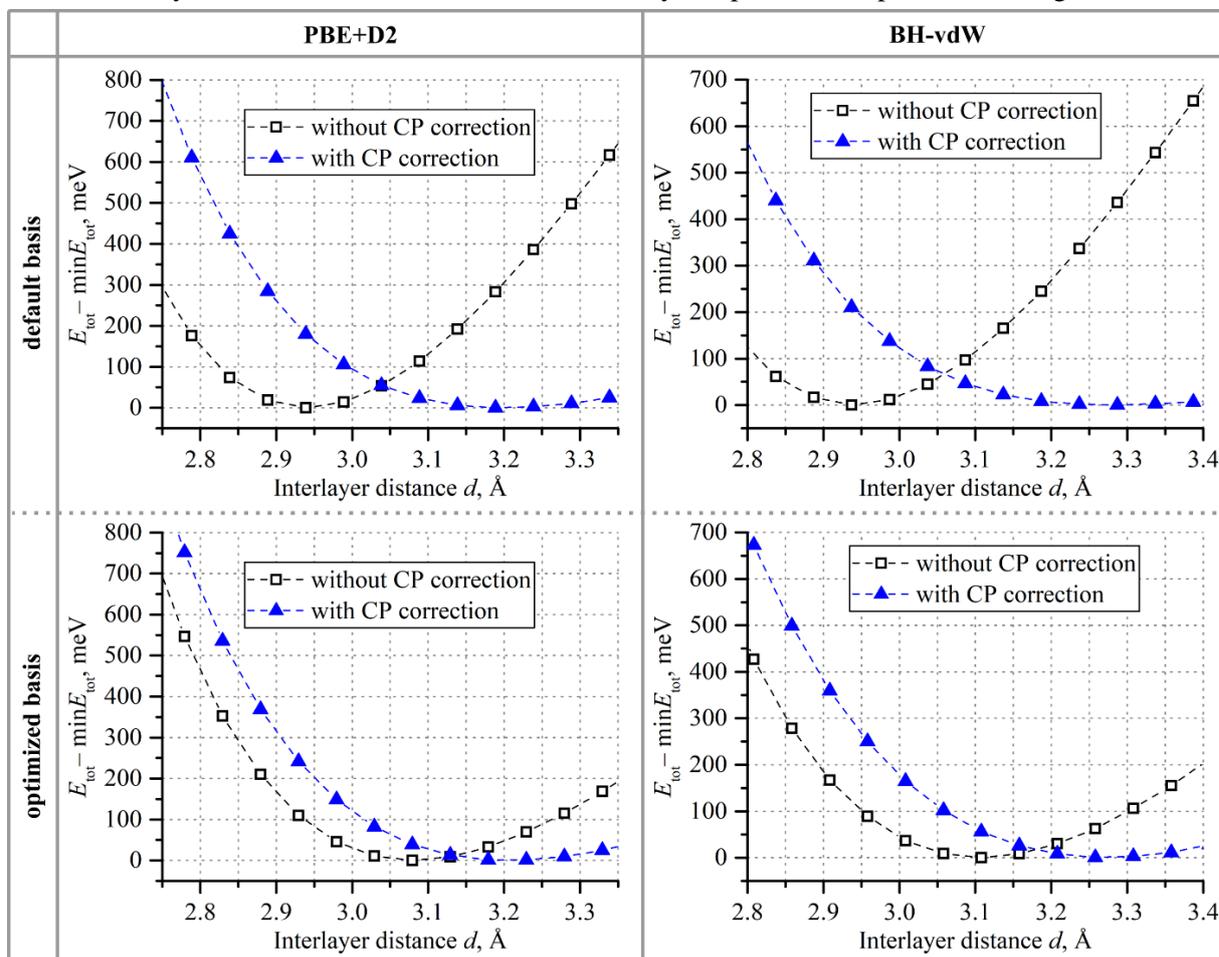


Fig. 2. Dependencies of the bilayer total energy on the interlayer distance for default and optimized PAOs in two XC approximations before and after BSSE corrections

Fig. 2 shows that, predictably, in all considered cases, BSSE corrections lead to the increased layer separations. Basis optimization allows us to obtain larger interlayer distances even before taking into account Boys–Bernardi correction to BSSE. Table 2 proves that basis optimization gives much closer to BSSE-corrected geometries (the layer separation difference between BSSE-corrected and not-corrected cases is two times smaller for optimized PAOs). However, BSSE correction diminishes the geometrical difference between structures obtained with optimal and default bases: BSSE-corrected layer separations are almost equal for each basis set. Moreover, this correction can be substantial, especially for default basis (BSSE-corrected interlayer distances are up to 12 % larger).

Table 2
Interlayer distance before (d) and after (d_{BSSE}) taking into account Boys–Bernardi correction to BSSE

XC approximation	Basis	$d_{BSSE} - d, \text{Å}$	$(d_{BSSE} - d)/d, \%$
PBE+D2	default	0,27	9,0
	optimal	0,13	4,2
BH-vdW	default	0,35	11,9
	optimal	0,16	5,1

So, when subsystems are similar in size, unsurprisingly, BSSE correction considerably changes the weak-bonded system geometry (interlayer distance, in particular). Next, we will check the scale of this influence on the energetic properties and compare results with the BSSE-free plane-wave calculations.

BSSE influence on the C₂N/graphene bilayer binding

The plane-wave calculations gave the following results: interlayer distance $d = 3,18 \text{ \AA}$; $-E_{bind} = 646 \text{ meV}$ (which is $26,9 \text{ meV}$ per atom of graphene or $0,17 \text{ J/m}^2$). Firstly, we compare them to the SIESTA results obtained with the same XC approximation (PBE+D2). The precision of interlayer distance calculations $\Delta d \approx 0,02 \text{ \AA}$. In Table 3 we calculated ΔE and ε as:

$$\Delta E = E_{bind} - E_{bind}^{VASP}, \quad \varepsilon = \frac{d - d_{VASP}}{d_{VASP}} \quad (2)$$

where E_{bind} and E_{bind}^{VASP} are binding energies calculated in SIESTA and VASP, respectively; the interlayer distances are similarly denoted.

Table 3
Binding energy and layer separation of the C₂N/graphene bilayer before and after BSSE correction in geometry (calculations in PBE+D2 XC approximation)

Basis	not BSSE-corrected geometry					BSSE-corrected geometry				
	$-E_{bind}$, meV/atom (J/m ²)	$ E_{CP} $, meV/atom	ΔE , meV/atom	d , \AA	ε , %	$-E_{bind}$, meV/atom (J/m ²)	$ E_{CP} $, meV/atom	ΔE , meV/atom	d , \AA	ε , %
default	11,6 (0,07)	94,6	-15,3	2,94	-7,6	19,1 (0,12)	93,6	-7,8	3,21	0,8
optimal	26,8 (0,16)	32,2	-0,1	3,08	-3,1	28,4 (0,17)	28,3	1,5	3,21	0,8

Table 3 shows that BSSE correction in geometry gave close to plane wave interlayer distances even for default basis (relative deviation ε drops from almost 8 % to less than 1 %, and the resulting layer separations are equal for optimal and default bases). However, basis optimization is critical if the correct interlayer binding energy is needed. The Boys–Bernardi correction could amount to almost 90 % of raw binding energy before BSSE correction (for default basis set before taking into account BSSE in geometry). For optimal basis, $|E_{CP}|$ drastically diminishes (by 3 times in comparison to default basis) and now is about the value of binding energy. Therefore, if atomic orbitals are used for simulations of weakly bonded systems it is critical to consider BSSE correction to the binding energy, otherwise, the binding could be significantly overestimated. Overall, E_{bind} calculated with the optimized basis set are close to the VASP values, the difference is only $\sim 1 \text{ meV}$ per graphene atom. So, sound results could be obtained with the optimal basis set even before the BSSE correction in geometry.

Table 4
Binding energy and layer separation of C₂N/graphene bilayer before and after BSSE correction in geometry (calculations in PBE+D2 XC approximation)

Basis	not BSSE-corrected geometry			BSSE-corrected geometry		
	$-E_{bind}$, meV/atom (J/m ²)	$ E_{CP} $, meV/atom	d , \AA	$-E_{bind}$, meV/atom (J/m ²)	$ E_{CP} $, meV/atom	d , \AA
default	13,6 (0,08)	110,6	2,94	22,4 (0,14)	92,5	3,29
optimal	32,8 (0,20)	34,2	3,11	35,1 (0,22)	28,9	3,27

In the next step, we investigated how the choice of XC approximation will affect the BSSE value. The calculated results for the van der Waals functional are presented in Table 4. Similarly to the semi-empirical Grimme corrections, BSSE plays a huge role in the case of the default basis set. While BSSE-

corrected geometries in both basis sets had similar layer separations, the default basis predicted considerably weaker binding. The optimized basis set gave closer values of binding energy to the plane-wave calculations with a similar XC functional [19]. Overall, the interlayer binding energy calculated with both XC functionals suggests a weak interaction. Obtained values are close to the binding energies of graphite layers [20].

Conclusion

Here, we obtained the optimized model of the C₂N/graphene bilayer. We investigated its structure and interlayer binding using the electron density functional method implemented in codes with two approaches to wave function decomposition (VASP and SIESTA packages). We considered the influence of PAOs optimization and BSSE correction on the results of interlayer binding energy and distance calculations.

We showed that to obtain the correct energetic and structural properties of the bilayer it is necessary to optimize the atomic-like basis set and use the counter-poise correction to BSSE during the calculation of both interlayer binding energy and layer separation. BSSE-corrected results calculated in optimized pseudoatomic orbitals are in agreement with plane wave simulations. For PAOs, we showed that for a weakly bonded system with almost equal sub-systems, it is essential to take into account BSSE correction, otherwise, the binding energies will be highly overestimated (by 45–90 %). Overall, both XC approximation predicted similar interlayer binding energies, which lie in the range of van der Waals bonding.

The reported study utilized the supercomputer resources of South Ural State University [21].

References

1. Sang M., Shin J., Kim K., Yu K.J. Electronic and Thermal Properties of Graphene and Recent Advances in Graphene Based Electronics Applications. *Nanomaterials*, 2019, Vol. 9, Iss. 3, pp. 374. DOI: 10.3390/nano9030374
2. Andrei E.Y., MacDonald A.H. Graphene Bilayers with a Twist. *Nat. Mater*, 2020, Vol. 19, Iss. 12, pp. 1265–1275. DOI: 10.1038/s41563-020-00840-0
3. Yankowitz M., Ma Q., Jarillo-Herrero P., LeRoy B.J. Van der Waals Heterostructures Combining Graphene and Hexagonal Boron Nitride. *Nat. Rev. Phys.*, 2019, Vol. 1, Iss. 2, pp. 112–125. DOI: 10.1038/s42254-018-0016-0
4. Mahmood J., Lee E.K., Jung M., Shin D., Jeon I.-Y., Jung S.-M., Choi H.-J., Seo J.-M., Bae S.-Y., Sohn S.-D., Park N., Oh J.H. Shin, H.-J., Baek J.-B. Nitrogenated holey two-dimensional structures, *Nat. Commun. Nature Publishing Group*, 2015, Vol. 6, p. 6486. DOI: 10.1038/ncomms7486
5. Guan Z., Ni S. Insights from First Principles Graphene/g-C₂N Bilayer: Gap Opening, Enhanced Visible Light Response and Electrical Field Tuning Band Structure. *Appl. Phys. A*, 2017, Vol. 123, Iss. 11, p. 678. DOI: 10.1007/s00339-017-1314-6
6. Lee K., Yu J., Morikawa Y. Comparison of Localized Basis and Plane-Wave Basis for Density-Functional Calculations of Organic Molecules on Metals. *Phys. Rev. B*, 2007, Vol. 75, Iss. 4, p. 045402. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.045402
7. Ferre-Vilaplana A. Numerical Treatment Discussion and Ab Initio Computational Reinvestigation of Physisorption of Molecular Hydrogen on Graphene. *J. Chem. Phys.*, 2005, Vol. 122, Iss. 10, p. 104709. DOI: 10.1063/1.1859278
8. Artacho E., Anglada E., Diéguez O., Gale J.D., García A., Junquera J., Martín R.M., Ordejón P., Pruneda J.M., Sánchez-Portal D., Soler J.M. The SIESTA Method; Developments and Applicability. *J. Phys. Condens. Matter*, 2008, Vol. 20, Iss. 6, p. 064208. DOI: 10.1088/0953-8984/20/6/064208
9. Kresse G., Furthmüller J. Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set. *Phys. Rev. B*, 1996, Vol. 54, Iss. 16, pp. 11169–11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
10. *Abinit's Fritz-Haber-Institute (FHI) pseudo database*: https://departments.icmab.es/leem/SIESTA_MATERIAL/Databases/Pseudopotentials/periodictable-intro.html
11. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, Vol. 77, Iss. 18, pp. 3865–3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865

12. Grimme S. Semiempirical GGA-Type Density Functional Constructed with a Long-Range Dispersion Correction. *J. Comput. Chem.*, 2006, Vol. 27, Iss. 15, pp. 1787–1799. DOI: 10.1002/jcc.20495

13. Dion M., Rydberg H., Schröder E., Langreth D.C., Lundqvist B.I. Van der Waals Density Functional for General Geometries. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, Vol. 92, Iss. 24, p. 246401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.246401

14. Berland K., Hyldgaard P. Exchange Functional that Tests the Robustness of the Plasmon Description of the Van Der Waals Density Functional. *Phys. Rev. B.*, 2014, Vol. 89, Iss. 3, p. 035412. DOI: 10.1103/PhysRevB.89.035412

15. Anikina E.V., Beskachko V.P. Optimizatsiya parametrov bazisnogo nabora dlya modelirovaniya adsorbtsii vodoroda na uglerodnykh metananotrubkakh v pakete SIESTA (Basis Set Parameter Optimization for Hydrogen Adsorption on Carbon Metananotubes Simulation in SIESTA Package). *Nauchnyy poisk. Materialy devyatoy nauchnoy konferentsii aspirantov i doktorantov* (Scientific search. Proc. IX scientific conference of graduate and doctoral students), Chelyabinsk, Izdatel'skiy tsentr YuUrGU, Chelyabinsk, 2017, pp. 126–134. (in Russ.).

16. Alant'ev K.V., Anikina E.V. Monosloy C₂N kak perspektivnyy material dlya khraneniya vodoroda: DFT modelirovanie (Monolayer C₂N as a promising material for hydrogen storage: DFT modeling). *XXII Vserossiyskaya shkola-seminar po problemam fiziki kondensirovannogo sostoyaniya veshchestva pamyati M.I. Kurkina (SPFKS-22), Tezisy dokladov*, g. Ekaterinburg, 24 noyabrya – 1 dekabrya 2022 g., g. Ekaterinburg (Proc. XXII All-Russian School-seminar on the problems of condensed matter physics in memory of M.I. Kurkin (SPFKS–22), Yekaterinburg, November 24 – December 1, 2022) Yekaterinburg, IFM UrO RAS Publ., 2022, 301 p. (in Russ.).

17. Kaplun M.V., Anikina E.V., Beskachko V.P. Ab Initio Modelling of a Bilayer Graphene. *Bulletin of the South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*, 2022, Vol. 14, Iss. 2, pp. 64–71. DOI: 10.14529/mmph220207

18. Boys S.F., Bernardi F. The Calculation of Small Molecular Interactions by the Differences of Separate Total Energies. Some Procedures with Reduced Errors. *Mol. Phys.*, 1970, Vol. 19, Iss. 4, pp. 553–566. DOI: 10.1080/00268977000101561

19. Structure and Electronic Properties of C₂N/Graphene Predicted by First-Principles Calculations, RSC Adv. Royal Society of Chemistry, 2016, Vol. 6, Iss. 34, pp. 28484–28488. DOI: 10.1039/C5RA26873G

20. Liu Z., Liu J. Z., Cheng Y., Li Z., Wang L., Zheng Q. Interlayer binding energy of graphite: A mesoscopic determination from deformation. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 2012, Vol. 85, Iss. 20, pp. 205418. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.205418

21. Bilenko R.V., Dolganina N. Yu., Ivanova E.V., Rekachinsky A.I. High-performance Computing Resources of South Ural State University. *Bulletin of the South Ural State University. Series of "Computational Mathematics and Software Engineering"*, 2022, Vol. 11, Iss. 1, pp. 15–30. DOI: 10.14529/cmse220102

Received May 22, 2023

Information about the authors

Babaylova Dar'ya Vital'evna is Undergraduate Student, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

Alantev Kirill Vyacheslavovich is Undergraduate Student, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

Kaplun Mariya Viktorovna is Assistant, Physics of Nanoscale Systems Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9993-2091>, e-mail: kaplunmv@susu.ru.

Anikina Ekaterina Vladimirovna, Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Physics of Nanoscale Systems Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-3631-4429>, e-mail: anikinaev@susu.ru.

Nikonova Tatyana Yur'evna is Assistant, Physics of Nanoscale Systems Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

УДК 004.942-539.2

DOI: 10.14529/mmph230307

**ВЛИЯНИЕ ОШИБКИ СУПЕРПОЗИЦИИ БАЗИСНОГО НАБОРА
НА DFT МОДЕЛЬ БИСЛОЯ C₂N/ГРАФЕН**

Д.В. Бабайлова, К.В. Алантьев, М.В. Каплун, Е.В. Аникина, Т.Ю. Никонова
Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация
E-mail: anikinaev@susu.ru

Аннотация. В работе были исследованы структурные и энергетические характеристики бислоя C₂N/графен с помощью метода функционала электронной плотности. Сравнились два подхода к представлению волновой функции системы: плоские волны (пакет VASP) и атомноподобные орбитали (пакет SIESTA). Было показано, что для слабосвязанного бислоя необходимо учитывать поправку к ошибке суперпозиции базисного набора как при вычислении энергии связи слоев, так и при оптимизации геометрии. Иначе оценки величины энергии связи слоев будут завышены на 45–90 %, межслойное расстояние – занижено на 4–12 %. Для количественного согласия расчетов с атомноподобными орбиталями и плоскими волнами необходимо также оптимизировать атомноподобный базисный набор. В итоге вычисленные с дисперсионными поправками энергии связи слоев (0,17–0,22 Дж/м²) указывают на Ван дер Ваальсову связь между графеном и монослоем C₂N.

Ключевые слова: бислой C₂N/графен; теория функционала электронной плотности; атомноподобные орбитали; плоские волны; ошибка суперпозиции базисного набора.

Литература

1. Electronic and Thermal Properties of Graphene and Recent Advances in Graphene Based Electronics Applications / M. Sang, J. Shin, K. Kim, K.J. Yu // *Nanomaterials*. – 2019. – Vol. 9, Iss. 3. – P. 374.
2. Andrei, E.Y. Graphene Bilayers with a Twist / E.Y. Andrei, A.H. MacDonald // *Nature Materials*. – 2020. – Vol. 19, Iss. 12. – P. 1265–1275.
3. Van der Waals Heterostructures Combining Graphene and Hexagonal Boron Nitride / M. Yankowitz, Q. Ma, P. Jarillo-Herrero, B.J. LeRoy // *Nature Review Physics*. – 2019. – Vol. 1, Iss. 2. – P. 112–125.
4. Nitrogenated Holey Two-Dimensional Structures / J. Mahmood, E.K. Lee, M. Jung *et al.* // *Nat. Commun.* – 2015. – Vol. 6. – P. 6486.
5. Guan, Z. NiInsights from First Principles Graphene/g-C₂N Bilayer: Gap Opening, Enhanced Visible Light Response and Electrical Field Tuning Band Structure / Z. Guan, S. Ni // *Appl. Phys. A*. – 2017. – Vol. 123, Iss. 11. – P. 678.
6. Lee, K. Comparison of Localized Basis and Plane-Wave Basis for Density-Functional Calculations of Organic Molecules on Metals / K. Lee, J. Yu, Y. Morikawa // *Phys. Rev. B*. – 2007. – Vol. 75, Iss. 4. – P. 045402.
7. Ferre-Vilaplana, A. Numerical Treatment Discussion and Ab Initio Computational Reinvestigation of Physisorption of Molecular Hydrogen on Graphene / A. Ferre-Vilaplana // *J. Chem. Phys.* – 2005. – Vol. 122, Iss. 10. – P. 104709.
8. The SIESTA Method; Developments and Applicability / E. Artacho, E. Anglada, O. Diéguez *et al.* // *J. Phys. Condens. Matter*. – 2008. – Vol. 20, Iss. 6. – P. 064208.
9. Kresse, G. Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Phys. Rev. B*. – 1996. – Vol. 54, Iss. 16. – P. 11169–11186.
10. Abinit's Fritz-Haber-Institute (FHI) pseudo database [Электронный ресурс]: https://departments.icmab.es/leem/SIESTA_MATERIAL/Databases/Pseudopotentials/periodictable-intro.html (дата обращения: 20.01.2023).

11. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77, Iss. 18. – P. 3865–3868.
12. Grimme, S. Semiempirical GGA-Type Density Functional Constructed with a Long-Range Dispersion Correction / S. Grimme // *J. Comput. Chem.* – 2006. – Vol. 27, Iss. 15. – P. 1787–1799.
13. Van der Waals Density Functional for General Geometries / M. Dion, H. Rydberg, E. Schröder et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 92, Iss. 24. – P. 246401.
14. Berland, K. Exchange Functional that Tests the Robustness of the Plasmon Description of the Van Der Waals Density Functional / K. Berland, P. Hyldgaard // *Phys. Rev. B.* – 2014. – Vol. 89, Iss. 3. – P. 035412.
15. Аникина, Е.В. Оптимизация параметров базисного набора для моделирования адсорбции водорода на углеродных метананотрубках в пакете SIESTA / Е.В. Аникина, В.П. Бескачко // Научный поиск. Материалы девятой научной конференции аспирантов и докторантов. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, Челябинск, 2017. – С. 126–134.
16. Алантьев, К.В. Монослой C₂N как перспективный материал для хранения водорода: DFT моделирование / К.В. Алантьев, Е.В. Аникина // XXII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества памяти М.И. Куркина (СПФКС-22), Тезисы докладов, г. Екатеринбург, 24 ноября – 1 декабря 2022 г., г. Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2022. – 301 с. (СПФКС-22).
17. Kaplun, M.V. Ab Initio Modelling of a Bilayer Graphene / M.V. Kaplun, E.V. Anikina, V.P. Beskachko // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика».* – 2022. – Vol. 14, Iss. 2. – P. 64–71.
18. Boys, S.F. The Calculation of Small Molecular Interactions by the Differences of Separate Total Energies. Some Procedures with Reduced Errors / S.F. Boys, F. Bernardi // *Mol. Phys.* – 1970. – Vol. 19, Iss. 4. – P. 553–566.
19. Structure and Electronic Properties of C₂N/Graphene Predicted by First-Principles Calculations / D. Wang, D. Han, L. Liu, L. Niu // *RSC Adv. Royal Society of Chemistry.* – 2016. – Vol. 6, Iss. 34. – P. 28484–28488.
20. Interlayer Binding Energy of Graphite: A Mesoscopic Determination from Deformation / Z. Liu, J. Z. Liu, Y. Cheng *et al.* // *Phys. Rev. B. – Condens. Matter Mater. Phys.* – 2012. – Vol. 85, Iss. 20. – P. 205418.
21. Высокопроизводительные вычислительные ресурсы южно-уральского государственного университета / Р.В. Биленко, Н.Ю. Долганина, Е.В. Иванова, А.И. Рекачинский // *Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Вычислительная математика и информатика».* – 2022. – Т. 11, № 1. – P. 15–30.

Поступила в редакцию 22 мая 2023 г.

Сведения об авторах

Бабайлова Дарья Витальевна – студент, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

Алантьев Кирилл Вячеславович – студент, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

Каплун Мария Викторовна – ассистент, кафедра физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9993-2091>, e-mail: kaplunmv@susu.ru.

Аникина Екатерина Владимировна – кандидат физико-математических наук, кафедра физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-3631-4429>, e-mail: anikinaev@susu.ru.

Никонова Татьяна Юрьевна – ассистент, кафедра физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ДИФРАКТОМЕТРИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

**М.А. Бирюкова^{1,2}, Ю.М. Ковалев¹, Д.В. Петров², А.В. Станкевич²,
М.А. Шестаков¹**

¹ Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

² Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск,
Российская Федерация

E-mail: bma_vniitf@mail.ru

Аннотация. Представлены результаты определения кристаллической структуры образцов ТЭНа, гексогена и октогена методом рентгеновской дифрактометрии, приведены расчеты параметров элементарной ячейки молекулярных кристаллов, связанные с обработкой результатов рентгеновской дифрактометрии, и экспериментальные зависимости объемов элементарной ячейки молекулярных кристаллов от температуры. Полученные экспериментальные данные по изобарическому сжатию и расширению исследованных молекулярных кристаллов позволили уточнить тепловую составляющую уравнений состояния молекулярных кристаллов и получить выражение для изобарического коэффициента теплового расширения, связанное с математической моделью тепловой составляющей уравнений состояния молекулярных кристаллов. Полученная аналитическая зависимость изобарического коэффициента теплового расширения от температуры рассмотренных образцов позволяет правильно описывать предельный переход к низким температурам.

Предложен метод аппроксимации, полученных экспериментальных зависимостей объема элементарной ячейки, исследуемых веществ, при изобарическом сжатии – расширении от температуры, основанный на математической модели полуэмпирических уравнений состояния молекулярных кристаллов. Данный подход позволил получить аналитическую зависимость объема элементарной ячейки кристалла от температуры, с точностью до 3 % описывающую представленные результаты рентгеновской дифрактометрии, рассмотренных в работе образцов молекулярных кристаллов.

Ключевые слова: уравнение состояния; молекулярный кристалл; изобара; дифрактометрия; приближение Дебая.

Введение

Необходимость расчета термодинамических характеристик различных веществ возникает всегда при решении различных задач математической физики. Поэтому построения математических моделей уравнений состояния всегда привлекало повышенное внимание исследователей самых различных специальностей [1, 2]. Несмотря на значительные успехи в развитии вычислительной техники, последовательный теоретический расчет уравнений состояния материалов методами статистической физики сталкивается с трудностями, суть которых заключается в том, что появляется необходимость корректного учета межчастичного взаимодействия. Поэтому активное развитие получили математические модели построения полуэмпирических уравнений состояния [3, 4]. Для построения полуэмпирических уравнений состояния необходимо определиться с выбором термодинамического потенциала, в зависимости от агрегатного состояния вещества. Например, для твердого тела наиболее удобным термодинамическим потенциалом является функция Гельмгольца. Далее из теоретических соображений выбирается математическая модель, позволяющая определить форму функциональной зависимости термодинамического потенциала, а коэффициенты, входящие в выбранный термодинамический потенциал, определять на основании результатов термодинамических экспериментов.

В данной работе реализован подход к определению термодинамических параметров исследуемого материала на основе прецизионных дифрактометрических исследований в широком диапазоне температур с целью уточнения вида составляющих полуэмпирического уравнения со-

стояния молекулярного кристалла [5, 6] и построения уравнения, позволяющего аналитически описывать зависимость объема элементарной ячейки от температуры. Полученные экспериментальные данные позволят верифицировать тепловую часть уравнений состояния молекулярных кристаллов.

Математическое моделирование поведения объема элементарной ячейки молекулярного кристалла при изобарическом расширении и сжатии

Приведенные в работах [7–10] экспериментальные данные показывают, что в условиях квазиизобарического температурного воздействия изменение объема элементарной ячейки молекулярного кристалла имеет нелинейную зависимость, которая на примере ТАТБ представлена (см. рисунок) [11] и характеризуется анизотропией силовых параметров межмолекулярного взаимодействия.

Все попытки аппроксимации экспериментальных данных на отдельных участках экспериментальной кривой (см. рисунок) алгебраическими выражениями без учета специфики уравнений состояния молекулярного кристалла приводят к неутешительным результатам по определению зависимости коэффициента объемного расширения от температуры. Поэтому в данной работе был предложен подход, позволяющий получить аналитическую зависимость объема элементарной ячейки молекулярного кристалла от температуры и выражение для определения температурной зависимости коэффициента объемного расширения на основании уравнения состояния молекулярных кристаллов.

Для определения зависимости объема элементарной ячейки молекулярного кристалла от температуры при изобарическом сжатии и расширении будем использовать подход, разработанный в работе [12], в приближении высоких температур.

По определению коэффициент объемного расширения α имеет следующий вид [13]:

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p, \quad (1)$$

а связь между термодинамическими коэффициентами определяется термодинамическим равенством (аналог уравнения Грюнайзена для молекулярных кристаллов), полученным в работах [6, 12]

$$\alpha C_T^2 = \gamma_D(V) C_{VD}, \quad (2)$$

и зависимостью коэффициента Грюнайзена [14, 15] в приближении слабого сжатия

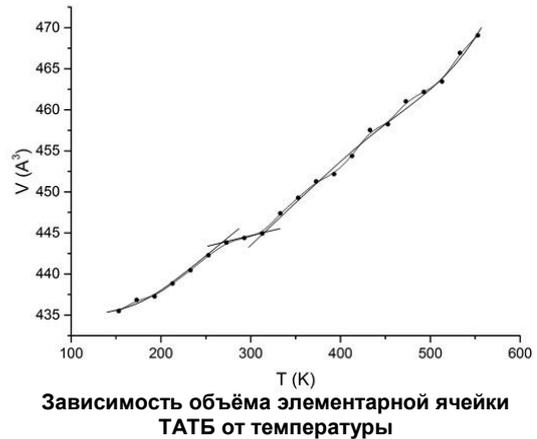
$$\gamma_D = \gamma_D^0 \left(\frac{V}{V_0} \right). \quad (3)$$

Здесь C_T – изотермическая скорость звука, γ_D^0 – значение коэффициента Грюнайзена при начальной температуре проведения экспериментов, C_{VD} – составляющая теплоемкости при постоянном объеме, зависящая от деформационных (низкочастотных) колебаний молекулы и определяемая в приближении Дебая [16, 17]:

$$C_{VD} = MR \left(4D(x_D) - \frac{3x_D}{\exp(x_D) - 1} \right) = MR D_C(x_D), \quad x_D = \frac{\theta_D}{T},$$

R – универсальная газовая постоянная, поделенная на молекулярную массу вещества μ ; M – число низкочастотных (деформационных) колебаний, приходящихся на одну молекулу ТАТБ; θ_D – характеристическая температура Дебая; T – температура тела; $D(x)$ – функция Дебая, которая определяется выражением вида [16]:

$$D(z) = \frac{3}{z^3} \int_0^z \xi^3 \frac{d\xi}{\exp(\xi) - 1},$$



$D_C(x)$ – функция теплоемкости Дебая, определяемая следующим образом [16]:

$$D_C(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \xi^4 \frac{\exp(\xi) d\xi}{(\exp(\xi) - 1)^2}.$$

После подстановки выражений (2) и (3) в равенство (1) проинтегрируем полученное дифференциальное уравнение по температуре от значения $T_0 = 293$ К до текущего значения T при постоянной изотермической скорости звука, в результате получим равенство, позволяющее определить зависимость объема элементарной ячейки V от температуры:

$$V = V_0 / (1 - K_\alpha (TD(x_D) - T_0 D(x_D^0))), \quad K_\alpha = MR(\gamma_D^0 / C_T^2), \quad (4)$$

где V_0 – объем элементарной ячейки при $T_0 = 293$ К, $x_D^0 = \theta_D^0 / T_0$. Аналогичный подход для определения зависимости плотности ρ от температуры применялся в работе [12] для случая высокотемпературного разложения функции Дебая, и была получена зависимость следующего вида:

$$\rho = Z \cdot \mu / (N_a V), \quad (5)$$

где N_a – число Авогадро, Z – количество молекул в элементарной ячейке.

Воспользоваться зависимостью (4) для аппроксимации полученных в данной работе экспериментальных данных, возможно в том случае, если удастся определить значение коэффициента K_α . Покажем, что экспериментальных данных, приведенных в табл. 1–4, достаточно для определения коэффициента K_α . С этой целью воспользуемся равенством (2), которое после проведения простых преобразований можно представить следующим образом:

$$K_\alpha = MR(\gamma_D^0 / C_T^2) = \alpha_0 / D_C(x_D^0),$$

где α_0 – значение коэффициента объемного расширения при температуре $T_0 = 293$ К. Подставляя полученное выражение в равенство (3), определим уравнение для описания зависимости объема элементарной ячейки от температуры в виде

$$V = V_0 / (1 - K_\alpha (TD(x_D) - T_0 D(x_D^0))) = V_0 / (1 - \alpha_0 (TD(x_D) - T_0 D(x_D^0)) / D_C(x_D^0)) \quad (6)$$

Зная зависимость объема элементарной ячейки от температуры (5), легко получить зависимость коэффициента объемного расширения от температуры. Подставив выражение (5) в равенство (2), получим:

$$\alpha = (\alpha_0 D_C(x_D) / D_C(x_D^0)) / (1 - \alpha_0 (TD(x_D) - T_0 D(x_D^0)) / D_C(x_D^0)). \quad (7)$$

В предельном случае при температуре $T = 0$ К равенство (6) переходит в следующее выражение

$$V_{0k} = V_0 / (1 + \alpha_0 T_0 D(x_D^0)) / D_C(x_D^0),$$

где V_{0k} – значение объема элементарной ячейки при $T = 0$ К, которое для ТАТБ равно $432,185 \text{ \AA}^3$ [12]. Найденное значение V_{0k} позволяет определить плотность кристалла ТАТБ при $T = 0$ К, которая определяется равенством (5) и равна $\rho_{0k} = 1986 \text{ кг/м}^3$. Для сравнения, значение плотности ТАТБ при $T = 0$ К, рассчитанное квантово-химическим методом *DFT* [18], приведенное в работе [19], $\rho_{0k} = 1982,7 \text{ кг/м}^3$.

Все необходимые для проведения вычислений по формулам (6) и (7) данные выбраны из работ [12, 20] и приведены в табл. 1.

Таблица 1

Параметры	Название ВВ			
	гексоген	ТЭН	ТАТБ	октоген
M	12	16	12	12
$\theta_D^0, \text{ К}$	157,83	134,44	137,30	160,15
$\alpha_0 10^{-4}, \text{ К}^{-1}$	1,91	2,32	1,119	1,625

Экспериментальные исследования по изобарическому нагреву и охлаждению

В данной работе экспериментальные исследования изобарического расширения (сжатия) проводились методом порошковой терморентгенографии с помощью многофункционального научно-исследовательского комплекса (МНИК) ARL X'TRA с использованием низко-

высокотемпературной приставки AntonPaar ТТК450, тонкоплёночного коллиматора и параболического зеркала.

В общем случае методика проведения анализа структуры молекулярных кристаллов и её уточнение для однофазных материалов по данным порошковой терморентгенографии приведена в работах [7–10]. Расчётные операции выполняются в соответствии с физическими закономерностями классической электродинамики и квантовой теорией строения вещества.

Результаты проведенных экспериментальных исследований изобарического расширения (сжатия) элементарных ячеек для гексогена, октогена и ТЭНа, приведены в табл. 2–4 соответственно. Полученные данные по кристаллической структуре указанных материалов при нормальных условиях хорошо согласуются с известными экспериментальными данными других авторов [20]. В табл. 2–4 приведены также значения рассчитанных объемов элементарных ячеек для выбранных молекулярных кристаллов ТЭНа, гексогена, октогена при различных температурах соответственно.

Таблица 2

T, K	V_{ex}, A^3	V_C, A^3	T, K	V_{ex}, A^3	V_C, A^3
153	579,796	575,420	273	591,186	591,191
163	580,339	576,683	283	591,441	592,558
173	581,393	577,958	293	593,932	593,932
183	582,120	579,242	303	595,720	595,314
193	579,344	580,536	313	597,134	596,703
203	580,609	581,839	323	598,206	598,099
213	583,386	583,151	333	599,793	599,502
223	582,963	584,471	343	601,170	600,913
233	583,639	585,800	353	602,541	602,331
243	585,801	587,136	363	603,423	603,757
253	586,735	588,480	373	605,155	605,190
263	588,175	589,832			

Таблица 3

T, K	V_{ex}, A^3	V_C, A^3	T, K	V_{ex}, A^3	V_C, A^3
153	1607,932	1598,830	313	1644,653	1647,326
163	1611,374	1601,708	323	1648,119	1650,497
173	1614,187	1604,613	333	1652,242	1653,683
183	1616,058	1607,542	343	1656,162	1656,884
193	1617,559	1610,495	353	1660,121	1660,098
203	1620,933	1613,468	363	1659,709	1663,328
213	1623,047	1616,460	373	1663,574	1666,571
223	1624,442	1619,472	383	1664,780	1669,829
233	1626,790	1622,502	393	1669,763	1673,101
243	1627,498	1625,549	403	1672,316	1676,387
253	1630,192	1628,613	413	1675,445	1679,687
263	1633,372	1631,693	423	1678,106	1683,002
273	1635,652	1634,789	433	1681,234	1686,331
283	1640,582	1637,900	443	1684,898	1689,673
293	1641,027	1641,027	453	1690,062	1693,031
303	1643,731	1644,169			

Данные табл. 2–4 показывают, что рассчитанные и экспериментальные значения объемов элементарных ячеек кристаллов ТЭНа, гексогена и октогена различаются не более 2–3 % во всем диапазоне изменения температур.

В табл. 5 на основании выражения (7) приведены безразмерные значения коэффициента объемного расширения α/α_0 для молекулярных кристаллов ТЭНа, гексогена и октогена в зависимости от температуры.

Таблица 4

T, K	V_{ex}, A^3	V_C, A^3	T, K	V_{ex}, A^3	V_C, A^3
153	510,913	507,414	273	517,226	517,124
163	511,880	508,193	283	518,103	517,962
173	512,049	508,979	293	518,803	518,803
183	512,638	509,771	313	520,171	520,496
193	512,785	510,570	333	521,635	522,203
203	513,935	511,373	353	523,204	523,924
213	514,095	512,182	373	525,076	525,658
223	514,414	512,995	393	525,916	527,406
233	515,279	513,812	413	527,850	529,166
243	515,563	514,634	433	528,857	530,940
253	516,084	515,460	453	530,443	532,727
263	516,788	516,290			

Таблица 5

T, K	α / α_0		
	ТЭН	Гексоген	Октоген
153	0,9423	0,9378	0,9404
163	0,9486	0,9453	0,9479
173	0,9543	0,9520	0,9544
183	0,9595	0,9579	0,9602
193	0,9642	0,9632	0,9653
203	0,9686	0,9680	0,9700
213	0,9727	0,9725	0,9743
223	0,9766	0,9766	0,9782
233	0,9803	0,9805	0,9819
243	0,9839	0,9841	0,9853
253	0,9873	0,9876	0,9885
263	0,9906	0,9909	0,9916
273	0,9938	0,9940	0,9945
283	0,9969	0,9971	0,9973
293	1,0000	1,0000	1,0000
303	1,0030	1,0029	1,0026
313	1,0060	1,0056	1,0051
323	1,0089	1,0083	1,0076
333	1,0118	1,0110	1,0099
343	1,0146	1,0136	1,0123
353	1,0175	1,0162	1,0145
363	1,0203	1,0187	1,0168
373	1,0231	1,0212	1,0190
383	1,0258	1,0237	1,0212
393	1,0286	1,0261	1,0233
403	1,0314	1,0285	1,0254
413	1,0341	1,0309	1,0275
423	1,0368	1,0333	1,0296
433	1,0396	1,0357	1,0317
443	1,0423	1,0380	1,0337
453	1,0451	1,0404	1,0358

Представленные в данной работе результаты показывают, что тепловая часть уравнений состояния [6] правильно описывает температурную зависимость объема молекулярного кристалла и может применяться с высокой точностью (менее 2 %) для аппроксимации экспериментальных данных, связанных с определением изобарического коэффициента объемного расширения.

Литература

1. Сон, Э.Е. Современные исследования теплофизических свойств веществ (на основе последних публикаций в ТВТ) (Обзор) / Э.Е. Сон // Теплофизика высоких температур. – 2013. – Т. 51, № 3. – С. 392–411.
2. Исследования теплофизических свойств веществ и материалов в Новосибирском научном центре СО РАН в 2002–2012 годах / С.В. Станкус, Р.А. Хайрулин, В.Г. Мартынец, П.П. Безверхий // Теплофизика высоких температур. – 2013. – Т. 51, № 5. – С. 769–786.
3. Хищенко, К.В. Исследование уравнений состояния материалов при высокой концентрации энергии / К.В. Хищенко, В.Е. Фортов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. – 2014. – Т. IV, № 1. – С. 6–16.
4. Жарков, В.Н. Уравнения состояния при высоких температурах и давлениях / В.Н. Жарков, В.А. Калинин. – М.: Наука, 1968. – 311 с.
5. Ковалев, Ю.М. Математическое моделирование тепловой составляющей уравнения состояния молекулярных кристаллов / Ю.М. Ковалев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 34–42.
6. 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.
7. Исследование параметров кристаллической и молекулярной структуры дифениламина с помощью кристаллографической модели, построенной по данным порошковой дифрактометрии / А.В. Станкевич, Л.Х. Бадретдинова, Д.А. Хадиева и др. // Вестник Казан. технол. ун-та. – 2013. – № 21. – С. 26–29.
8. Построение и исследование кристаллографической модели бензотрифуроксана на основе данных порошковой дифрактометрии / А.В. Станкевич, Б.Г. Лобойко, О.В. Костицын, Н.П. Тайбинов, А.И. Ахметзянов // Доклады III Всероссийской научно-практической конференции молодых ученых и специалистов «Материалы и технологии XXI века», г. Бийск, 18–20 сентября 2013 г. – С. 131–136.
9. Пат. 2566399 Российская Федерация, МПК G01N 23/20. Способ определения структуры молекулярных кристаллов / А.В. Станкевич, О.В. Костицын, Н.П. Тайбинов. – № 2014115539/28, Заявл. 17.04.2014, Опубл. 27.10.2015, Бюл. № 30. – 16 с.
10. Crystal State of 1,3,5-Triamino-2,4,6-Trinitrobenzene (TATB) Undergoing Thermal Cycling Process / J. Sun, B. Kang, C. Xue *et al.* // J. Energetic Mater. – 2010. – Vol. 28, № 3. – P. 189–201.
11. Определение параметров уравнения состояния молекулярных кристаллов TATB на основе дифрактометрических исследований / М.А. Бирюкова, Д.В. Петров, Ю.М. Ковалев, Е.Б. Смирнов, А.В. Станкевич // XV Всероссийский симпозиум по горению и взрыву. Тезисы докладов. – Черноголовка, 2020. – С. 24–25.
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. Базаров, И.П. Термодинамика / И.П. Базаров. – М.: Высшая школа, 1991. – 375 с.
14. Ковалев, Ю.М. Определение вида коэффициента Грюнайзена для молекулярных кристаллов / Ю.М. Ковалев // Доклады Академии наук. – 2005. – Т. 403, № 4. – С. 475–477.
15. Ковалев, Ю.М. Функция Грюнайзена для твердых взрывчатых веществ / Ю.М. Ковалев // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов. – 2005. – № 2. – С. 55–59.
16. Жирифалько, Л. Статистическая физика твердого тела / Л. Жирифалько – М.: Мир, 1975. – 382 с.
17. 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.
18. Степанов, Н.Ф. Квантовая химия сегодня / Н.Ф. Степанов, Ю.В. Новаковская // Рос. хим. журнал. – 2007. – Т. LI, № 5. – С. 5–17.

19. Rykounov. A.A. Investigation of the Pressure Dependent Thermodynamic and Elastic Properties of 1,3,5-Triamino-2,4,6-Trinitrobenzene using Dispersion Corrected Density Functional Theory / A.A. Rykounov // J. Appl. Phys. – 2015. – Vol. 117. – P. 215901.

20. Gibbs, T.R., LASL Explosive Property Data. Los Alamos Series on Dynamic Material Properties / T.R. Gibbs, A. Popolato. – Berkeley. Los Angeles, London: University of California Press, 1980. – 479 p.

Поступила в редакцию 26 мая 2023 г.

Сведения об авторах

Бирюкова Марина Анатольевна – аспирант, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация; младший научный сотрудник, Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск, Российская Федерация, e-mail: bma_vniitf@mail.ru.

Ковалев Юрий Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра вычислительной механики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: yum_kov@mail.ru.

Петров Дмитрий Витальевич – доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, главный конструктор, Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск, Российская Федерация.

Станкевич Александр Васильевич – кандидат технических наук, ведущий научный сотрудник, Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск, Российская Федерация.

Шестаков Михаил Александрович – магистрант, кафедра вычислительной механики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2023, vol. 15, no. 3, pp. 70–78*

DOI: 10.14529/mmph230308

DETERMINING THE PARAMETERS OF THE EQUATION OF THE STATE OF MOLECULAR CRYSTALS BASED ON DIFFRACTOMETRIC STUDIES

M.A. Biryukova^{1,2}, Yu.M. Kovalev¹, D.V. Petrov², A.V. Stankevich², M.A. Shestakov¹

¹ *South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation*

² *Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation*

Abstract. The paper presents the results of determining the crystal structure of PETN, hexogen, and HMX samples by X-ray diffractometry and calculations of the unit cell parameters of molecular crystals associated with the processing of X-ray diffractometry results, and experimental relationships between the unit cell volumes of molecular crystals on temperature. The obtained experimental data on the isobaric compression and expansion of the studied molecular crystals allowed us to specify the thermal component of the equations of the state of molecular crystals and obtain an expression for the isobaric thermal expansion coefficient associated with the mathematical model of the thermal component of the equations of state of molecular crystals. The obtained analytical dependence of the isobaric coefficient of thermal expansion on the temperature of the considered samples correctly describes the limiting transition to low temperatures.

We propose a method of approximation for the obtained experimental relationships between temperature and the unit cell volume of the studied substances under isobaric compression/expansion based on a mathematical model of the semi-empirical equations of state of molecular crystals. This approach allowed us to obtain analytical relationships between the crystal unit cell volume and temperature, which describes the results of X-ray diffractometry of the molecular crystal samples considered in the work with an accuracy of up to 3 %.

Keywords: equation of state; molecular crystal; isobar; diffractometry; Debye approximation.

References

1. Son E.E. Current Investigations of Thermophysical Properties of Substances (Based on Recent Publications in the Journal High Temperature). *High Temperature*, 2013, Vol. 51, no. 3, pp. 351–368. DOI: 10.1134/S0018151X1303005X
2. Stankus S.V., Khairulin R.A., Martynets V.G., Bezverkhii P.P. Studies of the thermophysical properties of substances and materials at the Novosibirsk scientific center of the Siberian branch of the Russian academy of sciences, 2002–2012. *High Temperature*, 2013, Vol. 51, no. 5, pp. 695–711. DOI: 10.1134/S0018151X13050209
3. Khishchenko K.V., Fortov V.E. Investigation of Equations of State of Materials at High Concentration of Energy. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*, 2014, Vol. IV, no. 1, pp. 6–16. (In Russ.).
4. Zharkov V.N., Kalinin V.A. *Uravneniya sostoyaniya pri vysokikh temperaturakh i davleniyakh* (Equations of state at high temperatures and pressures). Moscow, Nauka Publ., 1968, 311 p. (in Russ.).
5. Kovalev Yu.M. Mathematical Modelling of the Thermal Component of the Equation of State of Molecular Crystals. *Bulletin of the South Ural State University. Series Mathematical Modelling, Programming & Computer Software*, 2013, Vol. 6, no. 1, pp. 34–42. (in Russ.).
6. Kovalev Y.M. Equations of State to Describe Isothermal Compression of Certain Molecular Nitro Compound Crystals. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2020, Vol. 93, no. 1, pp. 223–233. DOI: 10.1007/s10891-020-02112-9
7. Stankevich A.V., Badretdinova L.Kh., Khadieva D.A., Evseeva T.P., Bazotov V.Ya. Investigation of the Parameters of the Crystal and Molecular Structure of Diphenylamine using a Crystallographic Model Built from Powder Diffraction Data. *Bulletin of the Technological University*, 2013, Vol. 16, no. 21, pp.26–29. (In Russ.).
8. Stankevich A.V., Loboiko B.G., Kostitsyn O.V., Taybinov N.P., Akhmetzyanov A.I. Postroenie i issledovanie kristallograficheskoy modeli benzotrifuroksana na osnove dannykh poroshkovoy difraktometrii (Construction and Investigation of a Crystallographic Model of Benzotrifuroxane based on Powder Diffraction Data). *Doklady III Vserossiyskoy nauchno-prakticheskoy konferentsii molodykh uchenykh i spetsialistov "Materialy i tekhnologii XXI veka"*, g. Biysk, 18–20 sentyabrya 2013 g. (*Proc. III All-Russian Scientific and Practical Conference of Young Scientists and Specialists "Materials and Technologies of the XXI century"*, Biysk, September 18–20, 2013, pp. 131–136) (In Russ.).
9. Stankevich A.V., Kostitsyn O.V., Taybinov N.P. A method for determining the structure of molecular crystals. *Patent 2566399 Russian Federation*, IPC G01N 23/20. (In Russ.).
10. Sun J., Kang B., Xue C., Liu Y., Zhang W. Crystal State of 1,3,5-Triamino-2,4,6-Trinitrobenzene (TATB) Undergoing Thermal Cycling Process. *J. Energetic Mater*, 2010, Vol. 28, no. 3, pp. 189–201. DOI: 10.1080/07370650903401254
11. Biryukova M.A., Petrov D.V., Kovalev Y.M., Smirnov E.B., Stankevich A.V. Opredelenie parametrov uravneniya sostoyaniya molekulyarnykh kristallov TATB na osnove difraktometricheskikh issledovaniy (Determination of Parameters of the Equation of State of Molecular Crystals of TATB based on Diffractometric Studies). *XV Vserossiyskiy simpozium po goreniyu i vzryvu. Tezisy dokladov*. (Proc. XV All-Russian Symposium on combustion and explosion), Chernogolovka, 2020, pp. 24–25. (In Russ.).
12. Kovalev Y.M. Determination of the Temperature Dependence of the Isobaric Volumetric Expansion Coefficient for Certain Molecular Crystals of Nitro Compounds. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2018, Vol. 91, no. 6, pp. 1573–1582. DOI: 10.1007/s10891-018-1895-8
13. Bazarov I.P. *Termodinamika* (Thermodynamics). Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1991, 375 p. (in Russ.).
14. Kovalev Yu.M. Determination of the Form of the Grüneisen Coefficient for Molecular Crystals. *Doklady Physics*, 2005, Vol. 50, no. 8, pp. 393–396.
15. Kovalev Yu.M. Funktsiya Gryunayzena dlya tverdykh vzryvchatykh veshchestv (Grüneisen Function for Solid Explosives). *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Matematicheskoe*

modelirovanie fizicheskikh protsessov (VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc.), 2005, no. 2, pp. 55–59. (in Russ.).

16. Zhirifal'ko L. *Statisticheskaya fizika tverdogo tela* (Statistical physics of solid body). Moscow, Mir Publ., 1975, 382 p. (in Russ.).

17. Kovalev Y.M., Kuropatenko V.F. Determination of the temperature dependence of heat capacity for some molecular crystals of nitro compounds. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2018, Vol. 91, no. 2, pp. 278–287. DOI: 10.1007/s10891-018-1747-6

18. Stepanov N.F., Novakovskaya Yu.V. Kvantovaya khimiya segodnya (Quantum Chemistry Today). *Ros. Khim. Zhurnal*, 2007, Vol. LI, no. 5, pp. 5–17. (in Russ.).

19. Rykounov A.A. Investigation of the Pressure Dependent Thermodynamic and Elastic Properties of 1,3,5-Triamino-2,4,6-Trinitrobenzene using Dispersion Corrected Density Functional Theory. *J. Appl. Phys.*, 2015, Vol. 117, Iss. 21, p. 215901. DOI: 10.1063/1.4921815

20. Gibbs T.R., Popolato A. *LASL explosive property data. Los Alamos series on dynamic material properties*. Berkeley, Los Angeles, London, University of California Press, 1980, 479 p.

Received May 26, 2023

Information about the authors

Biryukova Marina Anatolyevna is Graduate Student, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation; Junior Research Fellow, Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation, e-mail: bma_vniitf@mail.ru.

Kovalev Yuri Mikhailovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Computational Mechanics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: yum_kov@mail.ru.

Petrov Dmitry Vitalievich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Corresponding Member of Russian Academy Science, Chief Designer, Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation.

Stankevich Alexander Vasilievich is Cand. Sc. (Engineering), Leading Researcher, Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation.

Shestakov Mikhail Alekandrovich is Master Student, Department of Computational Mechanics, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОНОВ В ПРЯМОУГОЛЬНОМ НАНОРЕЗОНАТОРЕ НА ОСНОВЕ ЗОЛОТА

И.В. Бычков, Д.А. Кузьмин, М.А. Загребина

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация
e-mail: m.zagrebina@list.ru

Аннотация. Изучается возбуждение поверхностных плазмон-поляритонов в ограниченной наноструктуре на основе дискретной модели двумерной области, взаимодействующей с осциллятором. Наноструктура представляет собой прямоугольник, выделенный на поверхности металла на границе раздела сред золото–оксид кремния, поверхностные плазмон-поляритоны возбуждаются точечным источником электромагнитного излучения, расположенным над поверхностью металла. Динамика точечного источника излучения описывается дискретным вариантом уравнения Ван дер Поля при малой нелинейности параметров источника. Из дисперсионного соотношения для поверхностных плазмон-поляритонов на одиночной границе раздела сред металл–диэлектрик в статье будут получены параметры структуры золото–оксид кремния (фазовая скорость волны, частота источника излучения, характерное время в системе и др.) и проанализированы распределения волнового поля в структуре при различных положениях точечного осциллятора и различных коэффициентах связи волнового поля с осцилляторами. Модовый состав резонансного поля в нанорезонаторе при различных положениях источника излучения и коэффициентах связи выявлен с помощью преобразования Фурье волнового поля по пространственным координатам, а также проанализирована временная эволюция амплитуд возбуждаемых мод волнового поля и приведены границы применимости рассматриваемой модели для исследования возбуждения поверхностных плазмон-поляритонов в ограниченной наноструктуре.

Ключевые слова: плазмоника; поверхностные плазмон-поляритоны; нанорезонаторы.

Введение

Поверхностные плазмон-поляритоны (ППП) – электромагнитные возбуждения в оптическом диапазоне частот, распространяющиеся в тонком слое на границе раздела металл–диэлектрик. ППП представляют собой связанные колебания электромагнитного поля в диэлектрике и электронной плазмы металла с отрицательной действительной частью диэлектрической функции [1].

Первое математическое описание поверхностных волн было представлено А. Зоммерфельдом в 1899 г. [2], а первый эксперимент, в котором наблюдался поверхностный плазмон-поляритон, провел Р. Вуд в 1902 г. [3]. Решения уравнений Максвелла, найденные в 1907–1909 гг. Дж. Ценнеком и А. Зоммерфельдом [4, 5] при рассмотрении задачи о распространении радиоволн вдоль поверхности металла с конечной проводимостью, полностью применимы для описания ППП на границе раздела проводник–диэлектрик. Во второй половине XX века Р. Ритчи провел детальное исследование ППП в тонких металлических пленках [6], а в 1968 г. Кречман и Рэтер представили общее описание возмущения поверхностных волн видимым светом [7].

Сильная локализация ППП позволяет рассматривать процессы на наномасштабах (электромагнитное излучение мало проникает в металл, оказываясь «запертым» в области, размеры которой в несколько раз меньше длины волны излучения), в настоящее время активно изучается возможность использования структур, поддерживающих ППП. Плазмонные волноводы могут быть применены для уменьшения размеров интегральных схем и увеличения скорости их работы, однако металлические наноструктуры обладают омическими потерями, которые необходимо компенсировать для увеличения длины пробега ППП в структуре [8]. Структуры, поддерживающие распространение ППП, могут быть использованы для создания новых типов устройств в нанoeлектронике. Так, сенсоры, использующие факт чувствительности поверхностных плазмонов к изменению диэлектрических свойств среды вблизи поверхности раздела, могут быть использова-

ны в биологии и химии для анализа белков и концентраций веществ. Спазеры (*Surface Plasmon Amplification by Stimulated Emission of Radiation* – усиление поверхностных плазмонов посредством вынужденного излучения), поверхностные плазмон-поляритоны в которых играют роль фотонов в лазерах. Спазеры состоят из квантовой точки, расположенной вблизи металлической наночастицы, и создают ближнее поле вместо излучения дальних полей, как в лазере. Спазеры могут быть использованы в спектроскопии: устройство состоит из металлической иглы, поддерживающей существование ППП. Спазер создает интенсивное поле в субволновой области пространства, вследствие чего обеспечивается высокая эффективность взаимодействия ППП с исследуемым образцом, полученный сигнал подается на анализатор спектра [10].

Исследование возбуждения ППП в ограниченной наноструктуре раздела золото–оксид кремния обладает потенциалом для развития науки и техники: в оптическом диапазоне золото обладает наименьшими омическими потерями в сравнении с другими металлами, оксид кремния обеспечивает локализацию электромагнитного поля в поперечном направлении.

Дискретная модель волнового поля в прямоугольной наноструктуре

Рассмотрим возбуждение ППП в ограниченной прямоугольной наноструктуре – нанорезонаторе. Наноструктура представляет собой границу раздела между диэлектриком и металлом, заполняющими полупространства. Над поверхностью металла расположен источник электромагнитного излучения, возбуждающий ППП. На поверхности металла выделен прямоугольник размерами L_x, L_y , в котором рассматривается волновое поле.

Дискретная модель волнового поля в прямоугольной области – двумерная решетка связанных цифровых дискретных фильтров [11]. Такая модель зарекомендовала себя и неоднократно применялась для описания возбуждения двумерного волнового поля ансамблем осцилляторов в различных структурах: круглой мембране; двумерной области в виде кругового кольца с гофрированной границей [12, 13].

Итерационная динамика волнового поля, возбуждаемого осцилляторами в прямоугольной области:

$$u(x, y, t + 1) = a_1 u(x, y, t) - a_2 u(x, y, t - 1) + bW(t, x \pm 1, y \pm 1) + gF(x, y, t), \quad (1)$$

где $W(t, x \pm 1, y \pm 1) = u(x - 1, y, t) + u(x + 1, y, t) + u(x, y - 1, t) + u(x, y + 1, t)$.

Функция $u(x, y, t)$ описывает состояние волнового поля в точке с координатами x, y в момент времени t ; время t изменяется дискретно, x, y также изменяются дискретно с единичным шагом, g – коэффициент связи волнового поля с осцилляторами. Связь коэффициентов модели с безразмерными параметрами – фазовой скоростью волны v и декрементом затухания γ

$$a_1 = 2(2v^2 - 1)e^{-\gamma}, \quad a_2 = e^{-2\gamma}, \quad b = v^2 e^{-\gamma}. \quad (2)$$

Для устойчивости решений уравнения (1) безразмерная скорость v в модели не должна превосходить $1/\sqrt{2}$.

Пространственные координаты принимают значения $0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y$. По координате x были приняты следующие граничные условия

$$u(0; y; t) = u(1; y; t); \quad (3)$$

$$u(L_x; y; t) = u(L_x - 1; y; t). \quad (4)$$

Граничные условия по продольной координате y

$$u(x; 0; t) = u(x; 1; t); \quad (5)$$

$$u(x; L_y; t) = u(x; L_y - 1; t). \quad (6)$$

Действие точечных осцилляторов на поле

$$F(x, y, t) = \sum_{n=1}^N \delta(x - x(n)) \delta(y - y(n)) z(n, t). \quad (7)$$

Для моделирования возбуждения ППП точечным источником, размещенным вблизи поверхности металла, будем считать, что динамика источника удовлетворительно описывается уравнением Ван дер Поля в дискретном случае при малых параметрах нелинейности источника [14].

Динамика осциллятора, взаимодействующего с волновым полем, определяется нелинейным уравнением

$$z(n, t + 1) = d_1(z)z(n, t) - d_2(z)z(n, t - 1) + g\Delta u(x(n), y(n), t), \quad (8)$$

где $\Delta u(x(n), y(n), t) = u(x(n), y(n), t) - u(x(n), y(n), t - 1)$.

Коэффициенты уравнения зависят от состояния осциллятора следующим образом:

$$d_1 = 2 \exp(\varepsilon(1 - \alpha z^2(n, t))) \cos(\beta), \quad d_2 = \exp(2\varepsilon(1 - \alpha z^2(n, t))), \quad (10)$$

где β – частота осциллятора, α, ε – его нелинейные параметры.

Расчет параметров для наноструктуры Au-SiO₂

Из дисперсионного соотношения для ППП на одиночной границе раздела металла с диэлектрической функцией ε_1 ($\text{Re}(\varepsilon_1(\omega)) < 0$) и диэлектрика с диэлектрической проницаемостью ε_2 получается выражение для фазовой скорости

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k_{spp}} = c \sqrt{\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2}}. \quad (10)$$

После преобразований получим

$$v_{ph} = \frac{c}{|\varepsilon_1| \sqrt{\varepsilon_2}} \sqrt{|\varepsilon_1|^2 + \varepsilon_2 (\text{Re}(\varepsilon_1) - i \cdot \text{Im}(\varepsilon_1))}. \quad (11)$$

Обозначим

$$v_{ph} = c \cdot \tilde{v} = (\text{Re}(\tilde{v}) + i \text{Im}(\tilde{v})) \cdot c. \quad (12)$$

Частота воздействия задается выражением

$$\omega = ck = c \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (13)$$

Диэлектрическая проницаемость кварцевого стекла $\varepsilon_2 = 4$, плазменная частота золота $\omega_p = 1,39 \cdot 10^{16}$ Гц. При длине волны излучения $\lambda = 1,5 \cdot 10^{-6}$ м частота воздействия $\omega \sim 10^{15}$ Гц, диэлектрическая функция золота $\varepsilon_1 = -190 + 19i$; $|\varepsilon_1| = 191$. Таким образом, значение $v = 0,5 + 10^{-4}i$.

Действительная часть выражения (12) отвечает за фазовую скорость волны и имеет вид

$$\text{Re}(v_{ph}) = v \cdot \frac{\Delta r}{\Delta t}, \quad (14)$$

где v – безразмерная скорость волны в модели. Из условия устойчивости решений уравнения (1), параметр $v < 1/\sqrt{2}$. Сравнивая полученное значение коэффициента v и выражение (14), можем принять отношение $\frac{\Delta r}{\Delta t}$ равным скорости света, т.к. действительная часть коэффициента

$\text{Re}(v) = 0,5 < 1/\sqrt{2}$. Мнимая часть выражения (12) отвечает за декремент затухания электромагнитной волны.

Будем считать, что шаг сетки Δr цифровых фильтров, являющейся дискретной моделью двумерного волнового поля в прямоугольном резонаторе, по порядку величины составляет 1 нм. Тогда характерное время Δt по порядку величины составляет 10^{-18} с = 1 ас.

Безразмерная частота осциллятора связана с характерным временем как

$$\beta = \frac{\omega}{2\pi} \Delta t = \frac{c}{\lambda} \Delta t. \quad (15)$$

Тогда при $\lambda = 1,5 \cdot 10^{-6}$ частота осциллятора составляет $\beta \sim 6 \cdot 10^{-4}$.

Распределения волнового поля в наноструктуре при различных положениях осциллятора и различных коэффициентах связи волнового поля с осцилляторами

Рассмотрим распределения резонансного волнового поля, рассчитанные на основании дискретной модели (1)–(9) в структуре с размерами $L_x = 32$ нм, $L_y = 32$ нм по простейшей длительно-

го времени. Частота осциллятора β принимается равной 0,0006; коэффициент связи волнового поля с осциллятором g принимается равным 0,1; 0,25 и 0,5. На рис. 1 стационарное волновое поле рассчитано при размещении осциллятора в точке (1;16) данной структуры, на рис. 2 – при смещении осциллятора в центр рассматриваемой структуры.

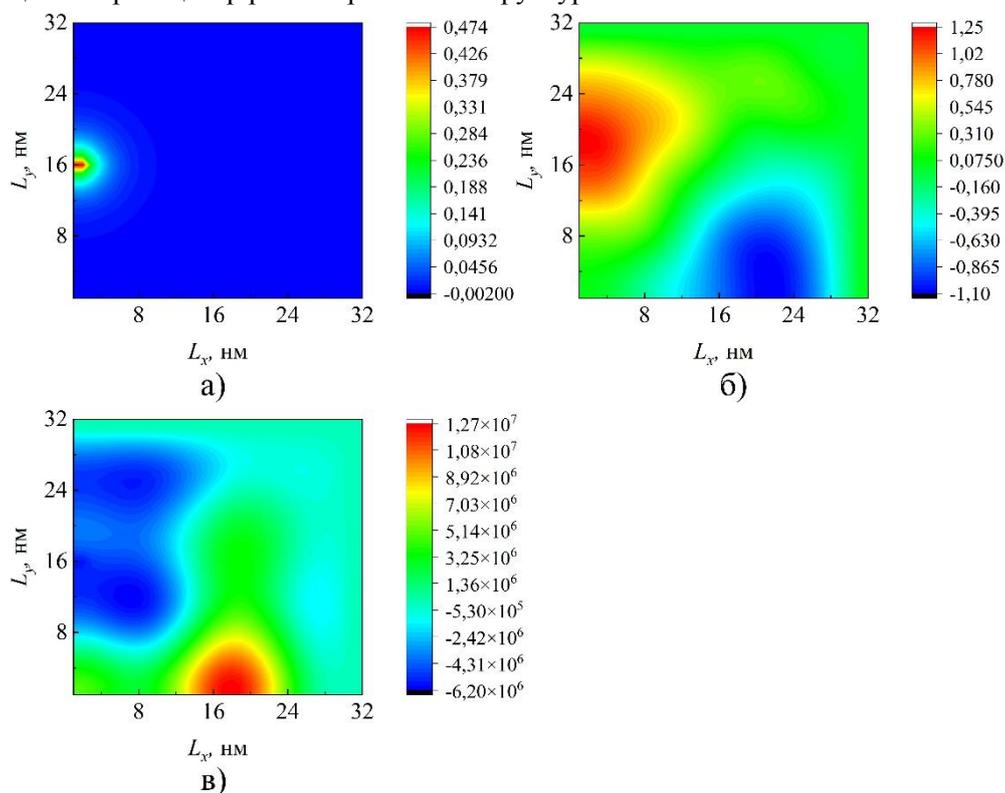


Рис. 1. Волновое поле в структуре с размерами $L_x = 32$ нм, $L_y = 32$ нм, осциллятор в точке (1;16), частота осциллятора $\beta = 0,0006$, коэффициент связи волнового поля с осциллятором а) $g = 0,1$; б) $g = 0,25$; в) $g = 0,5$

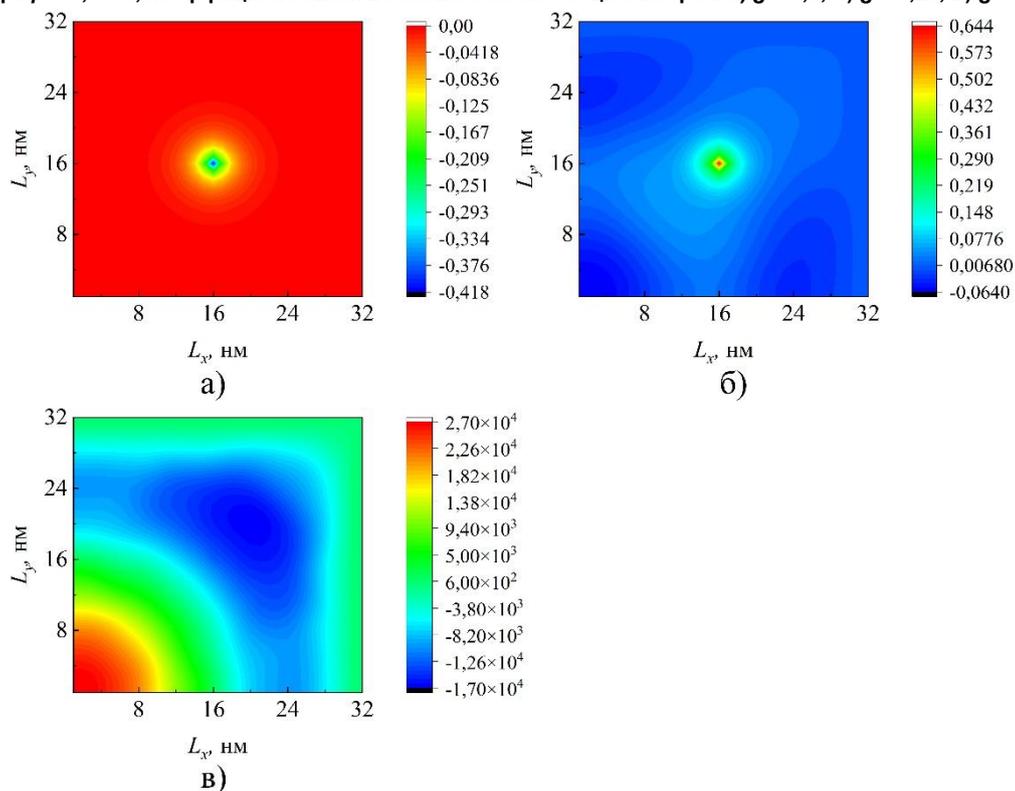


Рис. 2 Волновое поле в структуре с размерами $L_x = 32$ нм, $L_y = 32$ нм, осциллятор в точке (16;16), частота осциллятора $\beta = 0,0006$, коэффициент связи волнового поля с осциллятором а) $g = 0,1$; б) $g = 0,25$; в) $g = 0,5$

На рис. 1 и 2 видно, что при малых значениях коэффициента связи волнового поля с осцилляторами g преобладает равномерная составляющая поля. При увеличении данного параметра значительно меняется модовый состав, а также существенно увеличивается амплитуда резонансного волнового поля. Когда осциллятор располагается у края нанорезонатора, можно отметить, что увеличение коэффициента связи влияет на изменение модового состава сильнее, чем при расположении осциллятора в центре структуры.

Для выявления модового состава волнового поля в нанорезонаторе вычислим его преобразование Фурье по пространственным координатам, получим набор коэффициентов – амплитуд мод резонансного волнового поля

$$u(f_k, f_n) = \sum_{k=0}^{L_x-1} \sum_{n=0}^{L_y-1} u_{kn} \exp\left(-i \frac{2\pi f_k}{L_x} k\right) \exp\left(-i \frac{2\pi f_n}{L_y} n\right) = \sum_{k=0}^{L_x-1} \sum_{n=0}^{L_y-1} u_{kn} \cos\left(\frac{2\pi f_k}{L_x} k + \frac{2\pi f_n}{L_y} n\right) - i \sum_{k=0}^{L_x-1} \sum_{n=0}^{L_y-1} u_{kn} \sin\left(\frac{2\pi f_k}{L_x} k + \frac{2\pi f_n}{L_y} n\right), \quad (16)$$

где k – число длин волн (максимумов), укладываемых на стороне L_x , n – число длин волн (максимумов), укладываемых на стороне L_y . Пространственное преобразование Фурье позволит также проанализировать эволюцию модового состава волнового поля с течением времени.

На рис. 3 приведены пространственные преобразования Фурье волнового поля в структуре с размерами $L_x = 32$ нм, $L_y = 32$ нм при различных значениях параметра связи волнового поля с осцилляторами g , осциллятор с частотой $\beta = 0,0006$ помещен в точку (1;16). На рис. 4 показаны пространственные преобразования Фурье волнового поля в рассматриваемой структуре с осциллятором, помещенным в точку (16;16).

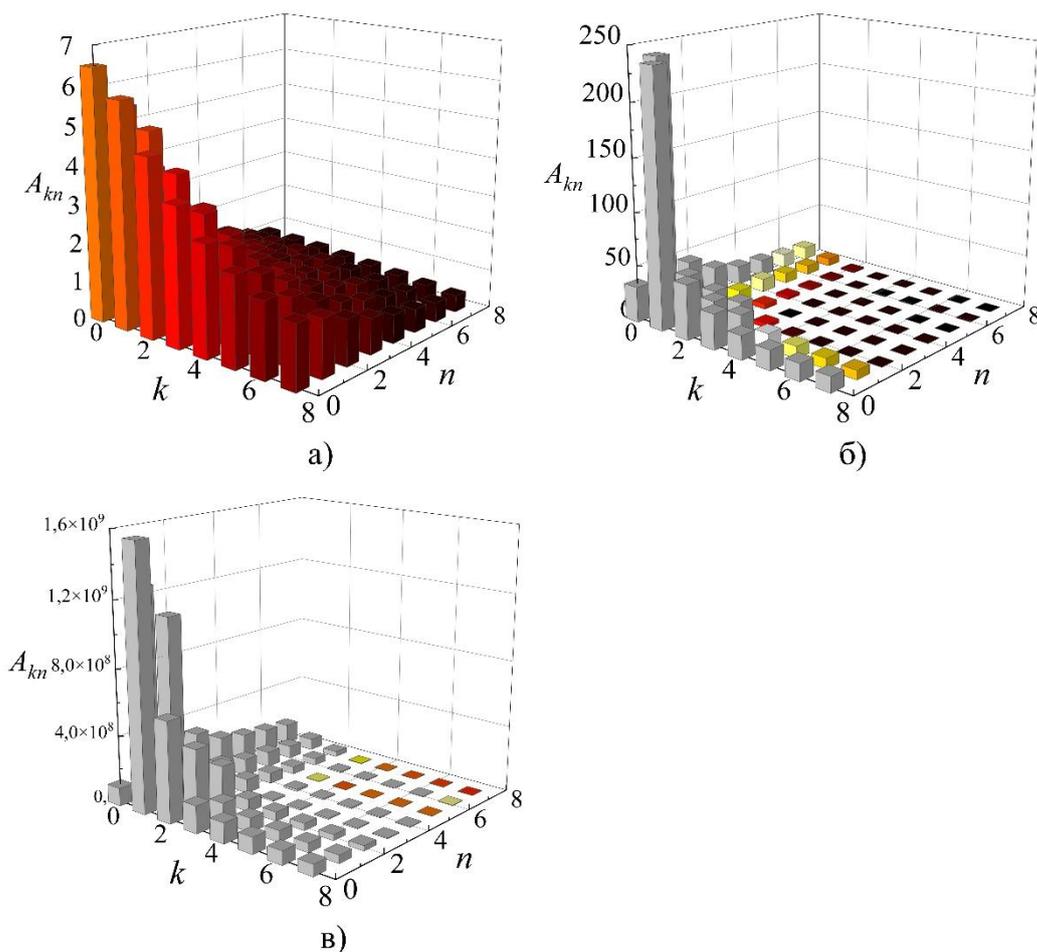


Рис. 3 Амплитуды возбуждаемых мод с индексами $(k; n)$ волнового поля в структуре $L_x = 32$ нм, $L_y = 32$ нм, осциллятор помещен в точку (1;16), частота осциллятора $\beta = 0,0006$, коэффициент связи волнового поля с осцилляторами а) $g = 0,1$; б) $g = 0,25$; в) $g = 0,5$

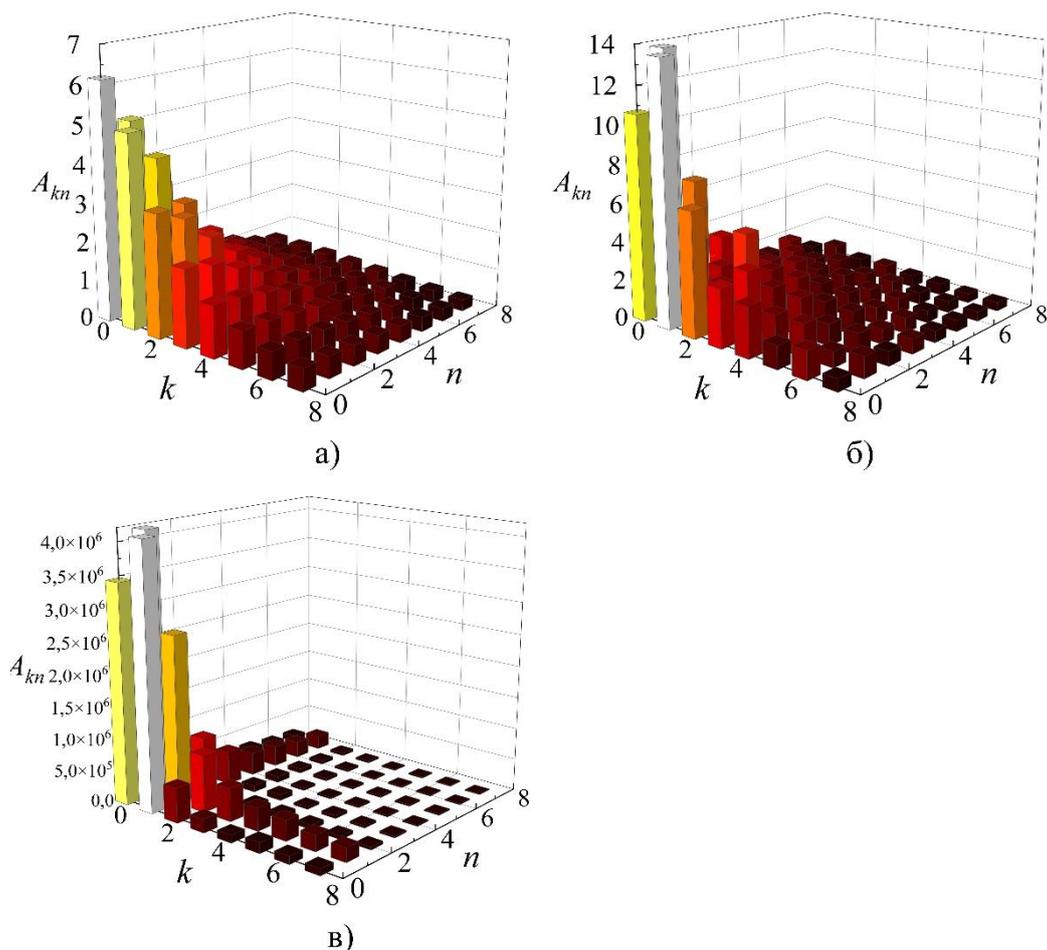


Рис. 4 Амплитуды возбуждаемых мод с индексами $(k; n)$ волнового поля в структуре $L_x = 32$ нм, $L_y = 32$ нм, осциллятор помещен в точку $(16;16)$, частота осциллятора $\beta = 0,0006$, коэффициент связи волнового поля с осцилляторами а) $g = 0,1$; б) $g = 0,25$; в) $g = 0,5$

Видно, что в рассматриваемой структуре наибольшую амплитуду имеют моды резонансного волнового поля низших порядков: $(0;0)$, $(1;0)$ и $(0;1)$. Когда коэффициент связи волнового поля с осцилляторами $g = 0,1$, преобладает мода $(0;0)$. При увеличении данного параметра амплитуда мод $(1;0)$ и $(0;1)$ значительно возрастает, намного превышая амплитуду моды $(0;0)$.

Также можно отметить, что в случае расположения осциллятора у края нанорезонатора амплитуда возбуждаемых мод превосходит амплитуду мод волнового поля в структуре с осциллятором, расположенным в центре. Из этого можно сделать вывод, что расположение источника колебаний у края нанорезонатора более эффективно для возбуждения резонатора в одномодовом режиме.

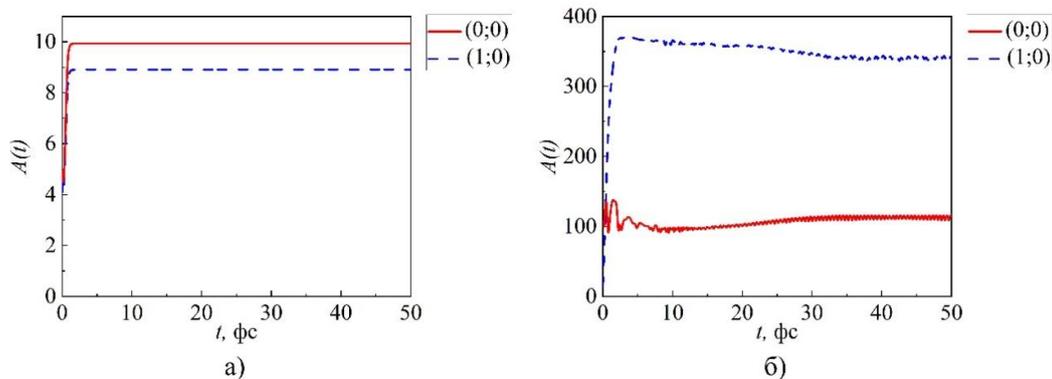


Рис. 5 Временная эволюция амплитуд мод $(k; n)$ резонансного волнового поля в структуре с размерами $L_x = 32$ нм, $L_y = 32$ нм, осциллятор в точке $(1;16)$, частота осциллятора $\beta = 0,0006$, коэффициент связи волнового поля с осцилляторами а) $g = 0,1$; б) $g = 0,25$

Рассмотрим изменение огибающих амплитуд возбуждаемых мод волнового поля в структуре с течением времени. На рис. 5 приведена временная эволюция амплитуд мод волнового поля в нанорезонаторе с размерами $L_x = 32$ нм, $L_y = 32$ нм при значениях коэффициента связи волнового поля с осцилляторами $g = 0,1$ и $0,25$. Осциллятор с частотой $\beta = 0,0006$ расположен в точке (1; 16).

При значении $g = 0,1$ на рис. 5, а огибающая амплитуд прекращает свой рост приблизительно после наступления времени $t = 2$ фс, огибающая амплитуды моды (0;0) превосходит огибающую (1;0). Т.к. динамика источника электромагнитной волны описывается уравнением Ван дер Поля при малой нелинейности параметров, в системе устанавливается равновесие между энергией, теряемой в резонаторе за счет омических потерь, и энергии, поступающей от осциллятора.

При значении $g = 0,25$ на рис. 5, б огибающая амплитуда моды (1;0) достигает максимума приблизительно при $t = 4$ фс и превосходит огибающую (0;0) более, чем в три раза, причем, с течением времени амплитуда моды (1;0) медленно снижается, приблизительно при $t = 35$ фс выходит на стационарную амплитуду. В промежутке времени до $t = 10$ фс огибающая амплитуды моды (0;0) проходит через ряд локальных максимумов и минимумов, а после времени $t = 30$ фс огибающая испытывает выход в стационарный режим.

Рассмотрим эволюцию амплитуд мод волнового поля в нанорезонаторе с размерами $L_x=32$ нм, $L_y = 32$ нм с течением времени. Осциллятор с частотой $\beta = 0,0006$ расположен в точке (1; 16) коэффициент связи волнового поля с осцилляторами $g = 0,5$

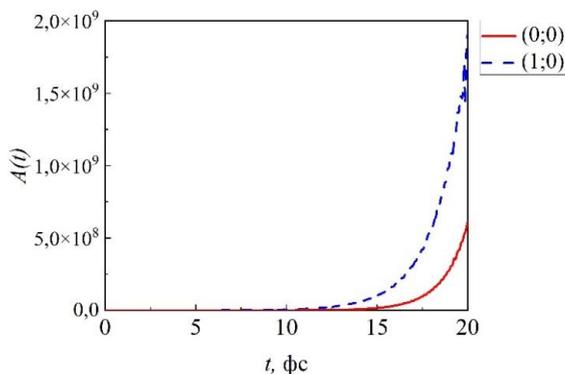


Рис. 6 Временная эволюция амплитуд мод $(k; n)$ резонансного волнового поля в структуре с размерами $L_x = 32$ нм, $L_y = 32$ нм, осциллятор помещен в точку (1;16), частота осциллятора $\beta = 0,0006$, коэффициент связи волнового поля с осцилляторами $g = 0,5$

На рисунке 6 видно, что при $g = 0,5$ амплитуда возбуждаемых мод неограниченно возрастает, причем, амплитуда моды (1;0) при $t = 20$ фс превышает амплитуду моды (0;0) более, чем в два раза. Это свидетельствует о том, что при больших значениях коэффициента g модель перестает быть устойчивой и не может быть применена для корректного моделирования возбуждения поверхностных плазмон-поляритонов в ограниченной наноструктуре.

Таким образом, в данной статье на основе дискретной модели волнового поля, возбуждаемого осцилляторами, было теоретически исследовано возбуждение поверхностных плазмон-поляритонов в ограниченной прямоугольной наноструктуре, состоящей из золота и кварцевого стекла: для моделирования возбуждения поверхностных плазмон-поляритонов в металлической структуре были рассчитаны значения фазовой скорости, частоты источника излучения, а также значения характерного времени в системе, получены распределения волнового поля в прямоугольной области и проведено преобразование Фурье резонансного поля по пространственным координатам и проанализирована временная эволюция амплитуд возбуждаемых мод волнового поля при различных коэффициентах связи волнового поля с осцилляторами и при различных положениях осциллятора. Увеличение коэффициента связи волнового поля с осцилляторами g приводит к росту амплитуд возбуждаемых резонансов. Особенно сильно возрастают амплитуды мод (1;0) и (0;1). При величине $g > 0,5$ амплитуда волнового поля неограниченно возрастает, как и амплитуда колебаний осциллятора, что говорит о неустойчивости модели в таком диапазоне параметров. Так, полученные результаты могут быть полезны для создания заданного распределения интенсивности поверхностных плазмон-поляритонов в наноструктурах.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ 075-01493-23-00).

Литература

1. Майер, С.А. Плазмоника: теория и приложения / С.А. Майер. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2011. – 296 с.
2. Sommerfeld, A. Ueber die Fortpflanzung elektrodynamischer Wellen längs eines Drahtes / A. Sommerfeld // Ann. Phys. – 1899. – Vol. 303. – P. 233–290.
3. Wood, R.W. On a Remarkable Case of Uneven Distribution of Light in a Diffraction Grating Spectrum / R.W. Wood // Proceedings of the Physical Society of London. – 1902. – Vol. 18, no. 1. – P. 269–275.
4. Zenneck, J. Über die Fortpflanzung ebener elektromagnetischer Wellen längs einer ebenen Leiterfläche und ihre Beziehung zur drahtlosen Telegraphie / J. Zenneck // Ann. Phys. – 1907. – Vol. 328, Iss. 10. – P. 846–866.
5. Sommerfeld, A. Über die Ausbreitung der Wellen in der drahtlosen Telegraphie / A. Sommerfeld // Ann. Phys. – 1909. – Vol. 333, Iss. 4. – P. 665–736.
6. Ritchie R.H. Plasma Losses by Fast Electrons in Thin Films / R.H. Ritchie // Phys. Rev. – 1957. – Vol. 106, Iss. 5. – P. 874–881.
7. Kretschmann, E. Radiative Decay of Non Radiative Surface Plasmons Excited by Light / E. Kretschmann, H. Raether // Zeitschrift für Naturforschung A. – 1968. – Vol. 23, Iss. 12. – P. 2135–2136.
8. Федянин, Д.Ю. Усиление поверхностных плазмон-поляритонов в наноразмерных волноводах: дис. ... канд. физ.-мат. наук / Д.Ю. Федянин. – Долгопрудный, 2013. – 138 с.
9. Hugall, J.T. Plasmonic cavity coupling / J.T. Hugall, A. Singh, N.F. van Hulst // ACS Photonics. – 2018. – Vol. 5, no. 1. – P. 43–53.
10. Квантовая наноплазмоника: учебное пособие / Е.С. Андрианов, А.П. Виноградов, А.В. Дорофеевко и др. – Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», 2015. – 368 с.
11. Корниенко, В.Н. Особенности многоволновой самосогласованной динамики ансамбля автогенераторов и поля в прямоугольной области / В.Н. Корниенко, А.П. Привезенцев // Радиотехника и электроника. – 2013. – Т. 58, № 7. – С. 691–698.
12. Корниенко, В.Н. Возбуждение волн круглой мембраны ансамблем автогенераторов / В.Н. Корниенко, А.П. Привезенцев // Радиотехника и электроника. – 2010. – Т. 55, № 3. – С. 362–368.
13. Корниенко, В.Н. Формирование пространственно-временных структур в системе активная среда-волновое поле в области с полупрозрачной границей / В.Н. Корниенко, А.П. Привезенцев // Радиотехника и электроника. – 2011. – Т. 56, № 4. – С. 417–422.
14. Привезенцев, А.П. Теория колебаний: учеб. пособие / А.П. Привезенцев. – Челябинск: Челяб. гос. ун-т, 2007. – 111 с.

Поступила в редакцию 17 июля 2023 г.

Сведения об авторах

Бычков Игорь Валерьевич – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: bychkov@csu.ru.

Кузьмин Дмитрий Александрович – доктор физико-математических наук, кафедра радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: kuzmind@csu.ru.

Загребина Марина Антоновна – студентка группы ФФ-404, кафедра радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: m.zagrebina@list.ru.

THE MODELING OF SURFACE PLASMON POLARITONS EXCITATION IN A RECTANGULAR GOLD-BASED NANORESONATOR

I.V. Bychkov, D.A. Kuzmin, M.A. Zagrebina

Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation
e-mail: m.zagrebina@list.ru

Abstract. This paper considers the modeling of surface plasmon polaritons excitation in a limited nanostructure on the basis of a two-dimensional area discrete model, the area interacts with the oscillator. The nanostructure is a rectangle defined on the metal surface at the interface of the gold–silicon oxide, the surface plasmon–polaritons are excited by an electromagnetic radiation point source located above the metal surface. The dynamics of radiation point source is described by a discrete version of the Van der Pol equation with a small nonlinearity of the source parameters. The parameters of the gold–silicon oxide structure (the wave phase speed, the radiation source frequency, the characteristic time in the system, etc.) will be received from the dispersion relation for surface plasmon–polaritons at a single metal–dielectric interface. The distributions of the wave field in the structure will be analyzed at different positions of the point oscillator and different coupling coefficients of the wave field with the oscillators. The resonant wave field mode composition at different positions of the point oscillator and different coupling coefficients will be found using the two-dimensional Fourier transform of the wave field, the time evolution of excited modes of the wave field amplitudes will be also analyzed. In conclusion, the paper gives applicability limits of the considered model for studying the surface plasmon polaritons excitation in a limited nanostructure.

Keywords: plasmonics; surface plasmon polaritons; nanocavities.

References

1. Maier S.A. *Plazmonika: teoriia i prilozheniia* (Plasmonics: theory and applications). Izhevsk, NITs "Reguliarnaiia i khaoticheskaia dinamika", 2011, 296 p. (in Russ.).
2. Sommerfeld A. Ueber die Fortpflanzung elektrodynamischer Wellen l'angs eines Drahtes. *Ann. Phys.*, 1899, Vol. 303, pp. 233–290. DOI: 10.1002/andp.18993030202
3. Wood R.W. On a Remarkable Case of Uneven Distribution of Light in a Diffraction Grating Spectrum. *Proceedings of the Physical Society of London*, 1902, Vol. 18, no. 1, pp. 269–275. DOI: 10.1088/1478-7814/18/1/325
4. Zenneck J. Über die Fortpflanzung ebener elektromagnetischer Wellen längs einer ebenen Leiterfläche und ihre Beziehung zur drahtlosen Telegraphie. *Ann. Phys.*, 1907, Vol. 328, Iss. 10, pp. 846–866. DOI: 10.1002/andp.19073281003
5. Sommerfeld A. Über die Ausbreitung der Wellen in der drahtlosen Telegraphie. *Ann. Phys.*, 1909, Vol. 333, Iss. 4, pp. 665–736. DOI: 10.1002/andp.19093330402
6. Ritchie R.H. Plasma Losses by Fast Electrons in Thin Films. *Phys. Rev.*, 1957, Vol. 106, Iss. 5, pp. 874–881. DOI: 10.1103/PhysRev.106.874
7. Kretschmann E., Raether H. Radiative Decay of Non Radiative Surface Plasmons Excited by Light. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 1968, Vol. 23, Iss. 12, pp. 2135–2136. DOI: 10.1515/zna-1968-1247
8. Fedianin D.Iu. *Usilenie poverkhnostnykh plazmon-poliaritonov v nanorazmernykh volnovodakh: dis. ... kand. fiz.-mat. nauk* (Amplification of Surface Plasmon Polaritons in Nanoscale Waveguides: Dis. Cand. of Physical and Mathematical Sciences). Dolgoprudnyi, 2013, 138 p. (in Russ.).
9. Huggall J.T., Singh A., van Hulst N.F. Plasmonic Cavity Coupling. *ACS Photonics*, 2018, Vol. 5, no. 1, pp. 43–53. DOI: 10.1021/acsp Photonics.7b01139

10. Andrianov E.S., Vinogradov A.P., Dorofeenko A.V., Zyablovskiy A.A., Lisyanskiy A.A., Pukhov A.A. *Kvantovaya nanoplazmonika: Uchebnoe posobie* (Quantum Nanoplasmonics: A Textbook). Dolgoprudnyy, Izdatel'skiy dom "Intellect", 2015, 368 p. (in Russ.).

11. Kornienko V.N., Privezentsev A.P. Features of the Multimode Self-Consistent Dynamics of an Ensemble of Self-Oscillators and the Field in a Rectangular Region. *Journal of Communications Technology and Electronics*, 2013, Vol. 58, no. 7, pp. 703–710. DOI: 10.1134/S1064226913060089

12. Kornienko V.N., Privezentsev A.P. Vozbuzhdenie voln krugloy membrany ansamblem avtogeneratorov (Excitation of Circular Membrane Waves by an Ensemble of Autogenerators). *Radiotekhnika i elektronika*, 2010, Vol. 55, no. 3, pp. 362–368. (in Russ.).

13. Kornienko V.N., Privezentsev A.P. Formirovanie prostranstvenno-vremennykh struktur v sisteme aktivnaya sreda-volnovoe pole v oblasti s poluprozrachnoy granitsey (Formation of Spatiotemporal Structures in the Active Medium-Wave Field System in a Region with a Translucent Boundary). *Radiotekhnika i elektronika*, 2011, Vol. 56, no. 4, pp. 417–422. (in Russ.).

14. Privezentsev A.P. *Teoriya kolebaniy: ucheb. posobie* (Oscillation Theory: a textbook). Chelyabinsk, Chelyab. gos. un-t, 2007, 111 p. (in Russ.).

Received July 17, 2023

Information about the authors

Bychkov Igor Valer'evich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Radio-physics and Electronics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: bychkov@csu.ru.

Kuzmin Dmitry Aleksandrovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associated Professor, Radio-physics and Electronics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: kuzminda@csu.ru.

Zagrebina Marina Antonovna is Undergraduate Student, Radio-physics and Electronics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: m.zagrebina@list.ru.

ИЗМЕРЕНИЕ УДЕЛЬНОЙ ТЕПЛОЁМКОСТИ СТЁКОЛ НА ОСНОВЕ $V_2O_3+Bi_2O_3$ В ШИРОКОМ ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР

Д.С. Кучакшоев, А.Г. Джабаров, А. Холов

Физико-технический институт им. С.У. Умарова Национальной академии наук Таджикистана, Душанбе, Республика Таджикистан

E-mail: k.davlat@mail.ru

Аннотация. В данной работе методом охлаждения экспериментально исследована температурная зависимость удельной теплоёмкости стёкол, полученных на основе соединения $2V_2O_3+Bi_2O_3$ (2:1) с добавлением к 1 молю этого соединения 0,01, 0,02, 0,04, 0,08, 0,12, 0,5 молей NaOH. Экспериментально показано, что с ростом содержания Na в исходной смеси температурные зависимости удельной теплоёмкости стёкол от температур расплава до температур, близких к комнатным, имеет сложный характер. Дана их физическая интерпретация на основе особенностей молекулярной подвижности в области температур до и выше температуры стеклования.

Ключевые слова: удельная теплоёмкость; стекло; температура; скорость охлаждения.

Интерес к изучению кристаллов и стёкол на основе оксидных соединений бора и висмута не ослабевает, поскольку на их основе создаются материалы, используемые в различных областях науки и техники, в частности в нелинейной оптике для создания твердотельных ультрафиолетовых лазеров, лазерной и оптоволоконной технике [1–4]. Бораты висмута могут использоваться в качестве преобразователей частоты лазерного излучения на основе вынужденного комбинационного рассеяния [1]. Стёкла на основе оксида висмута, обладающие высокими значениями показателя преломления и широкой областью прозрачности в видимом и ИК-диапазоне, являются перспективными материалами для практического применения [5, 6]. После обнаружения нелинейно-оптических и пьезоэлектрических свойств у кристаллов BiV_3O_6 появился повышенный интерес исследователей к изучению боратов висмута [7–12]. Были обнаружены четыре модификации кристалла BiV_3O_6 : α , β , γ и δ [10, 11].

Экспериментально установлено влияние состояния расплава на формирование метастабильных состояний в системе $Bi_2O_3 - V_2O_3$. В этой системе обнаружено пять кристаллизующихся соединений: $Bi_{24}V_2O_{39}$, $Bi_4V_2O_9$, $Bi_3V_5O_{12}$, BiV_3O_6 и $Bi_2V_8O_{15}$ [13], два из которых $5Bi_2O_3:3V_2O_3$ и $1Bi_2O_3:1V_2O_3$ образуются в метастабильном состоянии [14, 15].

Имеется много работ, посвященных получению, изучению структуры, определению электрических, оптических свойств соединений системы $Bi_2O_3 - V_2O_3$. Однако существуют лишь ограниченные сведения по их теплофизическим и термодинамическим свойствам [16–20]. Сведений о влиянии Na на свойства системы $Bi_2O_3 - V_2O_3$ в литературных источниках нами не обнаружено.

При изучении ДТА [19] бинарного соединения $Na_2V_4O_7+Bi_2O_3$ нами было показано, что в широком диапазоне концентраций получают многофазные соединения различного состава, включающего как кристаллические, так и аморфные фазы [20]. Однако среди различных по составу и структуре компонент кристаллической фазы не обнаружены тройные соединения, содержащие B, Bi и Na. Тем не менее в интервале мольных концентраций Bi_2O_3 менее 0,3 (здесь и далее используется мольная концентрация) получены качественные прозрачные стёкла [21], однородные по составу и структуре, оптические и электрические свойства которых зависят от состава и технологических факторов. Получены температурные зависимости удельной теплоёмкости $Na_2V_4O_7+Bi_2O_3$ [22], которые имели характерный максимум при температуре, соответствующей температуре стеклования. Увеличение концентрации Bi_2O_3 приводило к смещению максимума удельной теплоёмкости в область низких температур, а его величина уменьшалась (эффект больших масс в согласии с [22]). Во всех образцах с разной концентрацией Bi_2O_3 соотношение Na по отношению к B было неизменным и составляло $\frac{1}{2}$. В связи с этим в данной работе было интересно проследить влияние Na на температурную зависимость удельной теплоёмкости бората висмутового стекла. Для решения этой задачи были получены образцы стекла состава $2V_2O_3 - Bi_2O_3$.

Образцы для изучения влияния Na на свойства стёкол $2\text{V}_2\text{O}_3+\text{Vi}_2\text{O}_3$ (брутто формула $\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$) получали следующим образом: сначала с целью удаления сорбированной воды исходные вещества ($\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$ и NaOH) прокаливали на воздухе в муфельной печи в течение двух часов при температуре 573 К. Далее β молей NaOH добавляли к одному молью порошка предварительно полученного стекла $\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$. Полученную смесь размалывали в шаровой мельнице в течение часа с целью гомогенизации состава. Затем смесь плавил при 1050 К в платиновом тигле, выдерживали расплав в течение 7 часов, быстро охлаждали расплав в керамическом тигле [20].

Таблица 1

Содержание кристаллической и аморфной фаз в образцах $\text{Vi}_4\text{V}_2\text{O}_9$ и $\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9+\beta\text{-NaOH}$

NaOH, моль	Компоненты	Кристаллическая фаза, %	Аморфная фаза, %
0	$\text{Vi}_4\text{V}_2\text{O}_9$	16,58	83,42
0	$\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$	1,68	98,32
0,01	$\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$	1,53	98,47
0,02	$\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$	1,43	98,57
0,04	$\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$	1,24	98,76
0,08	$\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$	1,40	98,60
0,12	$\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$	1,52	98,48
0,50	$\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$	1,51	98,49

Известно, что состав $\text{Vi}_4\text{V}_2\text{O}_9$ хорошо кристаллизуется с образованием объёмного кристалла $\text{Vi}_4\text{V}_2\text{O}_9$ [13–15], но даже при быстром охлаждении, как это видно из рис.1, образуются как кристаллические, так и аморфные фазы. Симметричный состав $\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$ и образцы с любыми концентрациями NaOH при быстром охлаждении образуют однородные, прозрачные стёкла. Это было подтверждено рентгенофазовым анализом (см. рис. 1). По рентгеновским дифрактограммам было определено содержание кристаллической и аморфной фаз в образцах $\text{Vi}_4\text{V}_2\text{O}_9$ и $\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9+\beta\text{-NaOH}$. Расшифровка дифрактограмм по определению состава кристаллической фазы образцов проводилась при поддержке программы Search-Match-DEMO, а для определения содержания аморфной фазы использовали программу OriginPro 17 [23]. Результаты расчётов содержания аморфной и кристаллической фаз для состава $2\text{Vi}_2\text{O}_3-\text{V}_2\text{O}_3$ и $\text{Vi}_2\text{O}_3-2\text{V}_2\text{O}_3+\beta\text{-NaOH}$ приведены в таблице и проиллюстрированы на рис. 2. Как видно из таблицы, доля кристаллической фазы в составе $\text{Vi}_4\text{V}_2\text{O}_9$ намного больше, чем в составе $\text{Vi}_2\text{O}_3-2\text{V}_2\text{O}_3$. С повышением концентрации Na до 0,04 содержание аморфной фазы растёт, а при 0,08 и 0,12 – уменьшается.

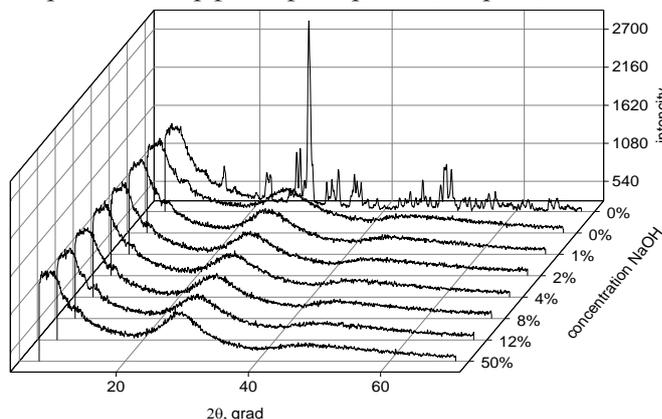


Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы стёкол $\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9+\beta\text{NaOH}$ и $\text{Vi}_4\text{V}_2\text{O}_9$ (дальняя кривая)

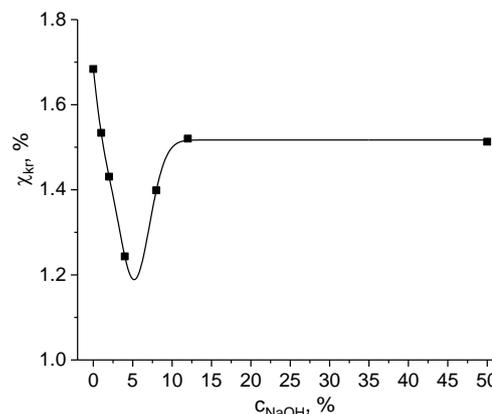


Рис. 2. Содержание кристаллической фазы в образцах $\text{Vi}_2\text{O}_3-2\text{V}_2\text{O}_3+\beta\text{-NaOH}$ от концентрации NaOH в исходной смеси

Особенности температурной зависимости удельной теплоёмкости стёкол, полученных на основе $\text{Vi}_2\text{O}_3+2\text{V}_2\text{O}_3$ с добавкой β молей NaOH (в расчёте на один моль $\text{Vi}_2\text{V}_4\text{O}_9$), изучались на установке, описанной в [22], которая позволяла компьютерную регистрацию температуры образца и эталона при непрерывном свободном охлаждении расплава в окружающую среду до комнатной температуры. В качестве эталона использовался пустой платиновый тигель с крышкой. Сначала определяли удельную теплоёмкость тигля с образцом $c_{p,x}$ по известной формуле

$$c_{p,x} = c_{p,t} \frac{m_t \left(\frac{dT}{dt} \right)_t}{m_x \left(\frac{dT}{dt} \right)_x},$$

полученной на основе уравнения Ньютона–Рихмана (здесь: m_t , $(dT/dt)_t$, $c_{p,t}$ – масса, скорость охлаждения и удельная теплоёмкость пустого платинового тигля; m_x , $(dT/dt)_x$, $c_{p,x}$ – масса, скорость охлаждения и удельная теплоёмкость платинового тигля с образцом соответственно). Затем по формуле $c_{p,s} = \frac{c_{p,x} \cdot m_x - c_{p,t} \cdot m_t}{m_s}$ рассчитывали удельную теплоёмкость образца $c_{p,s}$, где m_s – масса образца [20]. Результаты расчётов представлены на рис. 3.

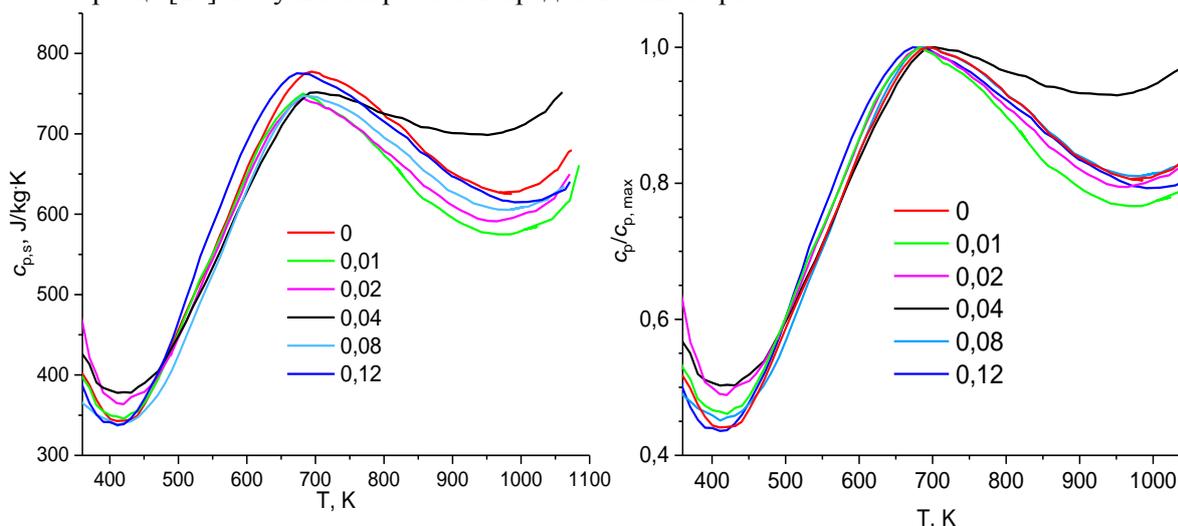


Рис. 3. Температурная зависимость удельной теплоёмкости (слева) и относительной удельной теплоёмкости (справа) стёкол состава $V_2V_4O_9 + \beta \cdot NaOH$. Числа в легендах – мольные доли (β) NaOH в расчёте на 1 моль $V_2V_4O_9$ в образцах, полученных длительной выдержкой расплава и быстрого охлаждения

Из рис. 3, на котором представлены температурные зависимости удельной теплоёмкости образцов $V_2V_4O_9$ с различным содержанием NaOH в исходной смеси, видно, что все $c_{p,si}(T)$ стёкол $V_2V_4O_9 + \beta \cdot NaOH$ проходят через максимум, соответствующий температуре стеклования. Для этого вида стёкол отношение удельной теплоёмкости при температуре расплава вблизи 980 К к максимальной удельной теплоёмкости равно $c_{p,s980} / c_{p,smax} \approx 0,8$, а для образца 4 оно равно 0,94. Расчётная теплоёмкость расплава при температуре 980 К значительно превышает удельную теплоёмкость при низкой температуре (350 К). Значение удельной теплоёмкости стёкол в максимуме и его положение слабо зависит от мольного содержания Na в образце. Так, удельная теплоёмкость в максимуме образцов 1 и 6 равна ~ 775 Дж/кг·К, а образцов 2–5 ~ 747 Дж/кг·К. Температура максимума меняется в пределах 685 ± 12 К. В большей степени влияние Na сказывается на характере температурной зависимости удельной теплоёмкости в области температур выше температуры стеклования. Добавление 0,01 моля NaOH в исходную смесь приводит к уменьшению удельной теплоёмкости при температуре 980 К с 626 до 575 Дж/кг·К. Увеличение NaOH до 0,02 несколько увеличивает значение удельной теплоёмкости до 595 Дж/кг·К. Ещё большее увеличение удельной теплоёмкости наблюдается при увеличении содержания NaOH до 0,04 (наименьшее значение на интервале от температуры стеклования до 1050 К составляет $0,94c_{p,smax} = 705$ Дж/кг·К). Дальнейшее увеличение концентрации NaOH до 0,08 и 0,12 приводит к уменьшению удельной теплоёмкости $c_{p,s5}, c_{p,s6} \leq c_{p,s1}$ (605 и 616 Дж/кг·К соответственно). Аналогичные изменения расчётной удельной теплоёмкости наблюдаются и при других температурах выше температуры стеклования, которые представлены на рис. 4 в виде концентрационных зависимостей при разных температурах.

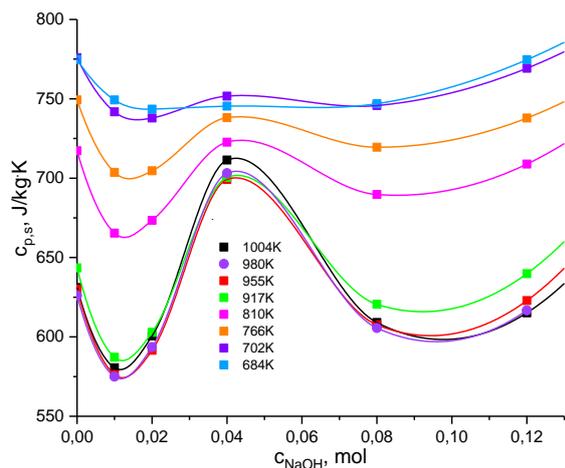


Рис. 4. Зависимости удельной теплоёмкости $c_{p,s}$ от содержания мольной доли NaOH в стекле $\text{Vi}_2\text{B}_4\text{O}_9$ при разных температурах в интервале 680–1005 K

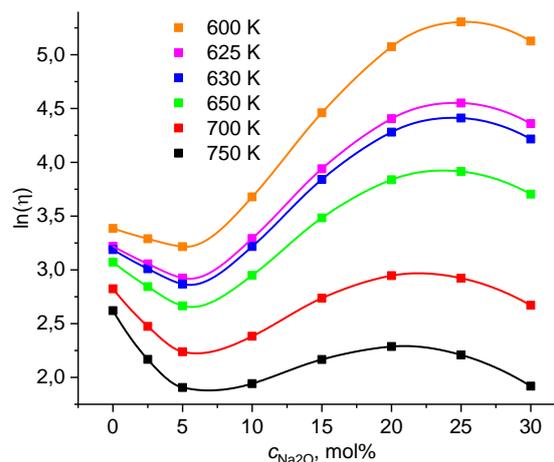


Рис. 5. Зависимость логарифма вязкости стёкол $(1-\alpha)\text{B}_2\text{O}_3+\alpha\text{Na}_2\text{O}$ от концентрации α при разных температурах. Кривые рассчитаны по данным кривых концентрационных зависимостей температур равной вязкости стёкол $(1-\alpha)\text{B}_2\text{O}_3+\alpha\text{Na}_2\text{O}$, приведённых в работе Немилова С.В. (Nemilov S.V. p. 12, Fig.11) [24]

Из рис. 4 видно, что вблизи максимума удельной теплоёмкости стекла $\text{Vi}_2\text{B}_4\text{O}_9+\beta\text{NaOH}$, то есть при температурах, близких к температуре стеклования (684 K), её значения мало изменяются в зависимости от содержания Na. По мере удаления в область более высоких температур наблюдается рост удельной теплоёмкости с ярко выраженной аномалией его усиления при добавлении в стекло порядка 0,04–0,05 моля NaOH. Визуальные наблюдения течения расплава получаемых образцов свидетельствуют, что расплав $\text{Vi}_2\text{B}_4\text{O}_9$ с добавлением 0,04 моля NaOH обладает наименьшей вязкостью среди расплавов $\text{Vi}_2\text{B}_4\text{O}_9$ с другими мольными добавками NaOH. В связи с отсутствием технических и организационных возможностей провести непосредственные экспериментальные исследования вязкости изучаемых объектов воспользуемся результатами других авторов. В работе С.В. Немилова [24] приведены (р. 12, Fig. 11) концентрационные зависимости температур равных вязкостей для системы $(1-\alpha)\cdot\text{B}_2\text{O}_3 + \alpha\cdot\text{Na}_2\text{O}$. Ниже на рис. 5 представлены концентрационные зависимости логарифма вязкости стёкол $(1-\alpha)\cdot\text{B}_2\text{O}_3 + \alpha\cdot\text{Na}_2\text{O}$ при разных температурах, рассчитанные по упомянутым зависимостям из работы Немилова.

Из рис. 5 видно, что в области концентраций Na_2O , близких к 5 %, наблюдается минимум вязкости расплава B_2O_3 . При больших концентрациях вязкость растет, а при содержании оксида натрия 25–30 % начинается её уменьшение. Такое поведение концентрационной зависимости вязкости объясняется возможностью образования соединений В в четверной координации в результате взаимодействия молекулярных структур, образованных оксидом бора с оксидом натрия [24]. Образование бора в четверной координации имеет концентрационную зависимость с максимумом при концентрации оксида натрия ~30 % [25]. Образование бора в четверной координации может способствовать образованию связей соседних молекулярных слоёв (сшивка). Такая возможность растёт с увеличением концентрации оксида натрия. При малых концентрациях Na_2O сшивающий эффект мал, наоборот, преобладает разрушающий (разрыхляющий) эффект.

Из наблюдаемого эффекта малых концентраций Na_2O на рис. 5 и NaOH на рис. 2 и рис. 4 следует, что в основе влияния Na на формирование структуры, на температурные зависимости вязкости и на особенности температурной зависимости удельной теплоёмкости при непрерывном быстром охлаждении расплава в стёклах $(1-\alpha)\cdot\text{B}_2\text{O}_3 + \alpha\cdot\text{Na}_2\text{O}$ и $\text{Vi}_2\text{O}_3-2\text{B}_2\text{O}_3+\beta\text{NaOH}$ лежат одни и те же молекулярные механизмы, связанные с образованием атомов В в четверной координации. Использование экспериментальных результатов по влиянию на вязкостные свойства боратного стекла оправдано тем, что используемая нами щёлочь NaOH, как показал её рентгенофазовый анализ до и после отжига, содержала более 40 % оксида натрия [20]. Наличие в используемом модификаторе NaOH и Na_2O делает возможным протекание в расплаве оксида бора и оксида висмута реакций с образованием бора в третьей и четверной координации с добавлением реакции присоединения OH⁻ и Na⁺ по месту разрыва связи немостикового кислорода, что усиливает разрушающее действие натрия.

Таким образом, исследовалась температурная зависимость удельной теплоёмкости в условиях непрерывного быстрого охлаждения (от тысяч К/мин до десятков К/мин). От начальной стадии охлаждения (~2000 К/мин) до достижения максимальных значений удельной теплоёмкости процесс протекает в условиях динамического размораживания кластерной молекулярной подвижности расплава стёкол. При приближении к температуре максимума интенсивность этого процесса существенно замедляется, а при дальнейшем уменьшении температуры и скорости её изменения начинается процесс структурного стеклования (кластерная подвижность вымораживается), который продолжается вплоть до достижения температур, близких к комнатным.

Литература

1. Becker, P. Thermal and Optical Properties of Glasses of the System $Bi_2O_3-B_2O_3$ / P. Becker // *Cryst. Res. Technol.* – 2003. – Vol. 38, Iss. 1. – P. 74–82.
2. Кузьмичева, Г.М. Структурные особенности боратов висмута в системе $nBi_2O_3-mB_2O_3$ / Г.М. Кузьмичева, Т.И. Мельникова // *Журнал неорганической химии.* – 2009. – Т. 54, № 1. – С. 74–81.
3. Юхин, Ю.М. Химия висмутовых соединений и материалов / Ю.М. Юхин, Ю.И. Михайлов. – Новосибирск: Наука, 2001. – 359 с.
4. Висмутсодержащие системы: строение и физико-химические свойства / В.М. Денисов, Н.В. Белоусова, Г.К. Моисеев и др. – Екатеринбург: УрО РАН, 2000. – 525 с.
5. Егорышева, А.В. Стеклообразование в системе $Bi_2O_3-B_2O_3-BaO$ / А.В. Егорышева, В.Д. Володин, В.М. Скориков // *Неорган. материалы.* – 2008. – Т. 44, № 11. – С. 1397–1401.
6. Высокотемпературная теплоёмкость стекол боратов висмута / Л.А. Иртюго, В.М. Денисов, В.П. Жереб и др. // *Журнал Сибирского федерального университета. Серия: химия.* – 2011. – Т. 4, № 4. – С. 344–349.
7. Monoclinic Bismuth Triborate BiB_3O_6 – a New Efficient $\chi(2)+\chi(3)$ – Nonlinear Crystal Multiple Stimulated Raman Scattering and Selfsum – Frequency Lasting Effects / A.A. Kaminskii, P. Becker, L. Bohatý *et al.* // *Optic Commun.* – 2002. – Vol. 206, Iss. 1-3. – P. 179–191.
8. Egorysheva, A.V. Efficient Nonlinear Optical Material BiB_3O_6 ($BiBO$) / A.V. Egorysheva, V.M. Skorikov // *Inorganic Materials.* – 2009. – Vol. 45, no. 13. – P. 1461–1476.
9. Phenomenon of Metastable Liquefaction during BiB_3O_6 Crystallization / F.Yu. Zavartsev, S.A. Koutovoia, V.V. Voronov *et al.* // *Journal of Crystal Growth.* – 2005. – Vol. 275, Iss. 1-2. – P. e637–e641.
10. Зайцев, А.И. Фазообразование в процессе кристаллизации стёкол состава BiB_3O_6 / А.И. Зайцев, А.Д. Васильев // *Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы.* – 2007. – С. 1–4.
11. Phase Transitions Among Four BiB_3O_6 Polymorphs: a Detailed Investigation / R. Cong, J. Zhu, Y. Wang *et al.* // *CrystEngComm.* – 2009. – Vol. 11. – P. 1971.
12. Observation of the Sixth Polymorph of BiB_3O_6 : In Situ High-Pressure Raman Spectroscopy and Synchrotron Xray Diffraction Studies on the β -Polymorph / R. Cong, T. Yang, J. Sun *et al.* // *Inorganic Chemistry.* – 2013. – Vol. 52, no. 13. – P. 7460–7466.
13. Levin, E.M. The System $Bi_2O_3-B_2O_3$ / E.M. Levin, C.L. McDaniel // *Journal of the American Ceramic Society.* – 1962. – Vol. 45, no. 8. – P. 355–360.
14. Жереб, В.П. Метастабильные состояния в оксидных висмутсодержащих системах / В.П. Жереб. – М.: МАКС пресс, 2003. – 163 с.
15. Каргин, Ю.Ф. Фазовая диаграмма метастабильных состояний системы $Bi_2O_3-B_2O_3$ / Ю.Ф. Каргин, В.П. Жереб, А.В. Егорышева // *Журнал неорганической химии.* – 2002. – Т. 47, № 8. – С. 1357–1364.
16. Crystal Growth, Thermal and Optical Performance of BiB_3O_6 / B. Teng, J. Wang, Z. Wang *et al.* // *J. Cryst. Growth.* – 2001. – Vol. 233, Iss. 1-2. – P. 282–286.
17. Growth of Sillenite-Structure Single Crystals / V.M. Skorikov, Yu.F. Kargin, A.V. Egorysheva *et al.* // *Inorganic Materials.* – 2005. – Vol. 41, Suppl. 1. – P. S24–S46.
18. Стеклообразование в системе $Bi_2O_3-B_2O_3$. Термическая устойчивость и структура стекол / В.П. Жереб, Н.А. Бабицкий, Т.В. Бермешев и др. // *Журнал Сибирского федерального университета. Химия.* – 2014. – Т. 7, № 3. – С. 371–382.

19. Кучакшоев, Д.С. Дифференциально-термический анализ бинарной системы $\text{Bi}_2\text{O}_3 + \text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ / Д.С. Кучакшоев, А.Г. Джабаров // Доклады Академии наук Республики Таджикистан. – 2015. – Т. 58, № 12. – С. 1096–1099.

20. Кучакшоев, Д.С. Влияние NaOH на удельную теплоёмкость стёкол системы $\text{V}_2\text{O}_3\text{--}2\text{Bi}_2\text{O}_3$ в зависимости от температуры / Д.С. Кучакшоев // Политехнический вестник. Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиции. – 2022. – № 3(59). – С. 32–35.

21. Кучакшоев, Д.С. Свойства стёкол на основе соединений Bi_2O_3 и $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ / Д.С. Кучакшоев, А.Г. Джабаров, А. Холов // Доклады Академии наук Республики Таджикистан. – 2020. – Т. 63, № 7-8. – С. 488–493.

22. Кучакшоев, Д.С. Определение удельной теплоемкости стёкол на основе боратов висмута / Д.С. Кучакшоев, А.Г. Джабаров, А. Холов // Известия Национальной академии наук Таджикистана. Отделение физико-математических, химических, геологических и технических наук. – 2022. – № 4. – С. 77–83.

23. Кучакшоев Д.С., Джабаров А.Г., Холов А. Рентгенофазовый анализ стёкол ($2\text{Bi}_2\text{O}_3\text{--}\text{V}_2\text{O}_3$) и ($\text{Bi}_2\text{O}_3\text{--}2\text{V}_2\text{O}_3$) с различной концентрацией NaOH в формовочной смеси. – Доклады Академии наук Республики Таджикистан. – 2022. – Т. 65, № 1-2. – С. 69–74.

24. Nemilov, S.V. Viscosity of Borate Glass-forming Melts: Specific Fetures of the BO_4 Tetrahedron as a Kinetic Unit / S.V. Nemilov // Glass Physics and Chemistry. – 1997. – Vol. 23, no. 1. – P. 1–26.

25. Griscom, D.L. Borate Glass Structure / D.L. Griscom // Borate Glasses. Structure, Properties, Applications. Springer Science+Business Media New York, 1978. – P. 11–138.

Поступила в редакцию 10 октября 2022 г.

Сведения об авторах

Кучакшоев Давлатназар Соибназарович – старший научный сотрудник, лаборатория «Физика кристаллов», Физико-технический институт им. С.У. Умарова Национальной Академии наук Таджикистана, Душанбе, Республика Таджикистан, e-mail: k.davlat@mail.ru.

Джабаров Александр Гулямович – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, сектор теоретической физики, Физико-технический институт им. С.У. Умарова Национальной Академии наук Таджикистана, Душанбе, Республика Таджикистан, e-mail: jabarovag@rambler.ru.

Холов Алимахмад – кандидат химических наук, заведующий лабораторией «Физики кристаллов», Физико-технический институт им. С.У. Умарова Национальной Академии наук Таджикистана, Душанбе, Республика Таджикистан, e-mail: alikhholov@mail.ru.

MEASURING THE SPECIFIC HEAT CAPACITY OF GLASS BASED ON $2B_2O_3+Bi_2O_3$ IN A WIDE TEMPERATURE INTERVAL

D.S. Kuchakshoev, A.G. Dzhabarov, A. Kholov

S.U. Umarov Physical-Technical Institute, of the National Academy of Sciences of Tajikistan, Dushanbe,
Republic of Tajikistan

E-mail: k.davlat@mail.ru

Abstract. In this work, we used cooling to experimentally determine the temperature dependence of the specific heat capacity of glass made with the compound $2B_2O_3 + Bi_2O_3$ (2:1) with the addition of 0,01, 0,02, 0,04, 0,08, 0,12, and 0,5 mol NaOH to 1 mol of the initial mixture. It has been experimentally determined that with an increase in the Na content in the initial mixture, the temperature dependences of the specific heat capacity of glasses from the melt to close to room temperature are complex. Their physical interpretation is given based on the features of molecular mobility in the temperature range up to and above the glass transition temperatures.

Keywords: specific heat capacity; glass; temperature; cooling rate.

References

1. Becker P. Thermal and Optical Properties of Glasses of the System $Bi_2O_3-B_2O_3$. *Cryst. Res. Technol.*, 2003, Vol. 38, Iss. 1, pp. 74–82. DOI: 10.1002/crat.200310009
2. Kuzmicheva G.M., Mel'nikova T.I. Structural Features of Bismuth Borates in the System $nBi_2O_3-3mB_2O_3$. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2009, Vol. 54, no. 1, pp. 73–80. DOI: 10.1134/S0036023609010148
3. Yukhin Yu.M. *Khimiya vismutovykh soedineniy i materialov* (Chemistry of Bismuth Compounds and Materials). Novosibirsk, Nauka Publ., 2001, 359 p. (in Russ.).
4. Denisov V.M., Belousova N.V., Moiseev G.K., Bakhvalov S.G., Istomin S.A., Pastukhov E.A. *Vismutsoderzhashchie sistemy: stroenie i fiziko-khimicheskie svoystva* (Bismuth – containing systems: structure and physico-chemical properties). Ekaterinburg, UrO RAN, 2000, 525 p. (in Russ.).
5. Egorysheva A.V., Volodin V.D., Skorikov V.M. Glass Formation in the $Bi_2O_3-B_2O_3-BaO$ System. *Inorganic Materials*, 2008, Vol. 44, no. 11, pp. 1261–1265. DOI: 10.1134/S0020168508110228
6. Irtyugo L.A., Denisov V.M., Zhereb V.P., Denisova L.T., Babitsky N.A. High-Temperature Heat Capacity of Bismuth Borate Glasses. *Journal of Siberian Federal University. Chemistry*, 2011, Vol. 4, no. 4, pp. 344–349.
7. Kaminskii A.A., Becker P., Bohatý L., Ueda K., Takaichi K., Hanuza J., Maczka M., Eichler H.J., Gad G.M.A. Monoclinic Bismuth Triborate BiB_3O_6 – a New Efficient $\chi(2)+\chi(3)$ – Nonlinear Crystal Multiple Stimulated Raman Scattering and Selfsum – Frequency Lasting Effects. *Optic Commun*, 2002, Vol. 206, Iss. 1-3, pp. 179–191. DOI: 10.1016/S0030-4018(02)01386-X
8. Egorysheva A.V., Skorikov V.M. Efficient Nonlinear Optical Material BiB_3O_6 (BiBO). *Inorganic Materials*, 2009, Vol. 45, no. 13, pp. 1461–1476. DOI: 10.1134/S0020168509130020
9. Zavartsev F.Yu., Koutovoia S.A., Voronov V.V., Panyutin V.V., Zagumennyi A.I., Shcherbakov I.A. Phenomenon of Metastable Liquation during BiB_3O_6 Crystallization. *Journal of Crystal Growth*, 2005, Vol. 275, Iss. 1-2, pp. e637–e641. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2004.11.042
10. Zaytsev A.I., Vasil'ev A.D. Fazoobrazovanie v protsesse kristallizatsii styekol sostava BiB_3O_6 (Phase Formation upon Crystallization of BiB_3O_6 Glasses). *Fazovye perekhody, uporyadochennyye sostoyaniya i novyye materialy* (Phase transitions, ordered states and new materials), 2007, pp. 1–4.
11. Cong R., Zhu J., Wang Y., Yang T., Liao F., Jin Ch., Lin J. Phase Transitions Among Four BiB_3O_6 Polymorphs: a Detailed Investigation. *CrystEngComm*, 2009, Vol. 11, P. 1971. DOI: 10.1039/B903567M

12. Cong R., Yang T., Sun J., Wang Y., Lin J. Observation of the Sixth Polymorph of BiB_3O_6 : In Situ High-Pressure Raman Spectroscopy and Synchrotron X-ray Diffraction Studies on the β -Polymorph. *Inorganic Chemistry*, 2013, Vol. 52, no. 13, pp. 7460–7466. DOI: 10.1021/ic400268p
13. Levin E.M., McDaniel C.L. The System Bi_2O_3 – B_2O_3 . *Journal of the American Ceramic Society*, 1962, Vol. 45, no. 8, p. 355–360. DOI: 10.1111/j.1151-2916.1962.tb11168.x
14. Zhreb V.P. *Metastabil'nye sostoyaniya v oksidnykh vismutsoderzhashchikh sistemakh* (Metastable States in Bismuth-Containing Oxide Systems). Moscow, MAKS press Publ., 2003, 163 p. (in Russ.).
13. Kargin Yu.F., Zhreb V.P., Egorysheva A.V. Metastable Phase Diagram for the Bi_2O_3 – B_2O_3 System. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2002, Vol. 47, no. 8, pp. 1240–1242.
16. Teng B., Wang J., Wang Z., Hu X., Jiang H., Liu H., Cheng X., Dong S., Liu Y., Shao Z. Crystal Growth, Thermal and Optical Performance of BiB_3O_6 . *J. Cryst. Growth*, 2001, Vol. 233, Iss. 1-2, pp. 282–286. DOI: 10.1016/S0022-0248(01)01526-3
17. Skorikov V.M., Kargin Yu.F., Egorysheva A.V., Volkov V.V., Gospodinov M. Growth of Sillenite-Structure Single Crystals. *Inorganic Materials*, 2005, Vol. 41, Suppl. 1, pp. S24–S46. DOI: 10.1007/s10789-005-0317-4
18. Zhreb V.P., Babitskiy N.A., Bermeshev T.V., Shubin A.A., Sidorak A.V. Glass Formation in the Bi_2O_3 – B_2O_3 . Thermal Stability and Glass Structure. *Journal of Siberian Federal University. Chemistry*, 2014, Vol. 7, Iss. 3, pp. 371–382.
19. Kuchakshoev D.S., Dzhabarov A.G. Differential'no-termicheskiy analiz binarnoy sistemy $\text{Bi}_2\text{O}_3 + \text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ (Differential Thermal Analysis of the Binary System $\text{Bi}_2\text{O}_3 + \text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$). *Reports of the National Academy of Sciences of Tajikistan*, 2015, Vol. 58, no. 12, pp. 1096–1099.
20. Kuchakshoev, D.S. Influence of NaOH on the Specific Heat Capacity of B_2O_3 – $2\text{Bi}_2\text{O}_3$ System Glasses Depending on Temperature. *Polytechnic Bulletin. Series: Intelligence. Innovation. Investments*, 2022, no. 3(59), pp. 32–35.
21. Kuchakshoev D.S., Dzhabarov A.G., Kholov A. Properties of Glasses Based on Compounds of Bi_2O_3 and $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$. *Reports of the National Academy of Sciences of Tajikistan*, 2020, Vol. 63, no. 7-8, pp. 488–493.
22. Kuchakshoev D.S., Dzhabarov A.G., Kholov A. Specific Heat Capacity Determination Glasses Based on Bismuth Borates. *News of the National Academy of Sciences of Tajikistan. Department of physical, mathematical, chemical, geological and technical sciences*, 2022, no. 4, pp. 77–83.
23. Kuchakshoev D.S., Dzhabarov A.G., Kholov A. X-ray Phase Analysis of Glasses ($2\text{Bi}_2\text{O}_3$ – B_2O_3) and (Bi_2O_3 – $2\text{B}_2\text{O}_3$) with Different Concentrations of NaOH in the Molding Sand. *Reports of the National Academy of Sciences of Tajikistan*, 2022, Vol. 65, no. 1-2, pp. 69–74.
24. Nemilov S.V. Viscosity of Borate Glass-forming Melts: Specific Features of the BO_4 Tetrahedron as a Kinetic Unit. *Glass Physics and Chemistry*, 1997, Vol. 23, no. 1, pp. 1–26.
25. Griscom, D.L. Borate glass structure. *Borate Glasses. Structure, Properties, Applications*. Springer Science+Business Media New York, 1978, pp. 11–138. DOI: 10.1007/978-1-4684-3357-9_2

Received October 10, 2022

Information about the authors

Kuchakshoev Davlatnazar Soibnazarovich is Senior Staff Scientist, Physics of Crystals Laboratory, S.U. Umarov Physical-Technical Institute, of the National Academy of Sciences of Tajikistan, Dushanbe, Republic of Tajikistan, e-mail: k.davlat@mail.ru.

Dzhabarov Alexander Gulyamovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Department of Theoretical Physics, S.U. Umarov Physical-Technical Institute, of the National Academy of Sciences of Tajikistan, Dushanbe, Republic of Tajikistan, e-mail: jabarovag@rambler.ru.

Kholov Alimakhmad is Cand. Sc. (Chemical), Head of the Laboratory “Physics of Crystals”, S.U. Umarov Physical-Technical Institute, of the National Academy of Sciences of Tajikistan, Dushanbe, Republic of Tajikistan, e-mail: alikhholov@mail.ru.

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

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://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: 1.1.1. Вещественный, комплексный и функциональный анализ (физико-математические науки); 1.1.2. Дифференциальные уравнения и математическая физика (физико-математические науки); 1.1.6. Вычислительная математика (физико-математические науки); 1.1.7. Теоретическая механика, динамика машин (технические и физико-математические науки); 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы (физико-математические науки); 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (физико-математические науки); 1.3.6. Оптика (физико-математические науки); 1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки); 2.3.1. Системный анализ, управление и обработка информации, статистика (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 15, № 3
2023

16+

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

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 31.07.2023. Дата выхода в свет 04.08.2023.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 11,62.

Тираж 500 экз. Заказ 282/284. Цена свободная.

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