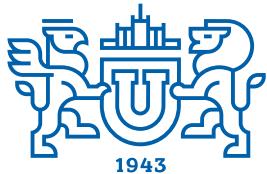


# ВЕСТНИК



ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО  
ГОСУДАРСТВЕННОГО  
УНИВЕРСИТЕТА

2025  
Т. 17, № 1

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)»

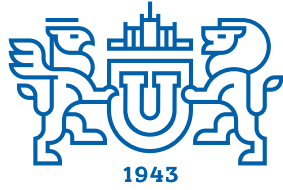
Основной целью серии «Математика. Механика. Физика» является публикация и распространение оригинальных результатов научных исследований в области математики, механики и физики, а также их приложений в естественных, технических и экономических науках.

### 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)  
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** (ИНХА-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.ф.-м.н., доцент **Труханов А.В.** (НПЦ НАН Беларуси по материаловедению, г. Минск, Республика Беларусь)  
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  
SERIES

2025  
Vol. 17, no. 1

“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  
**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  
**A.V. Trukhanov**, Doctor of Physics and Mathematics, Associated Professor, Scientific Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus, Minsk, Republic of Belarus  
**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

- ЖУКОВСКИЙ В.И., ЖУКОВСКАЯ Л.В., КУДРЯВЦЕВ К.Н., САМСОНОВ С.П., СМИРНОВА Л.В. Паретовское равновесие угроз и контругроз в линейно-квадратичных играх  $N$  лиц..... 5
- РОЙТЕНБЕРГ В.Ш. О топологической классификации типичных особых точек векторного поля на плоскости с нулевой  $(m - 1)$ -струей ..... 21

## Механика

- САПОЖНИКОВ С.Б., ЖИХАРЕВ М.В., ЭРЛИХ В.В., БАЙГУЖИН П.А. Рациональное проектирование композитных трубчатых элементов протеза ноги ..... 26
- ТАРАНЕНКО П.А., КРИВОНОГОВ А.А., ТЕЛЕГИН Д.В. Исследование влияния двухкомпонентного потока «жидкость–газ» на динамические свойства кориолисова расходомера..... 32

## Физика

- BELENKOV M.E., CHERNOV V.M., BUTAKOV A.V. Structure and Electronic Properties of Fluorographene and Fluorographite Crystals..... 40
- ГОЛУБЕВ Е.В. Замечание о формулах для скорости волн Рэлея..... 48
- МИРЗОЕВ А.А., ВЕРХОВЫХ А.В. Ab initio моделирование энергетических характеристик выделений карбида ванадия в ОЦК-железе ..... 53
- ШАБЛОВСКИЙ О.Н. Эволюция и разрушение линии роста кристалла в переохлажденном расплаве ..... 61
- ШУЛЬГИНОВ А.А., ЗАБЕЙВОРОТА Н.С. Влияние электромагнитных импульсов на шероховатость поверхности и флуктуации электропроводности металлических плёнок ..... 76

## Персоналии

- Алексей Фёдорович Каперко. К 70-летию со дня рождения ..... 81
- Сергей Юрьевич Гуревич. К 80-летию со дня рождения..... 82

## CONTENTS

### Mathematics

ZHUKOVSKIY V.I., ZHUKOVSKAYA L.V., KUDRYAVTSEV K.N., SAMSONOV S.P., SMIRNOVA L.V. The Pareto Equilibrium of Objections and Counterobjections in Linear-Quadratic Games of N Person ..... 5

ROITENBERG V.Sh. On the Topological Classification of Generic Singular Points of a Planar Vector Field with the Zero  $(m-1)$ -Jet..... 21

### Mechanics

SAPOZHNIKOV S.B., ZHIKHAREV M.V., EHRLICH V.V., BAIGUZHIN P.A. Rational Design of Composite Materials Tubular Elements of the Prosthetic Leg ..... 26

TARANENKO P.A., KRIVONOGOV A.A., TELEGIN D.V. Investigation of Two-Component Flow “Liquid–Gas” Influence on a Coriolis Flowmeter Dynamic Parameters..... 32

### Physics

BELENKOV M.E., CHERNOV V.M., BUTAKOV A.V. Structure and Electronic Properties of Fluorographene and Fluorographite Crystals ..... 40

GOLUBEV E.V. Notes on Formulas for the Rayleigh Wave Velocity..... 48

MIRZOEV A.A., VERKHOVYKH A.V. The Comparative Results of the Thermodynamic and First-Principle Modeling of Disordered Solutions of the Fe–V System ..... 53

SHABLOVSKII O.N. Evolution and Destruction of the Crystal Growth Line in a Supercooled Melt..... 61

SHULGINOV A.A., ZABEYVOROTA N.S. The Effect of Electromagnetic Pulses on Surface Roughness and Fluctuations in Electrical Conductivity of Metal Films ..... 76

### Personalia

To the 70<sup>th</sup> Anniversary of Aleksey Kaperko ..... 81

To the 80<sup>th</sup> Anniversary of Sergey Gurevich ..... 82

## ПАРЕТОВСКОЕ РАВНОВЕСИЕ УГРОЗ И КОНТРУГРОЗ В ЛИНЕЙНО-КВАДРАТИЧНЫХ ИГРАХ $N$ ЛИЦ

**В.И. Жуковский<sup>1</sup>, Л.В. Жуковская<sup>2</sup>, К.Н. Кудрявцев<sup>3,4</sup>, С.П. Самсонов<sup>1</sup>,  
Л.В. Смирнова<sup>5</sup>**

<sup>1</sup> МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация

<sup>2</sup> Центральный экономико-математический институт РАН, г. Москва, Российская Федерация

<sup>3</sup> Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

<sup>4</sup> Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, г. Москва,  
Российская Федерация

<sup>5</sup> Государственный гуманитарно-технологический университет, г. Орехово-Зуево,  
Российская Федерация

E-mail: smirnovvalidiya@rambler.ru

**Аннотация.** Публикации по математической теории игр со многими (не менее двух) игроками можно условно распределить по четырем направлениям: бескоалиционные, иерархические, кооперативные и коалиционные игры. Новому подходу в первом из них посвящена настоящая статья. Последние два направления, в свою очередь, разделяются на игры с побочными и без побочных платежей (соответственно на игры с трансферабельными и нетрансферабельными выигрышами). Если первые из них активно исследуются в Санкт-Петербургской научной школе по математической теории игр (Санкт-Петербургский госуниверситет, факультет прикладной математики и процессов управления, Санкт-Петербургский экономико-математический институт РАН, институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН), то игры с нетрансферабельными выигрышами не охвачены. Мы предлагаем в перечисленных трех направлениях базироваться на концепции угроз и контругроз. Начало ее положено в публикациях литовского математика Э.Й. Вилкаса в его двух монографиях восьмидесятых годов прошлого века (ученика петербургского профессора Н.Н. Воробьева). Для дифференциальных игр впервые, по-видимому, применил Э.М. Вайсборд в 1974 г., затем подхватил первый автор настоящей статьи в совместной с Э.М. Вайсбордом книге «Введение в теорию дифференциальных игр нескольких лиц и её приложение», М.: Советское радио, 1980 г. и затем продолжено В.И. Жуковским в монографии «Равновесие угроз и контругроз», М.: КРАСАНД, 2010.

**Ключевые слова:** бескоалиционные игры; равновесие по Нэшу; равновесие по Бержу; равновесие угроз и контругроз; санкции и контрсанкции; оптимальность по Парето.

### Введение

Рассмотрим бескоалиционную игру в нормальной форме, определенную упорядоченной тройкой

$$G_N = \langle \mathbb{N}, \{X_i\}_{i \in \mathbb{N}}, \{f_i(x)\}_{i \in \mathbb{N}} \rangle. \quad (1)$$

Здесь  $\mathbb{N} = \{1, 2, \dots, N \geq 2\}$  – множество порядковых номеров игроков, каждый из которых выбирает свою стратегию  $x_i \in X_i \subseteq \mathbb{R}^{n_i}$  (где символом  $\mathbb{R}^k$ ,  $k \geq 1$ , как обычно, обозначается  $k$ -мерное действительное евклидово пространство, элементами которого являются наборы из  $k$  действительных чисел, используется также евклидова норма  $\|\cdot\|$  и скалярное произведение); в результате в игре  $G_N$  образуется ситуация  $x = (x_1, x_2, \dots, x_N) \in X = \prod_{i \in \mathbb{N}} X_i \subseteq \mathbb{R}^{\sum_{i \in \mathbb{N}} n_i}$ . На множестве  $X$  ситуаций  $x$  определена функция выигрыша  $f_i(x)$  каждого  $i$ -го игрока:

$$f_i(x) = \sum_{j=1}^N x_j' D_{ij} x_j + 2d_{ii} x_i \quad (i \in \mathbb{N}), \quad (2)$$

значения которых называются *выигрышем*  $i$ -го игрока (который  $i$ -й игрок стремится увеличить). Не ограничивая общности, далее предполагаем, что  $n_j \times n_j$  – матрицы  $D_{ij}$  постоянны и симметричны, штрих сверху означает операцию транспонирования, например:  $x'_j$  –  $n_j$ -вектор-строка,  $d_{ii}$  – постоянный  $n_i$ -вектор.

В экономических моделях квадратичная форма из (2) иногда описывает инвестиции, внесённые  $j$ -м игроком в  $i$ -е производство. Тогда  $i$ -й игрок стремится увеличить (2), при  $D_{ii} > 0$  (квадратичная форма  $x'_i D_{ii} x_i$  определено положительна), все же ограничивая ее беспредельный рост (с помощью линейного слагаемого – скалярного произведения  $2d'_{ii} x_i$  из (2)), при этом ориентируясь на противодействие остальных игроков, конечно, для  $D_{ij} < 0$  ( $j \neq i$ ). Как раз это обстоятельство и объясняет название настоящей статьи. Далее построение равновесия угроз и контругроз осуществлено как раз при  $D_{ii} > 0$ ,  $D_{ij} < 0$  ( $i, j \in \mathbb{N}; j \neq i$ ).

По мнению корифеев математической теории игр, равновесию как приемлемому решению игры и должно быть присуще свойство *устойчивости*: отклонение от него отдельного игрока не должно увеличить выигрыш отклонившегося. Решение, предложенное [1, 2] и названное впоследствии равновесием по Нэшу (РН), полностью отвечает этому требованию; РН уверенно завоевало «царствующее положение» в экономике, социологии, военных науках. Однако «And in the Sun there are the spots»: множество ситуаций равновесия по Нэшу может быть внутренне и внешне неустойчивым. Так, в простейшей бескоалиционной игре двух лиц в нормальной форме

$$\langle \{1, 2\}, \{X_i = [-1, 1]\}_{i=1,2}, \{f_i(x_1, x_2) = 2x_1x_2 - x_i^2\}_{i=1,2} \rangle$$

множество равновесных ситуаций по Нэшу будет

$$X^e = \{x^e = (x_1^e, x_2^e) = (\alpha, \alpha) \mid \forall \alpha = \text{const} \in [-1, 1]\}, f_i(x^e) = \alpha^2 \quad (i \in 1, 2).$$

Для элементов этого множества (отрезка биссектрисы 1-й и 3-й четверти координатного угла), во-первых, для  $x^{(1)} = (0, 0) \in X^e$  и  $x^{(2)} = (1, 1) \in X^e$  имеем  $f_i(x^{(1)}) = 0 < f_i(x^{(2)}) = 1$  ( $i = 1, 2$ ), и поэтому множество  $X^e$  *внутренне неустойчиво*, во-вторых,  $f_i(x^{(1)}) = 0 < f_i(\frac{1}{4}, \frac{1}{3})$  ( $i = 1, 2$ ), и поэтому множество  $X^e$  *внешне неустойчиво*. Внешняя и внутренняя неустойчивость множества равновесий по Нэшу – негатив при его практическом использовании. В первом случае существует ситуация, которая доминирует РН (по всем игрокам), а во втором такая ситуация даже не является равновесной по Нэшу. Избежать последствия внешней и внутренней неустойчивости позволила бы максимальность по Парето ситуации равновесия по Нэшу. Однако такое совпадение явление скорее экзотическое (нам известны лишь три случая [3; 4, с. 92–93; 5], где имеется такое совпадение). Итак, чтобы избежать неприятностей, связанных с внешней и внутренней неустойчивостью, далее добавляем требование максимальности по Парето к определению равновесия санкций и контрсанкций, формализованному ниже. Однако прежде всего приведем общепринятые в бескоалиционных играх понятия решений – равновесие по Нэшу (РН) и равновесие по Бержу (РБ) для игры  $G_N$ .

**Определение 1.** [1, 2]. Пару  $(x^e, f^e = f_1(x^e), \dots, f_N(x^e)) = X \times \mathbb{R}^N$  называют равновесием по Нэшу (РН) в игре  $G_N$ , если

$$\max_{x_i \in X_i} f_i(x^e \parallel x_i) = f_i(x^e) \quad (i \in \mathbb{N}).$$

**Определение 2.** [6, с. 27]. Пару  $(x^B, f^B = f_1(x^B), \dots, f_N(x^B)) \in X \times \mathbb{R}^N$  называют равновесием по Бержу (РБ) в  $G_N$ , если

$$\max_{x_{-i} \in X_{-i}} f_i(x \parallel x_i^B) = f_i(x^B) \quad (i \in \mathbb{N}).$$

Далее

$$-i = \{1, 2, \dots, i-1, i+1, \dots, N\}, x_{-i} = (x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_N) \in X_{-i} = \prod_{k \in \mathbb{N}, k \neq i} X_k.$$

Если определение 1 отвечает «эгоистическим стремлениям каждого игрока» «обогатиться» только самому, то определение 2 соответствует Золотому правилу нравственности: поступай с другими так, как бы хотел, чтобы поступали с тобой. Этот чисто альтруистический подход получил широкое распространение в христианстве, исламе, иудаизме, магометанстве и буддизме.

Перейдем к равновесию санкций и контрсанкций (синоним угроз и контругроз). Впервые в русскоязычной литературе похожее появилось в учебнике [7] (см. также [8]). Дело в том, что, как уже упоминалось выше, исследование позитивных и негативных свойств, господствующих в экономике концепции равновесия по Нэшу (как решения бескоалиционной игры), посвящен непрерывающийся поток публикаций. В основном они связаны с описанной выше неединственностью и, как следствие, отсутствием эквивалентности, взаимозаменяемости, внешней неустойчивости, а также неустойчивостью к одновременному отклонению от таких решений двух и более игроков. Игра «дилемма заключенных» выявила также свойство «улучшаемости» – внешней неустойчивости. Подробному анализу таких «отрицательных» свойств для дифференциальных игр посвящена книга В.И. Жуковского и Т.Н. Тынянского [9]. Вывод, к которому приводят авторы книги: либо использовать те ситуации равновесия по Нэшу, которые одновременно свободны от некоторых из указанных недостатков, либо следует вводить новые понятия решения бескоалиционной игры, которые, обладая достоинствами ситуации равновесия по Нэшу, позволяли бы избавиться от отдельных ее недостатков. Одной из таких возможностей и является концепция санкций и контрсанкций, которой и посвящена настоящая статья. Используемые в ней понятия основываются на известной в классической теории игр концепции угроз и контругроз. Теоретическим основанием этой концепции стали работы Э.Й. Вилкаса [10, 11], упоминалась в [12, 13]. Термин «активное равновесие» предложил Э.Р. Смольяков [14] в 1983 г., понятие равновесия угроз и контругроз в дифференциальных играх было использовано, по-видимому, впервые в 1974 г. советским математиком Э.М. Вайсбордом в [15], а затем подхвачено первым автором настоящей статьи в [16, 17], но применялась и применяется эта концепция в дифференциальных играх, по нашему мнению, недостаточно активно.

В заключение несколько слов об используемой терминологии. «Угроза – обещание привести какое-либо зло, неприятности» [18, с. 317]. Угрозы – необязательно реальные действия, они могут заключаться в сообщении о такого рода действиях (запугивание!). Иногда для смягчения «агрессивного характера» слова «угроза» используют в некоторых публикациях (как синоним) «возражения», «санкция». Сообщение о действии игрока, «обнуляющего» угрозу, называют «контругрозой» (контрвозражением, контрсанкцией). Концепция угроз и контругроз, как уже упоминалось, появляется уже в начальных публикациях по матричной теории игр [13], но ограничиваются они, как правило, либо статическим вариантом игры, либо дифференциальными играми, но только двух лиц [19–24]. Игры с  $N > 2$  участников почти не затрагивались, что и явилось (не в последнюю очередь!) толчком к написанию этой работы.

Перейдем к некоторым пришедшим недавно новым понятиям, часто встречающимся в математической теории игр (и, к сожалению, не только в ней).

«Санкция (от лат. *sanctionis*): мера, применяемая государством к правонарушителям, и мера, принимаемая против стороны, нарушившей соглашение, договор» [18, с. 1148]. Экономические санкции включают экономические и торговые санкции по отношению к другому участнику с целью принудить последнего к изменению политического курса. Запад ввел санкции против России в 2014 г. из-за событий в Крыму и на Востоке Украины (Википедия). Санкции обычно представляют собой ограничение или полное прекращение торговых и финансовых операций.

Угроза – запугивание, обещание причинить кому-либо вред, зло, неприятности (Википедия). «Коалиция (от лат. *coalitus*) – объединение, соглашение, союз (государств, индивидуумов, партий) для достижения общих целей» [18, с. 435]. Члены коалиции могут на «коалиционных совещаниях» координировать свои действия, стратегии, но не могут, в силу нетрансферабельности выигрышей, перераспределять выигрыши между собой. Сами коалиции (с географической точки зрения!) могут быть местными, региональными, могут создаваться для решения одной или нескольких масштабных долгосрочных проблем. Примерами служат коалиции за спасение лесов, озера Байкал, национальные координационные советы НКО. Коалиции обычно обладают наибольшей силой, если они органично вырастают из общих интересов (например, Национальная коалиция российских организаций инвалидов «За образование для всех» или коалиция «Регио-

ны»). Опыт показывает, что навязанные извне коалиции редко выживают. Примером могут служить коалиции по противодействию коррупции, создававшиеся в рамках проекта «Партнерство в противодействии коррупции» в Самарской, Томской, Иркутской областях. Формируют коалиции по разным причинам. Некоторые из причин являются по сути общими, а некоторые конкретно связаны с защитой общественных интересов.

Общие причины предоставляют возможность:

- делиться информацией и ресурсами;
- предоставлять обучение и техническое содействие;
- реагировать на местный кризис;
- координировать планы и их реализацию;
- избегать дублирования или заполнять пробелы в предоставляемых услугах.

Причины, связанные с защитой общественных интересов, позволяют:

- привлекать внимание общества к определенным вопросам и просвещать целевые группы;
- усиливать политическое влияние;
- обеспечивать последовательность коммуникаций и расширять освещение прессой гражданских, избирательных, юридических и просветительских инициатив в местном сообществе;
- поддерживать определенные политические решения и кандидатуры;
- достигать политических побед, которые иначе были бы невозможны.

## 1. Вспомогательные сведения

Напомним, что для симметричной постоянной  $n \times n$ -матрицы  $D > 0$  ( $<$ ) означает, что квадратичная форма  $x'Dx$  определена положительно (отрицательно): при  $\forall x_i \in \mathbb{R}^{n_i}$  квадратичная форма  $x_i'Dx_i$  принимает только положительные значения и обращается в ноль тогда и только тогда, когда все  $x_i = 0_{n_i}$  (нулевому  $n_i$ -вектору), поэтому справедлива эквиваленция  $D > 0 \Leftrightarrow -D < 0$  ( $-D$  означает, что все элементы матрицы  $D$  умножаются на  $-1$ ).

Рассмотрим некоторые свойства корней характеристического уравнения  $\Delta(\lambda) = \det[D - \lambda E_n] = 0$  и их оценки из [25–27]. В следующих свойствах 1–5, не оговаривая особо, считаем  $n \times n$ -матрицу  $D$  вещественной и симметричной (т. е.  $D = D'$ ),  $E_n$  – единичная  $n \times n$ -матрица.

Далее используем  $n \times n$ -матрицу  $D = (d_{ij})$

**Свойство 1** Если вещественная, симметричная  $n \times n$ -матрица  $D > 0$ , то

- все корни уравнения  $\Delta(\lambda) = 0$  положительны;
- для  $\Lambda$ -наибольшего и  $\lambda$ -наименьшего из них ( $\Lambda \geq \lambda > 0$ ) имеет место цепочка неравенств

$$0 < \lambda x'x \leq x'Dx \leq \Lambda x'x \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \text{ и } x \neq 0_n, \quad (3)$$

где  $0_n$  – нулевой  $n$ -вектор.

**Свойство 2** При  $D < 0$  все корни  $\Delta(\lambda) = 0$  отрицательны и для наибольшего  $-\lambda$  и наименьшего  $-\Lambda$  из них ( $-\Lambda \leq -\lambda < 0$ ) выполняется цепочка неравенств

$$-\Lambda x'x \leq x'Dx \leq -\lambda x'x \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0_n. \quad (4)$$

**Свойство 3** (теорема А. Гирша и И. Бендиксона [28]). Если  $D = D' > 0$ , то для наибольшего корня  $\Delta(\lambda) = 0$  будет

$$\Lambda \leq nM, \quad (5)$$

где  $M$  – максимум модулей элементов симметричной вещественной  $n \times n$ -матрицы  $D$ .

**Свойство 4** (теорема Г. Фробениуса [29]). Если для постоянной симметричной  $n \times n$ -матрицы  $D = (d_{ij})$  и  $D > 0$ , то наибольший корень  $\Lambda$  уравнения  $\Delta(\lambda) = 0$  удовлетворяет условию

$$\Lambda \leq R, \quad (6)$$

где  $R = \max_{i=1, \dots, n} R_i$ ,  $R_i = \sum_{j=1}^n |d_{ij}|$ .

**Свойство 5** (теорема В. Паркера [30]). В условиях свойства 4



$$\Lambda \leq \frac{1}{2} S, \quad (7)$$

где  $S$  – есть сумма элементов  $i$ -й строки и  $j$ -го столбца  $D$ , а  $S$  является наибольшей из этих сумм.

**Замечание 1.** В книге [27] приведен и ряд других оценок величины характеристических корней уравнения  $\Delta(\lambda) = \det[D - \lambda E_n] = 0$ .

Перейдем к двум мажорантным утверждениям, играющим главенствующую роль далее при построении явного вида равновесия санкций и контрсанкций игры  $G_N$ . Они будут связаны со знакоопределенностью квадратных форм в функциях выигрыша (2). Демонстрацию этих свойств для наглядности проведем для функции выигрыша  $f_1(x)$  первого игрока:

$$f_1(x) = x'_1 D_{11} x_1 + 2d'_{11} x_1 + x'_2 D_{12} x_2 + \dots + x'_N D_{1N} x_N. \quad (8)$$

Напомним обозначение  $-1 = 2, 3, \dots, N = \mathbb{N} \setminus \{1\}$ . Так как все  $n_j \times n_j$ -матрицы симметричны и вещественны, то (8) можно представить в виде

$$f_1(x) = f_1(x_1, x_{-1}) = x'_1 D_{11} x_1 + 2d'_{11} x_1 + \varphi_1(x_{-1}), \quad (9)$$

причём  $\varphi_1(x_{-1}) = \sum_{j=2}^N x'_j D_{1j} x_j$ .

**Утверждение 1.** Каковы бы ни были стратегии  $\bar{x}_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$  первого и стратегии остальных

$x_{-1}^* = (x_2^*, \dots, x_N^*) \in X_{-1} = \prod_{j=2}^N X_j \subseteq \mathbb{R}^{\sum_{j=2}^N n_j}$ , если  $D_{11} > 0$ , то существует постоянная

$\alpha_{11}^*(\bar{x}_1, x_{-1}^*) > 0$  такая, что при  $\forall \alpha > \alpha_{11}^*(\bar{x}_1, x_{-1}^*)$  для стратегии  $x_1^T = \alpha e_{n_1}$  будет

$$f_1(x_1^T, x_{-1}^*) > f_1(\bar{x}_1, x_2^*, \dots, x_N^*), \quad (10)$$

здесь  $e_{n_1}$  –  $n_1$ -вектор-столбец, все компоненты которого равны единице.

Аналогично для случая  $D_{12} < 0$  получаем

**Утверждение 2.** Какими бы ни были стратегия  $\bar{x}_2 \in \mathbb{R}^{n_2}$  второго и стратегии остальных

$x_{-2}^* = (x_1^*, x_3^*, \dots, x_N^*) \in X_{-2} = \prod_{j \in \mathbb{N}, j \neq 2} X_j \in \mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{\sum_{j=3}^N n_j}$ , если  $D_{12} < 0$ , то существует постоянная

$\alpha_{12}^*(\bar{x}_2, x_{-2}^*) > 0$  такая, что при  $\forall \alpha > \alpha_{12}^*(\bar{x}_2, x_{-2}^*)$  для стратегии  $x_2^C = \alpha e_{n_2}$  будет

$$f_2(x_1^*, x_2^C, x_3^*, \dots, x_N^*) < f_2(x_1^*, \bar{x}_2, x_3^*, \dots, x_N^*), \quad (11)$$

где аналогично  $e_{n_2}$ ,  $e_{n_2}$  –  $n_2$ -вектор-столбец, все компоненты которого равны единице.

Заметим, наконец, что, во-первых, именно санкции и соответствующие контрсанкции будут реализованы в  $G_N$  с помощью строгих неравенств, аналогичных (10) и (11), во-вторых, с помощью утверждений 1 и 2 далее будет доказано, что в игре  $G_N$  из (1) и (2) отсутствует равновесие по Нэшу (при  $D_{11} > 0$ ), а условие  $D_{12} < 0$  приводит к тому, что для  $f_1(x)$  не выполнено условие индивидуальной рациональности, а именно, не существует  $f_1^g$ , для которого при  $\forall x \in X$  будет

$$f_1(x) \geq \max_{x_1 \in X_1} \min_{x_{-1} \in X_{-1}} f_1(x_1, x_{-1}) = \min_{x_{-1} \in X_{-1}} f_1(x_1^g, x_{-1}) = f_1^g.$$

## 2. Максимальность по Парето в игре $G_N$

Поставим игре  $G_N$  в соответствие  $N$ -критериальную задачу

$$G_v = \left\langle X, \{f_i(x)\}_{i \in \mathbb{N}} \right\rangle,$$

в которой множество  $X$  альтернатив  $x = (x_1, \dots, x_N)$  совпадает с множеством  $X$  ситуации  $x$  игры  $G_N$ , а  $N$  критериев  $f_i(x)$  ( $i \in \mathbb{N}$ ) определены в (2). На содержательном уровне цель ЛППР (лица,

принимаящего решение) в задаче  $G_v$  – выбор такой альтернативы  $x^P \in X$ , при которой все  $N$  критериев принимали бы одновременно возможно *большие* значения. Общепринятым здесь является понятие максимума по Парето, предложенного в 1909 г. итальянским экономистом, социологом и, кстати, богатым наследником Вильфредо Парето.

**Определение 3.** Альтернатива  $x^P = (x_1^P, \dots, x_N^P) \in X$  называется *максимальной по Парето* в задаче  $G_v$ , если для  $\forall x \in X$  несовместна система из  $N$  неравенств

$$f_i(x) \geq f_i(x^P) \quad (i \in \mathbb{N}),$$

из которых хотя бы одно строгое; при этом вектор  $f^P = (f_1^P, \dots, f_N^P) = (f_1(x^P), \dots, f_N(x^P))$  называется *максимумом по Парето* в задаче  $G_v$ .

Отметим здесь два обстоятельства, сразу следующих из определения 3.

**Свойство 6.** Справедлива импликация: если при  $\tilde{x} \in X$  будет  $f_i(\tilde{x}) > f_i(x^P)$ , то  $\exists j \in \mathbb{N} (j \neq i) : f_j(\tilde{x}) < f_j(x^P)$ .

**Свойство 7.** Если при каких-либо положительных постоянных  $\alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_N$  имеет место

$$\max_{x \in X} \{f_1(x) + \alpha_2 f_2(x) + \dots + \alpha_N f_N(x)\} = \text{Idem}\{x \rightarrow x^P\}, \quad (12)$$

то альтернатива  $x^P$  максимальна по Парето в задаче  $G_v$ . Напомним, что  $\text{Idem}\{x \rightarrow x^P\}$  означает, что в выражении в фигурных скобках  $x$  заменено на  $x^P$ .

Перейдем к другому понятию решения бескоалиционной игры  $G_N$  – равновесию угроз и контругроз, где, напомним, используем  $N$ -вектор  $f = (f_1, \dots, f_N) \in \mathbb{R}^N$ . Оно (понятие) выглядит более громоздко, чем определение равновесного решения по Нэшу и по Бержу из определений 1 и 2.

Именно, пусть  $x^P \in X$  – максимальная по Парето ситуация в задаче  $G_v$ . Будем считать, что у первого игрока имеется угроза на ситуацию  $x^P$ , если у него существует такая стратегия  $x_1^T \in X_1$ , что

$$f_1(x_1^T, x_2^P, \dots, x_N^P) > f_1(x_1^P, x_2^P, \dots, x_N^P). \quad (13)$$

Наличие угроз не означает ее обязательное применение, а лишь *animus denuntiandi* (намерение пригрозить (*лат.*)). Применение санкций выгодно первому игроку, ибо при этом, согласно (13), его выигрыш увеличивается по сравнению с выигрышем в ситуации  $x^P$ . В ответ на угрозу первого игрока  $x_1^T$ , у второго имеется «неполная» контругроза, если у него существует стратегия  $x_2^C \in X_2$ , при которой

$$f_1(x_1^T, x_2^C, x_3^P, \dots, x_N^P) < f_1(x_1^P, x_2^P, \dots, x_N^P). \quad (14)$$

И у второго имеется «полная» контругроза (или просто контругроза), если существует у него такая стратегия  $x_2^C \in X_2$ , что одновременно с неравенством (14) выполняется

$$f_2(x_1^T, x_2^C, x_3^P, \dots, x_N^P) > f_2(x_1^P, x_2^P, \dots, x_N^P). \quad (15)$$

Аналогично определяем контругрозу всех остальных игроков от 3-го до  $N$ -го в ответ на угрозу первого.

При наличии указанной неполной контругрозы второй игрок за счет выбора своей стратегии  $x_2^C$  приводит, согласно (14), выигрыш первого (угрожающего) игрока к значению, не превосходящему его первоначальный выигрыш в ситуации  $x^P$  (но может и уменьшиться!). Все происходит, как по девизу Наполеона I: «Order, contre-order, disorder» (распоряжение – контрраспоряжение – беспорядок (*фр.*)). Таким образом, наличие «неполной» контругрозы «сводит к нулю» применение угрозы первым игроком. В дополнение к этому «полная» контругроза побуждает второго к применению  $x_2^C$ , ибо в полученной в результате угроз и контругроз ситуации  $(x_1^T, x_2^C, x_3^P, \dots, x_N^P)$  выигрыш второго увеличится по сравнению с выигрышем в ситуации  $(x_1^P, x_2^P, \dots, x_N^P)$ , сложившейся при реализации максимальной по Парето ситуации.

В результате становится ясным следующий факт: если в ответ на любую угрозу какого-либо игрока хотя бы у одного из оставшихся имеется контругроза, то угрозу применять не имеет смысла!

**Определение 4.** Пару  $(x^P, f^P = f^P(x^P)) \in X \times \mathbb{R}^N$  назовем равновесием угроз и контругроз в игре  $G_N$ , если

a) ситуация  $x^P \in X$  максимальна по Парето в  $N$ -критериальной задаче  $G_v$ ,

b) в игре  $G_N$  в ответ на любую угрозу любого игрока по крайней мере у одного из оставшихся имеется контругроза.

Здесь снова напомним, что  $N$ -вектор  $f = (f_1, \dots, f_N)$ , и поэтому определение 4 рекомендует всем  $N$  игрокам следовать своим стратегиям из ситуации  $x^P = (x_1^P, \dots, x_N^P)$ , ибо, во-первых, максимальная по Парето ситуация  $x^P$  внешне и внутренне устойчива.

### 3. Сведения из математического программирования

Для скалярной функции

$$F(x, \alpha) = f_1(x) + \alpha_2 f_2(x) + \dots + \alpha_N f_N(x) \quad (16)$$

векторных аргументов  $x = (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^{\sum_{i \in \mathbb{N}} n_i}$ ,  $\alpha = (\alpha_2, \dots, \alpha_N) \in \mathbb{R}^{N-1}$  вводится [25, с. 109] предел

$$\frac{\partial F(x, \alpha)}{\partial x} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{F(x + ty) - F(x)}{t} = (y, z); \quad (17)$$

если предел (17) существует и равен скалярному произведению  $y'z$ , то вектор  $z$  называют градиентом  $F(x, \alpha)$ . Сводка явных видов градиентов в [25, с. 109]: в частности,

$$\text{grad}_x x'd = d, \quad \text{grad}_x x'Dx = (D + D')x, \quad \text{grad}_x d = 0_n,$$

кроме того, гессиан

$$\frac{\partial^2 x'Dx}{\partial x^2} = D + D',$$

где использованы постоянные  $n$ -вектор  $d$ ,  $n \times n$ -матрицы  $D$ ; причем, если  $D = D'$ , то  $\text{grad}_x x'Dx = 2Dx$ .

Наконец, с учетом явного вида  $f_i(x)$  из (2) получаем (с учетом (17))

$$F(x, \alpha) = x'_1 D_1(\alpha) x_1 + 2d'_{11} x_1 + x'_2 D_2(\alpha) x_2 + 2\alpha_2 d'_{22} x_2 + \dots + x'_N D_N(\alpha) x_N + 2\alpha_N d'_{NN} x_N. \quad (18)$$

Тогда

$$\frac{\partial F(x, \alpha)}{\partial x_i} \Big|_{x=x^P} = 2D_i(\alpha)x_i + 2d_{ii} \quad (i \in \mathbb{N}), \quad (19)$$

$$\frac{\partial^2 F(x, \alpha)}{\partial x_i^2} \Big|_{x=x^P} = 2D_i(\alpha) \quad (i \in \mathbb{N}). \quad (20)$$

Достаточным условием существования максимальной по Парето ситуации  $x^P$  задачи  $G_v$ , в силу свойства 7, сводится к выполнению двух групп требований

a) градиенты

$$\frac{\partial F(x, \alpha)}{\partial x_i} \Big|_{x=x^P} = 0_n \quad (i \in \mathbb{N}), \quad (21)$$

b) гессианы

$$\frac{\partial^2 F(x, \alpha)}{\partial x_i^2} \Big|_{x=x^P} < 0 \quad (i \in \mathbb{N}). \quad (22)$$

Перейдем к нахождению явного вида максимума по Парето  $(x^P, f^P) \in X \times \mathbb{R}^N$  (определение 4). Здесь прежде всего отметим, что фигурирующие в (18)–(20) матрицы

$$D_i(\alpha) = D_{1i} + \alpha_2 D_{2i} + \dots + \alpha_N D_{Ni} \quad (i \in \mathbb{N}). \quad (23)$$

Объединение (19) с (21) и (20) с (23) приводит к справедливости следующего утверждения.

## Математика

**Лемма 1.** Если существуют  $N - 1$  положительных чисел  $\alpha_2, \dots, \alpha_N$  таких, что квадратичные формы  $x_i^P D_i(\alpha) x_i$  ( $i \in \mathbb{N}$ ) определенно отрицательны, то максимум по Парето  $(x^P, f^P) \in X \times \mathbb{R}^N$  будет

$$\begin{aligned} x^P &= (x_1^P, \dots, x_N^P), \quad x_i^P = -D_i^{-1}(\alpha) d_{ii} \quad (i \in \mathbb{N}), \quad f^P = (f_1^P, \dots, f_N^P) = f(x^P), \\ f_1^P &= -d'_{11} D_1^{-1}(\alpha) D_{11} D_1^{-1}(\alpha) d_{11} + d'_{22} D_2^{-1}(\alpha) D_{12} D_2^{-1}(\alpha) d_{22} + \dots \\ &\dots + d'_{NN} D_N^{-1}(\alpha) D_{1N} D_N^{-1}(\alpha) d_{NN}, \\ &\dots \dots \dots \\ f_N^P &= d'_{11} D_1^{-1}(\alpha) D_{N1} D_1^{-1}(\alpha) d_{11} + \dots - d'_{NN} D_N^{-1}(\alpha) D_{NN} D_N^{-1}(\alpha) d_{NN}. \end{aligned} \quad (24)$$

Завершает нахождение максимума по Парето в  $G_N$  рекуррентный алгоритм построения вектора  $\alpha^* = (\alpha_2^*, \dots, \alpha_N^*)$  с положительными компонентами  $\alpha_j^*$  ( $j = 2, \dots, N$ ), «обеспечившего» выполнение соотношения  $D_i(\alpha^*) < 0$  ( $i \in \mathbb{N}$ ) Это имеет место, если компоненты  $\alpha^* \in \mathbb{R}^N$  являются положительным решением системы

$$\begin{cases} D_1(\alpha^*) = D_{11} + \alpha_2^* D_{12} + \dots + \alpha_N^* D_{N1} < 0, \\ D_2(\alpha^*) = D_{12} + \alpha_2^* D_{22} + \dots + \alpha_N^* D_{N2} < 0, \\ \dots \dots \dots \\ D_N(\alpha^*) = D_{1N} + \alpha_2^* D_{2N} + \dots + \alpha_N^* D_{NN} < 0. \end{cases} \quad (25)$$

С учетом (3) и (4), где при  $D_{ii} > 0$ ,  $D_{ij} < 0$   $i, j \in \mathbb{N}$ ,  $j \neq i$  и числа  $\Lambda_{ij} > 0$ , ( $i, j \in \mathbb{N}$ ), будет

$$x_i^P D_{ii} x_i \leq \Lambda_{ii} x_i^P x_i \quad (i \in \mathbb{N}), \quad x_j D_{ij} x_j \leq -\Lambda_{ij} x_j^P x_j \quad (j \in \mathbb{N}). \quad (26)$$

Здесь  $\Lambda_{ii} > 0$  – наибольший корень характеристического уравнения  $\det[D_{ii} - \lambda E_{n_i}] = 0$ , а  $-\Lambda_{ij} < 0$  – наименьший корень  $\det[D_{ij} - \lambda E_{n_j}] = 0$ . Принимая во внимание  $D_{ij} < 0 \Leftrightarrow (-1)D_{ij} > 0$ , согласно (26), условия (25) выполняются, если

$$\begin{cases} \Lambda_{11} - \alpha_2^* \Lambda_{21} - \alpha_3^* \Lambda_{31} - \dots - \alpha_N^* \Lambda_{N1} < 0, \\ -\Lambda_{12} + \alpha_2^* \Lambda_{22} - \alpha_3^* \Lambda_{32} - \dots - \alpha_N^* \Lambda_{N2} < 0, \\ -\Lambda_{13} - \alpha_2^* \Lambda_{23} + \alpha_3^* \Lambda_{33} - \dots - \alpha_N^* \Lambda_{N3} < 0, \\ \dots \dots \dots \\ -\Lambda_{1N-1} - \alpha_2^* \Lambda_{2N-1} - \dots + \alpha_{N-1}^* \Lambda_{N-1N-1} - \alpha_N^* \Lambda_{NN-1} < 0, \\ -\Lambda_{1N} - \alpha_2^* \Lambda_{2N} - \dots - \alpha_{N-1}^* \Lambda_{N-1N} + \alpha_N^* \Lambda_{NN} < 0. \end{cases} \quad (27)$$

Далее будем предполагать, что  $D_{ii} > 0$ ,  $D_{ij} < 0$  ( $i, j \in \mathbb{N}$ ,  $j \neq i$ ) и среди игроков в игре  $G_N$  существуют, по крайней мере, два:  $i$ -й и  $j$ -й из  $\mathbb{N}$ , таких, что  $j \neq i$  и

$$\Lambda_{ii} \Lambda_{jj} < \Lambda_{ij} \Lambda_{ji} \quad (i, j \in \mathbb{N}, j \neq i), \quad (28)$$

где  $\Lambda_{ii} > 0$  – наибольший из корней характеристического уравнения  $\det[D_{ii} - \lambda E_{n_i}] = 0$  и  $-\Lambda_{ij} < 0$  – наименьший из корней  $\det[D_{ij} - \lambda E_{n_j}] = 0$ . Перестановкой порядковых номеров в  $N$  можно добиться, чтобы соотношение (28) выполнялось для  $i = 1$  и  $j = 2$ . Здесь следует иметь в виду, что порядковый номер игрока выполняет в математической модели роль имени (фамилии) участника конфликта. Более того, часто задается ЛПР (лицом, принимающим решение) произвольно.

Итак, далее, фактически не уменьшая общности, будем полагать, дополнительно к  $D_{ii} > 0$ ,  $D_{ij} < 0$  ( $i, j \in \mathbb{N}, j \neq i$ ), выполнение

$$\Lambda_{11} \Lambda_{22} < \Lambda_{12} \Lambda_{21}, \quad (29)$$

где, напомним,  $\Lambda_{11} > 0$  – наибольший корень  $\det[D_{ii} - \lambda E_{n_i}] = 0$ , и  $-\Lambda_{12} < 0$  – наименьший корень  $\det[D_{ij} - \lambda E_{n_j}] = 0$ . Итак, перейдем к рекуррентному способу нахождения положительных  $\alpha_2^*, \dots, \alpha_N^*$ , являющимися решением  $N$  строгих неравенств (27) при  $D_{ii} > 0$ ,  $D_{ij} < 0$  ( $i, j \in \mathbb{N}, j \neq i$ ) и (29).

**Утверждение 3.** Предположим, что для игры  $G_N$  (см. (1) и (2))

1) постоянные, вещественные, симметричные матрицы

$$D_{ii} > 0, D_{ij} < 0 \quad (i, j \in \mathbb{N}, j \neq i); \quad (30)$$

2) имеют место строгие неравенства

$$\Lambda_{ii}\Lambda_{jj} < \Lambda_{ij}\Lambda_{ji} \quad (31)$$

Тогда система уравнений (27) имеет положительные решения  $\alpha_2^*, \dots, \alpha_N^*$ , определяемые рекурсивными соотношениями

$$\begin{aligned} \forall \alpha_2^* \in \left( \frac{\Lambda_{11}}{\Lambda_{21}}, \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{22}} \right), \quad \forall \alpha_3^* \in \left( 0, \frac{\Lambda_{13} + \alpha_2^* \Lambda_{23}}{\Lambda_{33}} \right), \quad \forall \alpha_4^* \in \left( 0, \frac{\Lambda_{14} + \alpha_2^* \Lambda_{24} + \alpha_3^* \Lambda_{34}}{\Lambda_{44}} \right), \quad (32) \\ \dots \\ \forall \alpha_{N-1}^* \in \left( 0, \frac{\Lambda_{1N-1} + \alpha_2^* \Lambda_{2N-1} + \alpha_3^* \Lambda_{3N-1} + \dots + \alpha_{N-1}^* \Lambda_{N-2N-1}}{\Lambda_{N-1N-1}} \right), \\ \forall \alpha_N^* \in \left( 0, \frac{\Lambda_{1N} + \alpha_2^* \Lambda_{2N} + \alpha_3^* \Lambda_{3N} + \dots + \alpha_{N-1}^* \Lambda_{N-1N}}{\Lambda_{NN}} \right). \end{aligned}$$

#### 4. Отсутствие равновесия по Нэшу и существование равновесия угроз и контругроз

Объединение леммы 1 и утверждения 3 приводит к справедливости следующей теоремы.

**Теорема 1.** Предположим, что для игры  $G_N$  (см. (1) и (2)) выполняется (30) и (31). Тогда максимальное по Парето решение  $(x^P, f^P) \in X \times \mathbb{R}^N$  имеет вид

$$\begin{aligned} x^P = (x_1^P, \dots, x_N^P), \quad x_i^P = -D_i^{-1}(\alpha^*)d_{ii} \quad (i \in \mathbb{N}) \\ f^P = (f_1^P, \dots, f_N^P), \end{aligned}$$

причем

$$\begin{aligned} f_1^P = -d'_{11}D_1^{-1}(\alpha^*)D_{11}D_1^{-1}(\alpha^*)d_{11} + d'_{22}D_2^{-1}(\alpha^*)D_{12}D_2^{-1}(\alpha^*)d_{22} + \dots \\ \dots + d'_{NN}D_N^{-1}(\alpha^*)D_{1N}D_N^{-1}(\alpha^*)d_{NN} \\ \dots \\ f_N^P = d'_{N1}D_1^{-1}(\alpha^*)D_{N1}D_1^{-1}(\alpha^*)d_{N1} + \dots - d'_{NN}D_N^{-1}(\alpha^*)D_{NN}D_N^{-1}(\alpha^*)d_{NN}. \end{aligned} \quad (33)$$

Для игры  $G_N$  (см. (1) и (2)) рассмотрим оптимизационную задачу: найти  $\max_{x_1 \in X_1} f_1(x_1, \overline{x_2}, \dots, \overline{x_N})$  при ограниченных  $X_1 \subset \mathbb{R}^{n_1}$  и фиксированных стратегиях  $\overline{x_2} \in \mathbb{R}^{n_2}$  второго,  $\dots$ ,  $N$ -го  $\overline{x_N} \in \mathbb{R}^{n_N}$  игроков.

Покажем, что эта задача не имеет решения (при выполнении  $D_{11} > 0$ ). В самом деле, какую бы стратегию  $\tilde{x}_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$  первый игрок ни выбрал, в силу  $D_{11} > 0$  и утверждения 1 существует стратегия  $x_1^T = \alpha e_{n_1}$  такая, что для  $\forall \alpha > \alpha^* = \text{const} > 0$  будет

$$f_1(x_1^T, \overline{x_2}, \dots, \overline{x_N}) > f_1(\tilde{x}_1, \overline{x_2}, \dots, \overline{x_N}).$$

Этот факт одновременно означает (согласно определению 1), что в игре  $G_N$  при  $D_{ii} > 0$  ( $i \in \mathbb{N}$ ) не выполняется ни одного из  $N$  равенств из определения 1. Данное обстоятельство мы бы назвали *сильным отсутствием равновесия по Нэшу*. Таким образом, получим

**Утверждение 4.** Если в игре  $G_N$  (см. (1) и (2)) матрица  $D_{11} > 0$ , то в  $G_N$  не существует равновесия по Нэшу.

Однако «экономический смысл» математической модели требует все же принятия какого-либо равновесного устойчивого решения, т. е. необходимо рекомендовать игрокам использовать свои стратегии из некоторой устойчивой ситуации и в результате получить определенные выигрыши (доходы). Как следует из утверждения 4, «общепризнанная» ситуация равновесия по Нэшу здесь не существует (и поэтому не подходит). Поэтому и предлагаем использовать Паретовское равновесие угроз и контругроз (определение 4).

Во-первых, оно максимально по Парето (тем самым «снимает» внешнюю и внутреннюю неустойчивость, присущую, как правило, равновесию по Нэшу).

Во-вторых, оно устойчиво к отклонениям отдельного игрока (за счет контругроз).

В-третьих, существует (при выполнении (30) и (31)), даже когда не существует равновесия по Нэшу.

В-четвертых, обладает тремя неоспоримыми достоинствами равновесия по Нэшу: устойчивостью к отклонению от  $x^P$  отдельного игрока, выполнено условие индивидуальной рациональности и совпадает с седловой точкой – общепризнанным решением антагонистического варианта игры  $G_N$  (поэтому применение равновесия угроз и контругроз имеет как раз те же «неоспоримые достоинства», что и равновесие по Нэшу).

В-пятых, для дифференциальных линейно-квадратичных игр *трех лиц* уже ранее доказано существование равновесия угроз и контругроз и найден его явный вид в [31, 32].

Приведем аналогичный результат, касающийся статического варианта игры  $N > 2$  лиц. Заметим, что использование концепции угроз и контругроз в качестве решения бескоалиционной игры  $N \geq 2$  лиц, по-видимому, впервые.

**Теорема 2.** Пусть для игры  $N$  лиц  $G_N$  из (1) и (2)

1) вещественные постоянные симметричные матрицы  $D_{ii} > 0$ ,  $D_{ij} < 0$  ( $i, j \in \mathbb{N}, j \neq i$ ),

2) выполняются неравенства

$$\Lambda_{11}\Lambda_{22} < \Lambda_{12}\Lambda_{21},$$

где  $\Lambda_{ii} > 0$  и  $\Lambda_{ij} > 0$  ( $i, j = 1, 2, j \neq i$ ) наибольшие, а  $-\Lambda_{ij}$  – наименьшие корни характеристических уравнений  $\det[D_{ii} - \lambda E_{n_i}] = 0$  и  $\det[D_{ij} - \lambda E_{n_j}] = 0$  соответственно.

Тогда в игре  $G_N$  пара  $(x^P, f^P) \in X \times \mathbb{R}^N$  является равновесием угроз и контругроз, где

$$x^P = (x_1^P, \dots, x_N^P) \in X, \quad f^P = (f_1^P, \dots, f_N^P) = (f_1(x^P), \dots, f_N(x^P)),$$

здесь стратегии  $x_i^P = -D_i^{-1}d_{ii}$  ( $i \in \mathbb{N}$ ), постоянные  $(\alpha_2^*, \dots, \alpha_N^*) = \alpha^*$  определяются последовательными рекурсивными соотношениями (32), а числа  $f_i^P$  заданы в (33).

**Замечание 2.** В этом параграфе настоящей статьи найдена бескоалиционная игра  $N > 2$  лиц  $G_N$  в нормальной форме, в которой не существует равновесия по Нэшу и одновременно существует равновесие угроз и контругроз. Этот факт заставляет исследователей обратить внимание на зарождающееся новое направление математической теории бескоалиционных игр, связанных с новыми понятиями равновесия. Одному из них, равновесию санкций и контрсанкций, и посвящен этот и следующий раздел настоящей статьи.

## 5. Равновесие санкций и контрсанкций

Как и в предыдущем разделе статьи, рассматриваем бескоалиционную игру  $N \geq 2$  лиц в нормальной форме

$$G_N = \langle \mathbb{N} = \{1, \dots, N\}, \{X_i\}_{i \in \mathbb{N}}, \{f_i(x)\}_{i \in \mathbb{N}} \rangle.$$

Напомним, что  $\mathbb{N} = \{1, \dots, N\}$  – множество порядковых номеров игроков, стратегия  $i$ -го игрока  $x_i \in X_i \subseteq \mathbb{R}^{n_i}$ , каждый  $i$ -й игрок выбирает и использует свою стратегию  $x$ , и в результате образуется ситуация  $x = (x_1, \dots, x_N) \in X = \mathbb{R}^{\sum_{i \in \mathbb{N}} n_i}$ . На множестве ситуаций  $X$  определена функция выигрыша  $i$ -го игрока с помощью линейно-квадратичной формы

$$f_i(x) = \sum_{j \in \mathbb{N}} x_j' D_{ij} x_j + 2d_{ii}' x_i \quad (i \in \mathbb{N}), \quad (34)$$

где постоянные, вещественные, симметричные матрицы  $D_{ij}$  и постоянный  $n_i$ -вектор-столбец  $d_{ii}$  заданы априори, напомним, что штрих сверху означает операцию транспонирования ( $x_i'$  –  $n_i$ -вектор-строка).

Различие между концепцией угроз и контругроз и предполагаемой здесь концепцией санкций и контрсанкций заключается как раз в различии понятий «угроза» и «санкция» (приведенных в начале этой статьи). Если «угроза» (в большинстве случаев) подразумевает запугивание, обещание причинить вред, неприятность, то «санкция» связана с практической реализацией угрозы и встает вопрос: как действовать (какую стратегию выбрать игроку) при реализации угрозы, как учитывать эту угрозу при условии ее осуществления? Это обстоятельство потребовало изменения понятия «угрозы» и «контругрозы» на «санкцию» и «контрсанкцию», но сама концепция – как возможный подход к принятию равновесного решения бескоалиционной игры базируется здесь снова на определении 4 равновесия угроз и контругроз и теореме 2 (о существовании равновесия угроз и контругроз).

Перейдем к формальным понятиям. Будем говорить, что в игре  $G_N$  имеется санкция на игрока ( $i \in \mathbb{N}$ ), если у контркоалиции  $-i = \{1, 2, \dots, i-1, i+1, \dots, N\}$  имеется стратегия  $x_{-i}^S \in \mathbb{R}^{-i}$ , а в ответ на  $x_{-i}^S$  стратегия  $i$ -го игрока  $x_i^C \in \mathbb{R}^{n_i}$  такая, что функция выигрыша  $i$ -го игрока реализует выигрыш  $f_i^C = f_i(x_i^C, x_{-i}^S)$ . Такая ситуация  $(x_i^C, x_{-i}^S)$  может, например, образоваться, если в ответ на применение контркоалицией  $-i$  ее стратегии  $x_{-i}^S$  игрок  $i$  вынужден отреагировать стратегией  $x_i^C$ . Отметим, что в этом случае может произойти одна из двух возможностей (если, конечно, существует в игре  $G_N$  максимум по Парето  $(x^P, f^P) \in X \times \mathbb{R}^N$ ):

$$f_i^C \leq f_i^P = f_i(x^P) \text{ и } f_i^C > f_i^P. \quad (35)$$

Основные изменения с определением угроз и контругроз связаны с понятием контрсанкция (по сравнению с «контругрозой»). Именно в ответ на санкцию  $x^S = (x_i^P, x_{-i}^S)$  у игрока  $i$  имеется контрсанкция, если у него существует стратегия  $x_i^C \in \mathbb{R}^{n_i}$ , при которой выполняются два строгих неравенства:

$$f_j(x_i^C, x_j^S, x_{\mathbb{N} \setminus \{i, j\}}^S) < f_j = f_j(x^P), \quad (36)$$

$$f_i(x_i^C, x_{-i}^S) > \max\{f_i = f_i(x^P), n_i M_i\}. \quad (37)$$

Здесь уже  $M_i$  есть максимум абсолютных величин элементов матрицы  $D_{ii} = (d_{lk}^{(j, i)})$ , т. е.  $M_i = \max_{l, k=1, \dots, n_i} |d_{lk}^{(j, i)}|$  (постоянная  $M_i$  фигурирует в теореме Гирша и Бендиксона из [28], см. свойство 3).

**Определение 5.** Пару  $(x^P, f^P) \in X \times \mathbb{R}^N$  назовем равновесием санкций и контрсанкций игры  $G_N$ , если, во-первых, пара  $(x^P, f^P = f(x^P))$  максимальна по Парето в  $N$ -критериальной задаче

$$G_v = \langle X, f(x) = (f_1(x), \dots, f_N(x)) \rangle,$$

во-вторых, в ответ на любую санкцию  $x^S = (x_i^P, x_{-i}^S) \in X$  у игрока  $i$  имеется контрсанкция  $x_i^C \in X_i$ , которая реализует (36) и (37).

Неравенство (36) говорит о том, что в  $G_N$  имеется  $j \in -i$ , который уменьшает выигрыш  $i$ -го игрока по сравнению с его паретовским  $f_i^P$ , тем самым добавляет свою «лепту» в санкцию. Согласно утверждению 2 и  $D_{ij} < 0$ , тогда существует постоянная  $\alpha^{(1)} = \alpha^{(1)}(x_i^P, x_{-i}^S) > 0$  такая, что для стратегии  $i$ -го игрока  $x_i^C = \alpha e_{n_i}$  при  $\forall \alpha > \alpha^{(1)}$  выполнено (36),  $e_{n_i}$  –  $n_i$ -вектор-столбец с единичными координатами. Наконец, из утверждения 1 и  $D_{ii} > 0$  можно аналогично заключить, что

что имеется постоянная  $\alpha^{(2)} = \alpha^{(2)}(x_i^P, x_{-i}^S) > 0$  такая, что для  $\alpha > \alpha^{(2)}$  и стратегии  $i$ -го игрока  $x_i^C = \alpha e_{n_i}$  имеет место (37). Тогда оба неравенства (36) и (37) одновременно выполнимы для стратегии  $i$ -го игрока  $x_i^C = \alpha e_{n_i}$  при  $\forall \alpha > \max\{\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)}\}$ .

Остановимся на «экономическом смысле» (36) и (37). Первое из них, как уже упоминалось, говорит, что в санкции на  $i$ -го игрока могут участвовать все остальные, второе, т. е. выполнение (37), означает, что  $i$ -му игроку «выгодно» участвовать в контрсанкции, ибо тогда он может достичь (по теореме Гирша и Бендиксона) самого большого (для себя) выигрыша.

### Заключение

В настоящей статье рассматривается (в (1) и (2)) бескоалиционная игра  $N$  лиц ( $N > 2$ ) в нормальной форме. Такая математическая модель может возникнуть, например, при распределении одной инвестиции в несколько, объединенных тем или иным образом предприятий. Показано, что в такой игре (1) и (2) не существует как равновесия по Нэшу, так и по Бержу, но существуют равновесие угроз и контругроз, а также, введенное в статью, равновесие санкций и контрсанкций. Оба этих равновесия максимальны по Парето, обладают достоинствами общепризнанного равновесия по Нэшу (устойчивостью к отклонению отдельных игроков и совпадает с седловой точкой в антагонистическом случае). Но, в отличие от равновесия по Нэшу, множество их внешне и внутренне устойчиво. Мы надеемся, что эта статья привлечет внимание и побудит далее исследовать равновесия как угроз и контругроз, так и санкций и контрсанкций.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-21-00539, <https://rscf.ru/project/23-21-00539/>.*

### Литература

1. Nash, J. Equilibrium points in N-person games / J. Nash // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 1950. – Vol. 36, no. 1. – P. 48–49.
2. Nash, J. Non-cooperative games / J. Nash // The Annals of Mathematics, Second Series. – 1951. – Vol. 54, no. 2. – P. 286–295
3. Мамедов, М. Б. О равновесии по Нэшу ситуации, оптимальной по Парето / М.Б. Мамедов // Изв. АН Азербайджана. Серия физ.-тех. наук. – 1983. – Т. 4, № 2. – С. 11–17.
4. Подиновский, В.В. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач / В.В. Подиновский, В.Д. Ногин. – М.: Физматлит, 2007. – 255 с.
5. Case, J.H. A Class of Games Having Pareto Optimal Nash Equilibrium / J.H. Case // J. Optimiz. Theory Appl. – 1974. – Vol. 13, no. 3. – P. 378–385.
6. Salukvadze M.E., Zhukovskiy V.I. The Berge Equilibrium: A Game-Theoretic Framework for the Golden Rule of Ethics / M.E. Salukvadze, V.I. Zhukovskiy – Birkhäuser Cham, 2020. – 272 p.
7. Жуковский, В.И. Дифференциальные уравнения. Линейно-квадратичные дифференциальные игры: учебное пособие для ВУЗов / В.И. Жуковский, А.А. Чикрий. – М.: Юрайт, 2017. – 322 с.
8. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. – М.: Наука, 1984. – 456 с.
9. Жуковский, В.И. Равновесные управления многокритериальных динамических задач / В.И. Жуковский, Н.Т. Тынянский. – М.: Изд-во МГУ, 1984. – 224 с.
10. Вилкас, Э.И. Формализация проблемы выбора теоретико-игрового критерия оптимальности / Э.И. Вилкас // Математические методы в социальных науках: Сб. статей. Вильнюс: Ин-т математики и кибернетики АН Лит. ССР, 1972. – Вып. 2. – С. 9–55.
11. Вилкас, Э.И. Решения: теория, информация, моделирование / Э.И. Вилкас, Е.З. Майминас. – М.: Радио и связь, 1981. – 328 с.
12. Льюс, Р. Д. Игры и решения. / Р. Д. Льюс, Х. Райфа. – М.: Иностранная литература, 1961. – 642 с.
13. Оуэн, Г. Теория игр / Г. Оуэн. – М.: Изд-во ЛКИ/URSS, 2010. – 216 с.
14. Смольяков, Э.Р. Теория конфликтных равновесий / Э.Р. Смольяков. – М.: УРСС, 2005. – 301 с.
15. Вайсборд, Э.М. О коалиционных дифференциальных играх / Э.М. Вайсборд // Дифференциальные уравнения. – 1974. – Т. 10, № 4. – С. 613–623.



16. Вайсборд, Э.М. Введение в дифференциальные игры нескольких лиц и их приложения / Э.М. Вайсборд, В.И. Жуковский. – М.: Советское радио, 1980. – 304 с.
17. Жуковский, В.И. Введение в дифференциальные игры при неопределенности. Равновесие угроз и контругроз / В.И. Жуковский. – М.: КРАСАНД, 2010. – 192 с.
18. Кузнецов, С.А. Большой толковый словарь русского языка / С.А. Кузнецов. – СПб, М.: Норинт, Рипол классик, 2008. – 1534 с.
19. Rashkov, P.I. Sufficient Conditions for Z-Equilibrium in a Differential Game in Banach Space / P.I. Rashkov // Many Players Differential Game. – Bulgaria, Rouse: Technical Univ., 1984. – P. 91–99.
20. Tersian, St.A. On the Z-Equilibrium Points in a Differential Game / St.A. Tersian // Many Players Differential Game. – Bulgaria, Rouse: Technical Univ., 1984. – P. 106–111.
21. Zhukovskiy, V.I. Some Problems of Non-Antagonistic Differential Games / V.I. Zhukovskiy // Mathematical Methods in Operations Research. – Sofia: Bulgarian Academy of Sciences. – 1985. – P. 103–195.
22. Dochev, D.T. Existence of Z-Equilibrium in a Differential Game with Delay / D.T. Dochev, N.V. Stojanov // Many Players Differential Game. – Bulgaria, Rouse: Technical Univ., 1984. – P. 64–72.
23. Gaidov, S.D. Z-Equilibrium in Stochastic Differential Game / S.D. Gaidov // Many Players Differential Game. – Bulgaria, Rouse: Technical Univ., 1984. – P. 53–63.
24. Biltchev, S.J.  $\varepsilon$ - Z- Equilibrium in a Differential Game Described by a Parabolic System / S.J. Biltchev // Many Players Differential Game. – Bulgaria, Rouse: Technical Univ., 1984. – P. 47–52.
25. Воеводин, В.В. Матрицы и вычисления / В.В. Воеводин, Ю.А. Кузнецов. – М.: Наука, 1984. – 320 с.
26. Гантмахер, Ф.Р. Теория матриц / Ф.Р. Гантмахер. – М.: Физматлит, 2004. – 560 с.
27. Пароди, М. Локализация характеристических чисел матриц и ее применение / М. Пароди. – М.: Изд-во иностр. лит., 1960. – 170 с.
28. Hirsch A. Sup les Racines D'une Equation Fondamentale / A. Hirsch, I. Bendikson // Acta Math. – 1902. – Vol. 25. – pp. 367–370.
29. Frobenius G. Uber Matrizen aus Positiven Elementen / G. Frobenius. – Preuss. Acad. Wissenschaften. – 1909. – P. 471–476.
30. Parker, W.V. The Characteristic Roots of a Matrix / W.V. Parker // Duke Math J. – 1937. – Vol. 3, no. 1. – P. 484–487.
31. Жуковский, В.И. Дифференциальная игра трех лиц, в которой не существует равновесия по Нэшу, но имеется равновесие угроз и контругроз / В.И. Жуковский, Л.В. Смирнова, Ю.Н. Житенева, Ю.А. Бельских // ТВИМ. – 2019. – Т. 43, № 2. – С. 39–66.
32. Жуковский, В.И. К индивидуальной устойчивости Паретовского равновесия угроз и контругроз в одной коалиционной дифференциальной игре с нетрансферабельными выигрышами / В.И. Жуковский, К.Н. Кудрявцев, Л.В. Жуковская, И.С. Стабулит // Математическая теория игр и ее приложения. – 2021. – Т. 13, № 1. – С. 89–101.

*Поступила в редакцию 20 сентября 2024 г.*

### **Сведения об авторах**

Жуковский Владислав Иосифович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра оптимального управления факультета ВМиК, МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация, e-mail: zhkvlad@yandex.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9594-0115>.

Жуковская Лидия Владиславовна – доктор экономических наук, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Центральный экономико-математический институт РАН, г. Москва, Российская Федерация, e-mail: zhukovskaylv@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-4152-3161>.

Кудрявцев Константин Николаевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра математического обеспечения информационных технологий, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация; доцент, кафедра моделирования и системного анализа, Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, г. Москва, Российская Федерация, e-mail: kudriavtcevkn@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9279-4490>.

Самсонов Сергей Петрович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра оптимального управления факультета ВМиК, МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация, e-mail: samsonov@cs.msu.su.

Смирнова Лидия Викторовна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра информатики и физики, Государственный гуманитарно-технологический университет, г. Орехово-Зуево, Российская Федерация, e-mail: smirnovaidiya@rambler.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4675>.

### THE PARETO EQUILIBRIUM OF OBJECTIONS AND COUNTEROBJECTIONS IN LINEAR-QUADRATIC GAMES OF N PERSON

V.I. Zhukovskiy<sup>1</sup>, L.V. Zhukovskaya<sup>2</sup>, K.N. Kudryavtsev<sup>3,4</sup>, S.P. Samsonov<sup>1</sup>, L.V. Smirnova<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Moscow State University, Moscow, Russian Federation

<sup>2</sup> Central Economic and Mathematical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation

<sup>3</sup> South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

<sup>4</sup> Finance University under the Government of the Russian Federation, Moscow, Russian Federation

<sup>5</sup> State University of Humanities and Technology, Orekhovo-Zuevo, Russian Federation

E-mail: smirnovaidiya@rambler.ru

Abstract. Publications on mathematical game theory with many (not less than 2) players can be conditionally distributed in four directions: non-cooperative, hierarchical, cooperative and coalition games. The last two, in turn, are divided into games with side and non-side payments and games with transferable and nontransferable payoffs, respectively. If the first ones are actively studied (St. Petersburg State Faculty of Applied Mathematics and Control Processes, St. Petersburg Institute of Economics and Mathematics, Institute of Applied Mathematical Research of Karelian Research Centre RAS), the games with non-transferable payoffs are not covered. The paper proposes the conception of objections and counter-objections. The initial investigations were published in two monographs of E.I. Vilkas, the Lithuanian mathematician (the student of N.N. Vorobjev, the professor of St. Petersburg University). For the differential games this conception was first applied by E.M. Waisbord in 1974, then it was continued by the first author of the present article together with E.M. Waisbord in the book *Introduction to the theory of differential games of n-persons and its application* (1980), and in the monograph *Equilibrium of objections and counterobjections* (2010) by V.I. Zhukovskiy. The paper proves that in epy mathematical model there is no Nash equilibrium but there are equilibria of objections and conterobjections and simultaneously Pareto maximality.

*Keywords:* non-cooperative games; Nash equilibrium; Berge equilibrium; equilibrium of objections and counterobjections; sanctions and countersanctions; Pareto optimality.

#### References

1. Nash J. Equilibrium Points in  $N$ -Person Games. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 1950. Vol. 36, no. 1, pp. 48–49. <https://doi.org/10.1073/pnas.36.1.48>
2. Nash J. Non-Cooperative Games. *The Annals of Mathematics, Second Series*, 1951, Vol. 54, no. 2, pp. 286–295.
3. Mamedov M.B. *O ravnovesii po Neshu situatsii, optimal'noy po Pareto* (About the Nash Equilibrium of the Pareto Optimal Situation). *Izv. AN Azerbajdzhana. Seriya fiz.-tekh. nauk*, 1983, Vol. 4, no. 2, pp. 11–17. (in Russ.).
4. Podinovskiy V.V., Nogin V.D. *Pareto-optimal'nye resheniya mnogokriterial'nykh zadach* (Pareto Optimal Solution of Multicriteria Problems). Moscow: Fizmatlit, 2007, 255 p. (in Russ.).

5. Case J. H. A class of games having Pareto optimal Nash equilibrium. *J. Optim. Theory Appl.*, 1974. Vol. 13, no. 3. pp. 378–385. DOI: 10.1007/bf00934872
6. Salukvadze M. E., Zhukovskiy V. I. The Berge Equilibrium: A Game-Theoretic Framework for the Golden Rule of Ethics. Birkhäuser Cham, 2020, 272 p. DOI: 10.1007/978-3-030-25546-6.
7. Zhukovskiy V.I., Chikriy A.A. *Differentsial'nye uravneniya. Lineyno-kvadratichnye differentsial'nye igry* (Differential equations. Linear-quadratic differential games). Moscow, Yurayt Publ., 2017, 322 p. (in Russ.).
8. Krasovskiy N.N., Subbotin A.I. *Pozitsionnye differentsial'nye igry* (Positional-differential games). Moscow, Nauka Publ., 1984, 456 p. (in Russ.) [Krasovskii N.N., Subbotin A.I. Game-theoretical control problems. New York, Springer, 1988, 517 p.]
9. Zhukovskiy V.I., Tynyanskiy N.T. *Ravnovesnye upravleniya mnogokriterial'nykh dinamicheskikh zadach* (Equilibrium control of multicriteria dynamic problems), Moscow: Izdatel'stvo MGU Publ., 1984, 224 p. (in Russ.).
10. Vilkas E.I. Formalizatsiya problemy vybora teoretiko-igrovogo kriteriya optimal'nosti (Formalization of the Problem of Choosing a Game-Theoretic Criterion of Optimality). *Matematicheskie metody v sotsial'nykh naukakh: sb. statey.* (Mathematical Methods in Social Sciences: a collection of articles). Vil'nyus, Institut matematiki i kibernetiki AN Lit. SSR Publ., 1972, Iss. 2, pp. 9–55. (in Russ.).
11. Vilkas E.I., Mayminas E.Z. *Resheniya: teoriya, informatsiya, modelirovanie* (Solutions: theory, information, modeling). Moscow, Radio i svyaz' Publ., 1981, 328 p. (in Russ.).
12. Luce R.D., Raiffa H. *Games and decisions*. New York, John Wiley and Sons, Inc, 1957, 509 p.
13. Owen G. *Game theory*. New York: Academic Press, 1995, 447 p.
14. Smol'yakov E.R. *Teoriya konfliktnykh ravnovesiy* (Theory of Conflict Equilibria). Moscow, URSS Publ, 2005, 301 p. (in Russ.).
15. Vaisbord E.M. O koalitsionnykh differentsial'nykh igrakh (Coalition Differential Games). *Differ. Uravn.*, 1974, Vol. 10, no. 4, pp. 613–623. (in Russ.).
16. Vaisbord E.M., Zhukovskii V.I. *Introduction to Multi Player Differential Game and Their Application*. New York etc., Gordon and Breach, 1988, 581 p.
17. Zhukovskiy V.I. *Vvedenie v differentsial'nye igry pri neopredelennosti. Ravnovesie ugroz i kontrugroz* (Introduction to Differential Games under Uncertainty. The Equilibrium of Objections and Counterobjections). Moscow, KRASAND Publ., 2010, 192 p. (in Russ.).
18. Kuznetsov S.A. *Bol'shoy tolkovyy slovar' russkogo yazyka* (Large Explanatory Dictionary of the Russian Language). St. Petersburg, Moscow, Norint Publ., Ripol klassik Publ., 2008, 1534 p. (in Russ.).
19. Rashkov P.I. Sufficient Conditions for Z-Equilibrium in a Differential Game in Banach Space. *Many Players Differential Game*. Bulgaria, Rouse: Technical Univ., 1984, pp. 91–99.
20. Tersian St.A. On the Z-Equilibrium Points in a Differential Game. *Many Players Differential Game*. Bulgaria, Rouse: Technical Univ., 1984, pp. 106–111.
21. Zhukovskiy V.I. Some Problems of Non-Antagonistic Differential Games. *Mathematical Methods in Operations Research*. Sofia: Bulgarian Academy of Sciences, 1985, pp. 103–195
22. Dochev D.T., Stojanov N.V. Existence of Z-Equilibrium in a Differential Game with Delay. *Many Players Differential Game*. Bulgaria, Rouse, Technical Univ., 1984, pp. 64–72.
23. Gaidov S.D. Z-Equilibrium in Stochastic Differential Game. *Many Players Differential Game*. Bulgaria, Rouse: Technical Univ., 1984, pp. 53–63.
24. Biltchev S.J.  $\varepsilon$ - Z- Equilibrium in a Differential Game Described by a Parabolic System. *Many Players Differential Game*. Bulgaria, Rouse, Technical Univ., 1984, pp. 47–52.
25. Voevodin V.V., Kuznetsov Yu.A. *Matritsy i vychisleniya* (Matrices and Calculations). Moscow, Nauka Publ., 1984, 320 p. (in Russ.).
26. Gantmakher F.R. *Teoriya matrits* (Theory of Matrices). Moscow, Fizmatlit Publ., 2004, 560 p. (in Russ.).
27. Parodi M. La Localisation des Valeurs Caractéristiques des Matrices et ses Applications. Paris, Gauthier-Villars, 1959, 172 p.
28. Hirsch A., Bendikson I. Sup les Racines d'une Equation Fondamentale. *Acta Math.*, 1902, Vol. 25. pp. 367–370. DOI: 10.1007/BF02419031
29. Frobenius G. Über Matrizen aus Positiven Elementen. *Preuss. Acad. Wissenschaften*, 1909, pp. 471–476.

30. Parker W.V. The Characteristic Roots of a Matrix. *Duke Math J.*, 1937, Vol. 3, no. 1, pp. 484–487. DOI:10.1215/S0012-7094-37-00338-7

31. Zhukovskii V.I., Smirnova L.V., Zhiteneva Yu.N., Bel'skikh Yu.A. Differential Game of Three Persons in which Nash Equilibrium doesn't Exist but Equilibrium of Objections and Counterobjection is Present. *Taurida Journal of Computer Science Theory and Mathematics*, 2019, Vol. 43, Iss. 2, pp. 39–66. (in Russ.).

32. Zhukovskii V.I., Kudryavtsev K.N., Zhukovskaya L.V., Stabulit I.S. To the Individual Stability of Pareto Equilibrium of Objections and Counterobjections in a Coalition Differential Positional 3-Person Game without Side Payments. *Mat. Teor. Igr Pril.*, 2021, Vol. 13, Iss. 1, pp. 89–101. (in Russ.).

*Received September 20, 2024*

### Information about the authors

Zhukovsky Vladislav Iosifovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Department of Optimal Control, Faculty of VMiK, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation, e-mail: zhkvlad@yandex.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9594-0115>.

Zhukovskaya Lidiya Vladislavovna is Dr. Sc. (Economics), Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Central Economic and Mathematical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation, e-mail: zhukovskaylv@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-4152-3161>.

Kudryavtsev Konstantin Nikolaevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Mathematical Support for Information Technologies, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation; Associate Professor, Department of Modeling and System Analysis, Finance University under the Government of the Russian Federation, Moscow, Russian Federation, e-mail: kudriavtcevkn@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9279-4490>.

Samsonov Sergey Petrovich Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Optimal Control, Faculty of VMiK, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation, e-mail: samsonov@cs.msu.su, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-3237-7091>.

Smirnova Lidiya Viktorovna, Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, State University of Humanities and Technology, Orekhovo-Zuevo, Russian Federation, Email: smirnovvalidiya@rambler.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4675>.

# О ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ КЛАССИФИКАЦИИ ТИПИЧНЫХ ОСОБЫХ ТОЧЕК ВЕКТОРНОГО ПОЛЯ НА ПЛОСКОСТИ С НУЛЕВОЙ $(m - 1)$ -СТРУЕЙ

**В.Ш. Ройтенберг**

Ярославский государственный технический университет, г. Ярославль, Российская Федерация  
E-mail: vroitenberg@mail.ru

**Аннотация.** Согласно теореме Гробмана–Хартмана динамическая система, задаваемая конечномерным векторным полем в окрестности особой точки, топологически эквивалентна (и даже топологически сопряжена) динамической системе, задаваемой линейризованным векторным полем в типичном случае, когда собственные значения матрицы линейной части поля в особой точке имеют ненулевые действительные части. Топологическая классификация таких особых точек простая: число собственных значений с отрицательной действительной частью является полным топологическим инвариантом. В настоящей работе дается следующее обобщение этих результатов. Показано, что для векторного поля на плоскости, имеющего нулевую  $(m - 1)$ -струю в особой точке,  $m$ -струя ( $m > 1$ ) в «типичном случае» определяет топологический тип особой точки. Дана топологическая классификация таких особых точек.

**Ключевые слова:** векторное поле на плоскости; динамическая система; особая точка; топологическая эквивалентность; топологическая классификация.

**Введение.** По теореме Гробмана–Хартмана [1–3]  $C^2$ -векторное поле  $\vec{v}(z) = Az + o(|z|)$ ,  $z \in \mathbf{R}^n$  в типичной ситуации, когда собственные значения матрицы  $A$  имеют ненулевые действительные части, топологически эквивалентно в некоторой окрестности особой точки  $z = 0$  его «главной» части – линейному векторному полю  $\vec{v}_0(z) = Az$ . В таком случае имеется топологическая классификация векторных полей  $\vec{v}(z)$  в окрестности особой точки: число собственных значений  $A$  с отрицательной действительной частью – полный топологический инвариант [3].

Дадим обобщение этих результатов на случай, когда «главная» часть векторного поля  $\vec{v}(z)$ ,  $z \in \mathbf{R}^2$  является однородным полиномиальным векторным полем степени  $m \geq 2$ .

Пусть  $C^{m+1}$ -векторное поле  $\vec{v}(x, y) = P(x, y)\partial/\partial x + Q(x, y)\partial/\partial y$ ,  $(x, y) \in \mathbf{R}^2$  имеет нулевую  $(m - 1)$ -струю ( $m \geq 2$ ) в особой точке  $O = (0, 0)$ , то есть функции  $P$  и  $Q$  имеют нулевые многочлены Тейлора  $(m - 1)$ -й степени в  $O$ . Тогда

$$P(x, y) = P_m(x, y) + p(x, y), \quad Q(x, y) = Q_m(x, y) + q(x, y),$$

где

$$P_m(x, y) = \sum_{i=0}^m a_{i, m-i} x^i y^{m-i}, \quad Q_m(x, y) = \sum_{i=0}^m b_{i, m-i} x^i y^{m-i}$$

– однородные многочлены степени  $m$ ,

$$p(x, y) = \sum_{i=0}^m p_{i, m-i}(x, y) x^i y^{m-i}, \quad q(x, y) = \sum_{i=0}^m q_{i, m-i}(x, y) x^i y^{m-i},$$

а  $p_{i, m-i}, q_{i, m-i}$  –  $C^1$ -функции,  $p_{i, m-i}(0, 0) = q_{i, m-i}(0, 0) = 0$ .

Однородное полиномиальное векторное поле  $\vec{v}_m(x, y) = P_m(x, y)\partial/\partial x + Q_m(x, y)\partial/\partial y$ ,  $(x, y) \in \mathbf{R}^2$  назовем *главной частью* векторного поля  $\vec{v}$  в особой точке  $O$ . Множество всех таких векторных полей обозначается  $\text{HP}_m$  [4].

Динамические системы на проективной плоскости  $\mathbf{RP}^2$ , задаваемые типичными однородными полиномиальными векторными полями, изучались в [4–6].

В предлагаемой заметке показано, что в «типичном» случае векторное поле  $\vec{v}$  в некоторой окрестности особой точки  $O$  топологически эквивалентно его главной части  $\vec{v}_m$ , и дана локальная топологическая классификация таких векторных полей.

## 1. Условия топологической эквивалентности $\vec{v}$ и $\vec{v}_m$ . Обозначим

$$R(\varphi) = P_m(\cos \varphi, \sin \varphi) \cos \varphi + Q_m(\cos \varphi, \sin \varphi) \sin \varphi, \quad \Phi(\varphi) = Q_m(\cos \varphi, \sin \varphi) \cos \varphi - P_m(\cos \varphi, \sin \varphi) \sin \varphi.$$

Ясно, что

$$R(\varphi + \pi) \equiv (-1)^{m+1} R(\varphi), \quad \Phi(\varphi + \pi) \equiv (-1)^{m+1} \Phi(\varphi). \quad (1)$$

**Теорема 1.** Пусть выполняется одно из двух следующих условий:

(А) Функция  $\Phi(\varphi)$  имеет нули, и все они простые. Если  $\Phi(\varphi_0) = 0$ , то  $R(\varphi_0) \neq 0$ .

(Б) Функция  $\Phi(\varphi)$  не имеет нулей, при этом  $\chi := \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{R(\varphi)}{\Phi(\varphi)} d\varphi \neq 0$ .

Тогда существуют окрестности  $U$  и  $V$  точки  $O$  и гомеоморфизм  $h: U \rightarrow V$ , переводящий ориентированные траектории поля  $\vec{v}|_U$  в ориентированные траектории поля  $\vec{v}_m|_V$ .

**Доказательство.** В полярных координатах  $\rho, \varphi$  ( $x = \rho \cos \varphi$ ,  $y = \rho \sin \varphi$ )

$$\vec{v}(x, y) = \rho^m (R(\varphi) + R_1(\rho, \varphi)) \partial / \partial \rho + \rho^{m-1} (\Phi(\varphi) + \Phi_1(\rho, \varphi)),$$

где  $R_1(\rho, \varphi)$  и  $\Phi_1(\rho, \varphi)$  –  $C^1$ -функции,  $2\pi$ -периодические по  $\varphi$ ,  $R_1(0, \varphi) = \Phi_1(0, \varphi) \equiv 0$ .

На цилиндре  $C := [0, \infty) \times \mathbf{R}/2\pi\mathbf{Z}$  рассмотрим векторные поля

$$\vec{v}^*(\rho, \varphi) = \rho(R(\varphi) + R_1(\rho, \varphi)) \partial / \partial \rho + (\Phi(\varphi) + \Phi_1(\rho, \varphi)) \partial / \partial \varphi \quad \text{и} \quad \vec{v}_m^*(\rho, \varphi) = \rho R(\varphi) \partial / \partial \rho + \Phi(\varphi) \partial / \partial \varphi.$$

Они имеют инвариантную окружность  $\Gamma_0 := \{0\} \times \mathbf{R}/2\pi\mathbf{Z}$ . Отображение

$$\text{pr}: C \ni (\rho, \varphi) \mapsto (x, y) = (\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi) \in \mathbf{R}^2$$

переводит траектории поля  $\vec{v}^*$  ( $\vec{v}_m^*$ ) в траектории поля  $\vec{v}$  ( $\vec{v}_m$ ).

При условии (А) все особые точки векторного поля  $\vec{v}_m^*$  лежат на  $\Gamma_0$  и имеют вид  $(0, \varphi_i)$ , где  $\varphi_i$  – нули функции  $\Phi$ , а их характеристические показатели  $R(\varphi_i) \neq 0$  и  $\Phi'(\varphi_i) \neq 0$ . Эти точки являются особыми и для векторного поля  $\vec{v}^*$  с теми же характеристическими показателями. Так как  $\forall \varphi \in \mathbf{R}/2\pi\mathbf{Z} \quad \Phi^2(\varphi) + R^2(\varphi) > 0$ , то  $(R(\varphi) + R_1(\rho, \varphi))^2 + (\Phi(\varphi) + \Phi_1(\rho, \varphi))^2 > 0$  в точках некоторой окрестности  $\Gamma_0$ , и потому в этой окрестности у поля  $\vec{v}^*$  нет других особых точек. Согласно [7] векторные поля  $\vec{v}_m^*$  и  $\vec{v}^*$  топологически эквивалентны в окрестности  $\Gamma_0$ : существует гомеоморфизм  $h^*: U^* \rightarrow V^*$ , где  $U^*$  и  $V^*$  некоторые окрестности  $\Gamma_0$  в  $C$ , тождественный на  $\Gamma_0$  и переводящий траектории поля  $\vec{v}^*|_{U^*}$  в траектории поля  $\vec{v}_m^*|_{V^*}$ . Множества  $U := \text{pr}(U^*)$  и  $V := \text{pr}(V^*)$  – окрестности особой точки  $O$ . Равенства  $h(z) := \text{pr}(h^*(\text{pr}^{-1}(z)))$  для  $z \in U \setminus \{O\}$  и  $h(O) := O$  задают гомеоморфизм  $h: U \rightarrow V$ , переводящий траектории поля  $\vec{v}|_U$  в траектории поля  $\vec{v}_m|_V$ .

При условии (Б)  $\Gamma_0$  является замкнутой траекторией обоих векторных полей  $\vec{v}_m^*$  и  $\vec{v}^*$  с характеристическим показателем  $\chi \text{sgn} \Phi(0) \neq 0$  [8, с. 126]. Следовательно, векторные поля  $\vec{v}_m^*$  и  $\vec{v}^*$  топологически эквивалентны в некоторых окрестностях  $\Gamma_0$ . Но тогда  $\vec{v}_m$  и  $\vec{v}$  топологически эквивалентны в некоторых окрестностях точки  $O$ .

**Замечание 1.**  $m$ -струи в точке  $O$  векторных полей, удовлетворяющие хотя бы одному из условий (А) или (Б), образуют открытое и всюду плотное множество в множестве всех  $m$ -струй векторных полей с нулевой  $(m-1)$ -струей в точке  $O$  [4]. Поэтому можно сказать, что рассматриваемая особая точка типична для особых точек векторных полей с нулевой  $(m-1)$ -струей.

**Замечание 2.** Условие (Б) может выполняться только, если  $m$  нечетно [4].

**2. Топологическая классификация однородных полиномиальных векторных полей, удовлетворяющих условиям (А) и (Б).** В [6] дана топологическая классификация фазовых портретов однородных полиномиальных векторных полей, удовлетворяющих условиям (А) и (Б), на проективной плоскости. Конечно, топологическая эквивалентность фазовых портретов на проективной плоскости влечет их топологическую эквивалентность в  $\mathbf{R}^2$  и в окрестностях особой точки, но обратное утверждение, конечно, неверно.

Полным топологическим инвариантом особой точки полиномиального векторного поля является ее *локальная схема* [7, с. 351–356]. Опишем возможные локальные схемы особой точки  $O$  полей  $\vec{v}_m \in \mathbf{HP}_m$  при условиях (А) и (Б).

Так как  $\Phi(\varphi)$  – однородный тригонометрический многочлен степени  $m+1$  с простыми нулями, то число  $2n$  особых точек поля  $\vec{v}_m^*$  четно,  $n \leq m+1$ ,  $n = m+1 \pmod{2}$ . Пусть  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{2n}, \varphi_{2n+1} = \varphi_1 \in \mathbf{R}/2\pi\mathbf{Z}$  все нули функции  $\Phi$ , пронумерованные в циклическом порядке. Тогда условия  $\varphi = \varphi_i$ ,  $\rho > 0$  задают траекторию  $L_i^*$  (соотв.  $L_i$ ) поля  $\vec{v}_m^*$  (соотв.  $\vec{v}_m$ )  $\omega$ -предельную к особой точке  $O_i = (\varphi_i, 0)$  (соотв.  $O$ ) при  $R(\varphi_i) < 0$  и  $\alpha$ -предельную, если  $R(\varphi_i) > 0$ .

Если две последовательные точки  $O_k$  ( $k = i$  и  $k = i+1$ ) седла, то есть  $\Phi'(\varphi_k)R(\varphi_k) < 0$ , то  $L_i$  и  $L_{i+1}$  орбитно неустойчивые траектории поля  $\vec{v}_m$  – *сепаратрисы* особой точки  $O$ , ограничивающие *гиперболический сектор* точки  $O$ . Все траектории, принадлежащие этому сектору, выходят из любой окрестности особой точки при возрастании и убывании времени. Вследствие (1) число сепаратрис (если они имеются) четно, и если их пронумеровать в циклическом порядке:  $L_{i_1}, L_{i_2}, \dots, L_{i_s}, L_{i_{s+1}} = L_{i_1}$ , то  $\varphi_{i_k+s} = \varphi_{i_k} + \pi$  для  $k = 1, \dots, s$ .

Если две последовательные точки  $O_k$  ( $k = i$  и  $k = i+1$ ) узлы, то есть  $\Phi'(\varphi_k)R(\varphi_k) > 0$ , то  $L_i$  и  $L_{i+1}$  ограничивают *эллиптический сектор*, состоящий из траектории поля  $\vec{v}_m$ , двоякоасимптотических к  $O$ . Ввиду (1) число эллиптических секторов (если они имеются) четно, и для каждого эллиптического сектора есть эллиптический сектор, симметричный ему относительно  $O$ .

Если область  $\mathbf{R}^2$ , заданная условием  $\varphi_{i_k} < \varphi < \varphi_{i_{k+1}}$  ( $i_{k+1} \neq i_k + 1$ ), не содержит эллиптических секторов, то все траектории, ей принадлежащие, и ограничивающие ее сепаратрисы  $L_{i_k}$  и  $L_{i_{k+1}}$  либо  $\omega$ -предельны, либо  $\alpha$ -предельны к  $O$ . Эта область является, соответственно, либо устойчивым, либо неустойчивым *параболическим сектором* особой точки  $O$ .

Поставим в соответствие особой точке  $O$  циклическую последовательность

$$\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r, \sigma_{r+1} = \sigma_1, \quad (2)$$

где  $\sigma_i \in \{\alpha, \omega, e, sn, un\}$ , по следующему правилу:

1. Положим  $r = 1$ , а  $\sigma_1 = sn$  ( $\sigma_1 = un$ ) в случае (А), если точка  $O$  не имеет ни сепаратрис, ни эллиптических секторов, то есть является устойчивым (неустойчивым) топологическим узлом, и в случае (Б), если  $\chi \operatorname{sgn} \Phi(0) < 0$  ( $\chi \operatorname{sgn} \Phi(0) > 0$ ), то есть  $O$  является устойчивым (неустойчивым) фокусом, а потому и устойчивым (неустойчивым) топологическим узлом.

2. Если у точки  $O$  существуют сепаратрисы или эллиптические секторы, то произвольным образом пронумеруем их в циклическом порядке номерами от 1 до  $r$  и поставим в соответствие номеру  $k$  символ  $\alpha(\omega)$ , если такой номер имеет  $\alpha(\omega)$ -сепаратриса, и символ  $e$ , если такой номер имеет эллиптический сектор.

В случае 2) число членов  $r$  в последовательности (2) четно:  $r = 2p$ . Максимальное значение  $r$  достигается в случае, когда точка  $O$  не имеет параболических секторов, а гиперболических секторов, не имеющих друг с другом общих граничных лучей, максимальное число. Это значение  $r_M = 3n$ , если  $n$  четно и  $r_M = 3n - 1$ , если  $n$  нечетно.

Все последовательности, получающиеся из последовательности (2) циклической перестановкой, будем считать ей эквивалентными. Класс всех последовательностей, эквивалентных последовательности (2), называется *локальной схемой* особой точки  $O$ .

Из [7] следует

**Теорема 2.** Для векторных полей,  $\vec{v}_m^1$  и  $\vec{v}_m^2$ , принадлежащих  $\mathbb{H}\mathbb{P}_m$  и удовлетворяющих одному из условий (А) или (Б), существуют окрестности  $U_1$  и  $U_2$  точки  $O$  и сохраняющий ориентацию гомеоморфизм  $h: U_1 \rightarrow U_2$ , переводящий ориентированные траектории поля  $\vec{v}_m^1$  в ориентированные траектории поля  $\vec{v}_m^2$  тогда и только тогда, когда эти векторные поля имеют одинаковые локальные схемы точки  $O$ .

Из (1) получаем для последовательности (2), задающей локальную схему,

(У1) Если  $\sigma_i = e$  (соотв.  $\sigma_i = \alpha$  и  $\sigma_i = \omega$ ),  $i = 1, \dots, p$ , то  $\sigma_{i+p} = e$  (соотв.  $\sigma_{i+p} = \alpha$  и  $\sigma_{i+p} = \omega$  в случае нечетного  $t$ ,  $\sigma_{i+p} = \omega$  и  $\sigma_{i+p} = \alpha$  в случае четного  $t$ ).

Из определения сепаратрисы следует

(У2) Если  $\sigma_i = \alpha$  ( $\sigma_i = \omega$ ),  $i = 1, \dots, r$ , то или следующий элемент последовательности  $\sigma_{i+1}$  или предыдущий  $\sigma_{i-1}$  равен  $\omega$  ( $\alpha$ ). (Здесь  $\sigma_0 = \sigma_r$ ).

Из [6] следует, что для любой последовательности  $(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{2n})$ ,  $n \leq m+1$ ,  $n = m+1 \pmod{2}$ , где  $\tau_i \in \{-1, 1\}$ , удовлетворяющей условию  $\forall i \in \{1, \dots, n\} \tau_{i+n} = \tau_i$  при нечетных  $m$  и  $\tau_{i+n} = -\tau_i$  при четных  $m$ , за исключением последовательности с  $\tau_i = (-1)^i$  при  $n = m+1$ , существует векторное поле  $\vec{v}_m \in \mathbb{H}\mathbb{P}_m$ , для которого нули функции  $\Phi(\varphi)$  образуют циклическую последовательность  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{2n}$ ,  $\varphi_{2n+1} = \varphi_1 \in \mathbf{R}/2\pi\mathbf{Z}$  такую, что  $\operatorname{sgn} \Phi'(\varphi_i) = (-1)^i$ ,  $\operatorname{sgn} R(\varphi_i) = \tau_i$ . В [6] приведена явная конструкция такого поля. На языке локальных схем получаем следующее утверждение.

**Теорема 3.** Любая циклическая последовательность (2), где  $r = 1$ , а  $\sigma_1 = sn$  ( $\sigma_1 = un$ ) или  $r = 2p \leq r_m$  и выполняются условия (У1) и (У2), задает локальную схему точки  $O$  некоторого векторного поля  $\vec{v}_m \in \mathbb{H}\mathbb{P}_m$ , удовлетворяющего условию (А).

## Литература

1. Гробман, Д.М. О гомеоморфизме систем дифференциальных уравнений / Д.М. Гробман // ДАН СССР. – 1959. – Т. 128, № 5. – С. 880–881.
2. Hartman, F. A Lemma in the Theory of Structural Stability of Differential Equations / F. Hartman // Proc. Amer. Math. Soc. – 1960. – Vol. 11. – P. 610–620.
3. Палис, Ж.П. Геометрическая теория динамических систем. Введение / Ж.П. Палис, В. Ди Мелу. – М.: Мир, 1986. – 301 с.
4. Ройтенберг, В.Ш. О типичных однородных векторных полях на плоскости / В.Ш. Ройтенберг // Известия вузов. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2018. – № 2. – С. 15–26.
5. Ройтенберг, В.Ш. О бифуркациях однородных полиномиальных векторных полей на плоскости / В.Ш. Ройтенберг // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Сер. Математика. Физика. – 2019. – Т. 51, № 2. – С. 192–202.
6. Ройтенберг, В.Ш. О структуре множества грубых однородных полиномиальных векторных полей на плоскости / В.Ш. Ройтенберг // Прикладная математика & Физика. – 2020. – Т. 52, № 3. – С. 204–213.
7. Качественная теория динамических систем второго порядка / А.А. Андронов, Е.А. Леонтович, И.И. Гордон, А.Г. Майер. – М.: Наука, 1966. – 568 с.
8. Теория бифуркаций динамических систем на плоскости / А.А. Андронов, Е.А. Леонтович, И.И. Гордон, А.Г. Майер. – М.: Наука, 1967. – 487 с.

Поступила в редакцию 14 октября 2024 г.

## Сведения об авторе

Ройтенберг Владимир Шлеймович – доцент, кафедра высшей математики, Ярославский государственный технический университет, г. Ярославль, Российская Федерация, e-mail: vroitenberg@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1293-7998>.



**ON THE TOPOLOGICAL CLASSIFICATION OF GENERIC SINGULAR POINTS  
OF A PLANAR VECTOR FIELD WITH THE ZERO  $(M-1)$ -JET****V.Sh. Roitenberg**

Yaroslavl State Technical University, Yaroslavl, Russian Federation

E-mail: vroitenberg@mail.ru

Abstract. According to the Grobman-Hartman theorem, a dynamical system defined by a finite-dimensional vector field in the neighborhood of a singular point is topologically equivalent (and even topologically conjugate) to the dynamical system defined by the linearized vector field in the generic case when the eigenvalues of the matrix of the linear part of the field at the singular point have nonzero real parts. The topological classification of such singular points is simple: the number of eigenvalues with negative real part is a complete topological invariant. The paper proposes the following generalization of these results. It shows that for a planar vector field with a zero  $(m-1)$ -jet at a singular point, the  $m$ -jet ( $m > 1$ ) in the “generic case” determines the topological type of the singular point. It also presents a topological classification of such singular points.

*Keywords:* vector field on the plane; dynamical system; singular point; topological equivalence; topological classification.

**References**

1. Grobman D.M. O gomeomorfizme sistem differentsial'nykh uravneniy (On Homeomorphism of Systems of Differential Equations). *Dokl. AN SSSR (Rep. Acad. Sci. USSR)*, 1959, Vol. 128, no. 5, pp. 880–881. (in Russ.).
2. Hartman F. A Lemma in the Theory of Structural Stability of Differential Equations. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 1960, Vol. 11, pp. 610–620. DOI:10.1090/S0002-9939-1960-0121542-7
3. Palis J., Melo W. *Geometric Theory of Dynamical Systems. An Introduction*. New York, Heldenberg, Berlin: Springer-Verlag, 1982, 198 p. DOI: 10.1007/978-1-4612-5703-5
4. Roitenberg V.Sh. On Generic Homogenous Vector Fields on the Plane. *University proceedings. Volga region. Physical and Mathematical Sciences*, 2018, no. 2, pp. 15–26. (in Russ.). DOI: 10.21685/2072-3040-2018-2-2
5. Roitenberg V.Sh. On Bifurcations of Homogeneous Polynomial Vector Fields on the Plane. *Belgorod State University Scientific Bulletin. Mathematics. Physics*, 2019, vol. 51, no. 2. pp. 192–202. (in Russ.). DOI: 10.18413/2075-4639-2019-51-2-192-202
6. Roitenberg V. Sh. On the Structure of the Set of Homogeneous Polynomial Vector Fields on the Plane. *Applied Mathematics & Physics*, 2020, Vol. 52, Iss. 3, pp. 204–213. (in Russ.). DOI: 10.18413/2687-0959-2020-52-3-204-213
7. Andronov A.A., Leontovich E.A., Gordon I.I., Maier A.G. *Qualitative Theory of Second-Order Dynamic Systems*. Halsted Press [A division of John Wiley & Sons] and Israel Program for Scientific Translations, New York-Toronto, Ont. and Jerusalem-London, 1973, 524 p.
8. Andronov A.A., Leontovich E.A., Gordon I.I., Maier A.G. *Theory of Bifurcations of Dynamic Systems on a Plane*. New York, J. Wiley & Sons, 1973. [Andronov A.A., Leontovich E.A., Gordon I.I., Mayer A.G. *Teoriya bifurkatsiy dinamicheskikh sistem na ploskosti* (The Theory of Bifurcations of Dynamical Systems on the Plane). Moscow, Nauka Publ., 1967, 487 p. (in Russ.).]

**Information about the author**

Roitenberg Vladimir Shleymovich, Associate Professor, Department of Higher Mathematics, Yaroslavl State Technical University, Yaroslavl, Russian Federation, e-mail: vroitenberg@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1293-7998>.

## РАЦИОНАЛЬНОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ КОМПОЗИТНЫХ ТРУБЧАТЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ПРОТЕЗА НОГИ

**С.Б. Сапожников, М.В. Жихарев, В.В. Эрлих, П.А. Байгужин**

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

E-mail: sapozhnikovsb@susu.ru

**Аннотация.** Рассматривается тонкостенная трубчатая оболочка протеза ноги, изготовленная из композитного материала на основе однонаправленных, тканевых или хаотических структур армирования. Характер нагружения – сжатие с изгибом. Проведено аналитическое исследование устойчивости ортотропной оболочки при сжатии и численное исследование устойчивости при сжатии с изгибом с учётом закладных соединительных элементов. Дана также оценка прочности. Получено, что наиболее рациональной структурой армирования является тканевая. При практически реализуемых толщинах, размерах и нагрузках эксплуатации протезов потери устойчивости трубчатых элементов протезов не происходит.

*Ключевые слова:* полимерные композитные материалы; прочность; устойчивость; сжатие с изгибом; протез ноги.

### Введение

Полимерные композитные материалы (ПКМ) в настоящее время являются основными при проектировании протезов ног ввиду малой плотности, высокой жёсткости и прочности [1, 2]. Среди современных ПКМ в указанном смысле выделяются угле-, стекло- и органопластики [3], в которых волокна могут располагаться однонаправленно, в форме ткани с различным переплетением или с хаотическим расположением (рубленные нити или маты) [4]. Наибольшей удельной прочностью и жёсткостью обладают однонаправленные ПКМ при нагружении вдоль волокон, однако они имеют невысокую технологичность и при изготовлении трубчатых элементов протезов проигрывают полуфабрикатам с тканевым или хаотическим армированием. ПКМ на основе угле- или стекломатов имеют практически изотропные механические характеристики в плоскости укладки волокон, минимальную стоимость и высокую технологичность [5, 6].

В данной работе выполнен анализ работоспособности трубчатых элементов (с позиции потери устойчивости и прочности) протезов ноги из ПКМ на основе стали, алюминиевого сплава, однонаправленных, тканевых и хаотических структур армирования (стеклянные волокна в полиэфирной матрице) при заданных нагрузках. Найдены рациональные параметры таких элементов с учётом сопряжения с концевыми универсальными фитингами.

### Конструкция и материалы

Трубчатый элемент протеза ноги имеет сравнительно простую конструкцию (рис. 1), в которой средняя часть выполнена в виде тонкостенной оболочки, а на концах имеются фитинги для присоединения к коленному модулю и стопе [7, 8].



Рис. 1. Трубчатый элемент с фитингами



Рис. 2. Универсальный фитинг

Эти фитинги выполнены, как правило, из высококачественной стали со сферической контактной поверхностью и четырьмя крепежными винтами М8 (рис. 2) для фиксации на четырёхгранной призме соседних модулей.

Такие фитинги выполняют либо клеиваемыми внутрь трубы или снаружи (см. рис. 1, справа) или в виде клеммового соединения (см. рис. 1, слева) для обеспечения разъёмности и плавной корректировки длины трубы при настройке протеза.

Типовые наружные диаметры металлических труб для протезов составляют 30–35 мм при длине до 300 мм. Толщина металлических труб составляет неоптимальные величины на уровне 2–3 мм (определяется сортаментом), и они достаточно тяжелы. Ситуацию можно исправить за счёт нестандартных труб из ПКМ, изготавливаемых методами выкладки или намотки с учётом равнопрочности и равноустойчивости.

В табл. 1 приведены сравнительные характеристики стали 20, алюминиевого сплава АД31, однонаправленного (ОСП), тканевого (ТСП) и хаотически армированного (ХСП) стеклопластиков.

Таблица 1

Характеристики материалов

Параметр, ед. изм.	Материал				
	Сталь 20	АД31	ОСП	ТСП	ХСП
Плотность, г/см <sup>3</sup>	7,8	2,7	2	1,7	1,5
Модуль упругости $E_1$ , ГПа	200	70	40	25	15
Модуль упругости $E_2$ , ГПа			8	25	15
Модуль сдвига $G_{12}$ , ГПа	–	–	6	5	6
Коэффициент Пуассона, $\mu_2$	0,3	0,4	0,3	0,1	0,3
Предел текучести, МПа	400	200	1000*	400*	200*

Прим.: \* – предел прочности при сжатии

### Аналитические методы оценки устойчивости и прочности

Для тонкостенных сжимаемых ортотропных оболочек средней длины, у которых местная потеря устойчивости наступает раньше, чем общая, аналитическая оценка напряжений местной потери устойчивости [9] проводится по известным размерам (радиус  $R$ , толщина  $t$ ) и модулям упругости в главных направлениях (вдоль оси оболочки  $E_1$  и вдоль окружности  $E_2$ ):

$$\sigma_{cr} \approx \gamma \frac{t}{R\sqrt{3}} \sqrt{\frac{E_1 E_2}{1 - \mu_1 \mu_2}}. \quad (1)$$

Здесь  $\gamma$  – эмпирический поправочный коэффициент ( $\gamma \leq 1$ ), так как на практике потеря устойчивости происходит при меньших напряжениях, что связывают с наличием начальных несовершенств геометрии оболочек (вмятины, вариации толщины и упругих свойств по объёму материала и других неучтённых факторов). При этом для ортотропных материалов модуль сдвига  $G_{12}$  в формулу (1) в явном виде не входит (постулируется осесимметричная форма потери устойчивости).

В работе [10] приведены оригинальные аналитические исследования напряжений местной потери устойчивости ортотропных стеклопластиковых оболочек с явным учётом сдвиговых характеристик:

$$\sigma_{cr} = k \frac{t}{R} \sqrt{E_1 E_2}. \quad (2)$$

Важно отметить, что для изотропного материала оболочки с коэффициентом Пуассона 0,30 формула (2) даёт коэффициент  $k = 0,605$ , совпадая с (1). При изгибе потерю устойчивости в сжатой зоне в работе [11] рекомендуется оценивать по напряжениям, используя зависимости для равномерного сжатия типа (2).

По стандарту на испытания протезов ног [12] максимальное усилие сжатия  $P_{исп} = 4$  кН, плечо  $h = 50$  мм (сжатие с изгибом). При проектировании изделия вводится коэффициент запаса  $n = 1,5$ . Тогда расчётное усилие при проектировании будет

$$P = n \times P_{исп} = 1,5 \times 4 = 6 \text{ кН}. \quad (3)$$

Для тонкостенной оболочки (с учётом изгиба) максимальные сжимающие напряжения вычисляются по формуле

$$\sigma_{max} = \frac{P}{2\pi R t} \left( 1 + \frac{h}{R} \right). \quad (4)$$

## Механика

Примем радиус оболочки  $R = 15$  мм и определим для ПКМ из табл. 1 необходимую толщину  $t_{cr}$  из условия устойчивости,  $t_{pr}$  – из условия прочности, выберем ближайшее значение из сортамента [13, 14] и оценим массу пяти вариантов исполнения трубчатого стержня для протеза ноги (табл. 2).

Таблица 2

Результаты расчётов					
Материал	$t_{cr}$ , мм	$t_{pr}$ , мм	Толщины по сортаменту, мм	$t$ , мм	Масса, г
Сталь 20	0,185	0,460	0,3 0,4 0,5 0,6	0,5	110
АДЗ1	0,309	1,38	0,5 0,75 1 1,5 2	1,5	115
ОСП	0,675	0,276	0,4 0,8 1,2 1,6	0,8	45
ТСП	0,656	0,690	0,4 0,8 1,2 1,6	0,8	38
ХСП	0,680	1,380	0,5 1 1,5 2 2,5	1,5	64

На основании полученных результатов тканевый стеклопластик (ТСП) имеет преимущества перед другими рассмотренными материалами. Полученные рекомендации будут ниже проверены численно.

### Численные методы

Для анализа устойчивости использован пакет конечно-элементного анализа ANSYS [15] и модуль *eigenvalue buckling*, а для оценки напряженного состояния и прочности – модуль *static structural*. Зоны фитинга (см. рис. 1 и 3) моделировали оболочками из стали толщиной 2 мм и длиной 40 мм с заделкой, нагрузка приложена с эксцентриситетом  $h = 50$  мм, создавая сжатие с изгибом и возможной потерей устойчивости за счёт волнообразования на сжатой стороне (рис. 4). Свойства материалов и толщины  $t$  оболочек приведены в табл. 1 и 2, расчётная схема – на рис. 3.



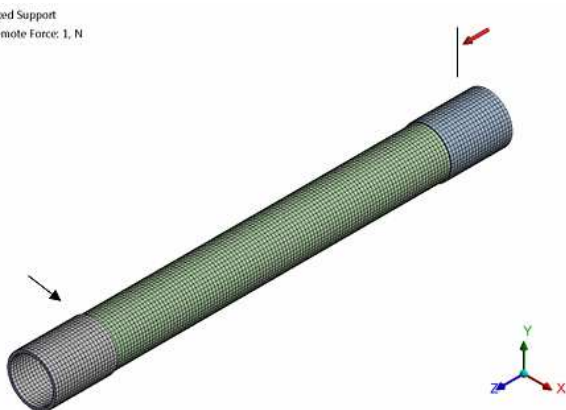


Рис. 3. Расчётная схема и сетка конечных элементов задачи

Здесь заделка (Fixed Support) показана слева стрелкой, а удалённая сила с эксцентриситетом  $h$  (Remote Force = 1 N) – справа. В расчётах использован оболочечный конечный элемент высокого порядка SHELL181.

В зоне контакта со стальным фитингом имеется краевой эффект с местным повышением напряжений (см. рис. 5).

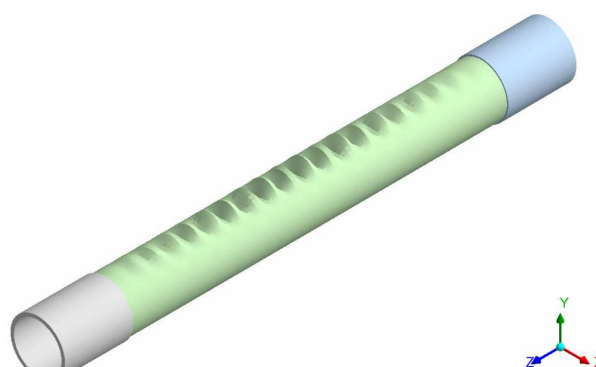


Рис. 4. Характерная односторонняя волнообразная форма потери устойчивости оболочки при сжатии с изгибом

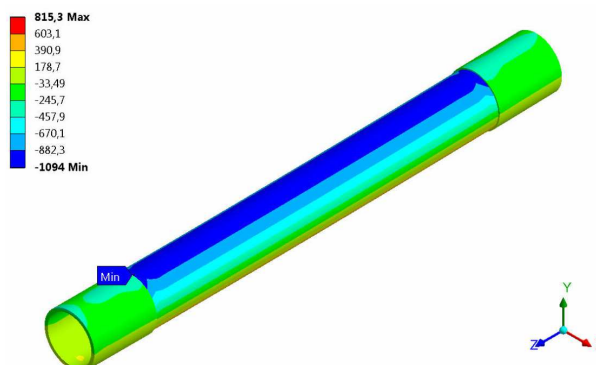


Рис. 5. Распределение напряжений в стальной оболочке при сжатии с изгибом

В табл. 3 приведены результаты численных расчётов нагрузок потери устойчивости  $P_{cr}$ , максимальные сжимающие напряжения у фитинга  $\sigma_{max}$ , при нагрузке  $P = 6$  кН, итоговая толщина оболочек (обеспечивающая прочность) и финальная масса оболочек.

Таблица 3

Результаты расчётов

Материал	Толщины по сортаменту, мм	$t$ , мм	Масса расчётная, г	$P_{cr}$ , кН	$\sigma_{max}$ , МПа	$t_{final}$ , мм	Масса финальная, г
Сталь 20	0,3 0,4 0,5 0,6 0,8 1,2 1,4 1,5 1,6	0,5	110	27,14	1094	1,4	308
АД31	0,5 0,75 1 1,5 2 2,5 3 3,5	1,5	115	31,60	363	3	330
ОСП	0,4 0,8 1,2 1,6	0,8	45	3,02	828	0,8	45
ТСП	0,4 0,8 1,2 1,6	0,8	38	3,67	750	1,6	76
ХСП	0,5 1 1,5 2 2,5 3 3,5	1,5	64	7,39	503	3	128

### Выводы

В данной работе проведены аналитические и численные расчёты нагрузок потери устойчивости и прочности при сжатии с изгибом трубчатых элементов (оболочек) протезов ног из пяти различных материалов.

Показано, что в аналитических расчётах не учитывается наличие концевых фитингов, ввиду чего расчётные толщины оболочек оказались заниженными в 2–3 раза.

Получено, что минимальной массой обладает оболочка, изготовленная из однонаправленного стеклопластика. Однако для практических приложений более рационально использовать тканевый стеклопластик, который более технологичен, допускает технологию намотки заданной толщины, например, тканевой стеклолентой. Расположение волокон вдоль оси оболочки (для получения однонаправленной структуры) сопровождается на практике отклонениями, снижающими эффективность.

Использование хаотически армированного стеклопластика (изотропного в своей плоскости) приводит к двукратному выигрышу в массе у алюминия или стали (см. табл. 3) и также может быть рекомендовано для изготовления бюджетных протезов.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования РФ FENU-2023-0017 (2023217Г3).

### Литература

1. Mallik, P.K. Fiber-Reinforced Composites: Materials, Manufacturing and Design / P.K. Mallik. – Boca Raton, CRC Press, 2007. – 638 p.
2. Ottobock DE. – URL: <http://www.ottobock.de> (дата обращения 10.10.2024).
3. Васильев, В.В. Механика конструкций из композиционных материалов / В.В. Васильев. – М.: Машиностроение, 1988. – 271 с.
4. Barbero, E.J. Introduction to composite materials design / E.J. Barbero. – Boca Raton: CRC Press, 2010. – 562 p.
5. Vaidya, U. Composites for Automotive, Truck and Mass Transit. Materials, Design, Manufacturing / U. Vaidya. – Lancaster, DEStech Publ., 2011. – 433 p.
6. Перепелкин, К.Е. Армирующие волокна и волокнистые полимерные композиты / К.Е. Перепелкин. – СПб: Научные основы и технологии, 2009. – 379 с.
7. Blatchford. – URL: <https://www.blatchfordmobility.com/en-us/> (дата обращения 10.10.2024).
8. Протезно-ортопедический центр. – URL: <http://протез74.рф/katalog-produkcii-metiz/stopy/> (дата обращения 10.10.2024).
9. Вольмир, А.С. Устойчивость упругих систем / А.С. Вольмир. – М.: Физматгиз, 1963. – 879 с.
10. Белозеров, Л.Г. Устойчивость стеклопластиковых оболочек при осевом сжатии / Л.Г. Белозеров, А.Л. Рубина // Ученые записки Центрального аэрогидродинамического института имени проф. Н.Е. Жуковского. – 1970. – Т. 1, № 1. – С. 124–133.
11. Лизин, В.Т. Проектирование тонкостенных конструкций / В.Т. Лизин, В.А. Пяткин. – М.: Машиностроение, 1994. – 380 с.

12. ГОСТ 10328-2007. Протезирование. Испытания конструкции протезов нижних конечностей. Требования и методы испытаний. – М.: Стандартиформ, 2009. – 122 с.
13. ГОСТ 8734-75. Трубы стальные бесшовные холоднодеформированные. Сортамент. – М.: Стандартиформ, 2007. – 12 с.
14. ГОСТ 18475-82. Трубы холоднодеформированные из алюминия и алюминиевых сплавов. Технические условия. – М.: Издательство стандартов, 1993. – 21 с.
15. ANSYS-Workbench User Manual, Vol. 14. Canonsburg: ANSYS SAS IP; 2012. – URL: [https://www.fluid.tuwien.ac.at/322057?action=AttachFile&do=get&target=flu\\_ug.pdf](https://www.fluid.tuwien.ac.at/322057?action=AttachFile&do=get&target=flu_ug.pdf) (дата обращения 10.10.2024).

*Поступила в редакцию 16 октября 2024 г.*

### Сведения об авторах

Сапожников Сергей Борисович – доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник кафедры технической механики, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Российская Федерация, e-mail: [sapozhnikovsb@susu.ru](mailto:sapozhnikovsb@susu.ru), ORCID iD: <http://orcid.org/0000-0002-7022-4865>.

Жихарев Михаил Владиленович – кандидат технических наук, заместитель директора центра прикладных исследований и разработки новых конструкционных материалов, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Российская Федерация, e-mail: [zhikharevmv@susu.ru](mailto:zhikharevmv@susu.ru), ORCID iD: <http://orcid.org/0000-0001-6908-5768>.

Эрлих Вадим Викторович – доктор биологических наук, доцент, директор Института спорта, туризма и сервиса, профессор кафедры теории и методики физической культуры и спорта, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Российская Федерация, e-mail: [erlichvadim@mail.ru](mailto:erlichvadim@mail.ru), ORCID iD: <http://orcid.org/0000-0003-4416-1925>.

Байгузин Павел Азифович – доктор биологических наук, ведущий научный сотрудник научно-исследовательского центра спортивной науки; Институт спорта, туризма и сервиса; Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Российская Федерация, e-mail: [baiguzhinpa@susu.ru](mailto:baiguzhinpa@susu.ru), ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-5092-0943>.

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2025, vol. 17, no. 1, pp. 26–31*

---

DOI: 10.14529/mmph250103

## RATIONAL DESIGN OF COMPOSITE MATERIALS TUBULAR ELEMENTS OF THE PROSTHETIC LEG

**S.B. Sapozhnikov, M.V. Zhikharev, V.V. Ehrlich, P.A. Baiguzhin**

*South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation*

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

**Abstract.** The paper considers a thin-walled tubular shell of a prosthetic leg made of a composite material based on single-directional, fabric or chaotic reinforcement structures. The character of loading is compression with bending. The paper presents an analytical study of the stability of the orthotropic shell under compression and a numerical study of the stability under compression with bending, taking into account embedded connecting elements. It also provides an assessment of the strength. It proves that the most rational reinforcement structure is a fabric one. With practically feasible thicknesses, sizes and loads of prosthesis operation, there is no loss of stability of the tubular elements of the prostheses.

**Keywords:** *polymer composite materials; strength, stability; compression with bending; prosthetic leg.*

**Acknowledgement.** *The work was carried out within the framework of the state task of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation FENU-2023-0017 (2023217GZ).*

### References

1. Mallik P.K. *Fiber-Reinforced Composites: Materials, Manufacturing and Design*. Boca Raton, CRC Press, 2007, 638 p. DOI: 10.1201/9781420005981
2. Ottobock DE. URL: <http://www.ottobock.de> (дата обращения 10.10.2024).
3. Vasiliev V.V. *Mekhanika konstruktivnykh iz kompozitsionnykh materialov* (Mechanics of structures made of composite materials). Moscow: Mashinostroenie Publ., 1988, 271 p. (in Russ.).
4. Barbero E.J. *Introduction to Composite Materials Design*. Boca Raton, CRC Press, 2010, 562 p. DOI: 10.1201/9781439894132
5. Vaidya U. *Composites for Automotive, Truck and Mass Transit. Materials, Design, Manufacturing*. Lancaster, DEStech Publ., 2011, 433 p.
6. Perepelkin K.E. *Armiruyushchie volokna i voloknistye polimernye kompozity* (Reinforcing Fibers and Fibrous Polymer Composites). Saint-Petersburg, Nauchnye osnovy i tekhnologii Publ., 2009. 379 p. (in Russ.).
7. Blatchford. URL: <https://www.blatchfordmobility.com/en-us/> (дата обращения 10.10.2024).
8. *Protežno-ortopedicheskii tsentr* (Prosthetic and orthopedic center). URL: <http://протез74.рф/katalog-produkcii-metiz/stopy/> (accessed 10.10.2024). (in Russ.).
9. Volmir A.S. *Ustoichivost' uprugikh sistem* (Stability of Elastic Systems). Moscow: Fizmatgiz Publ., 1963, 879 p. (in Russ.).
10. Belozеров L.G., Rubina A.L. *Ustoychivost' stekloplastikovykh obolochek pri osevom szhatii* (Stability of Fiberglass Shells under Axial Compression). *Uchenye zapiski Tsentral'nogo aerogidrodinamicheskogo instituta imeni prof. N.E. Zhukovskogo*, 1970, Vol. 1, Iss. 1, pp. 124–133. (in Russ.).
11. Lizin V.T., Pyatkin V.A. *Proektirovanie tonkostennykh konstruktivnykh* (Design of Thin-Walled Structures). Moscow, Mashinostroenie Publ., 1994, 380 p. (in Russ.).
12. GOST 10328-2007. *Protezirovaniye. Ispytaniya konstruktivnykh protezov nizhnikh konechnostei. Trebovaniya i metody ispytaniya* (State Standard 10328-2007. Prosthetics. Tests of the design of lower limb prostheses. Requirements and test methods). Moscow, Standartinform Publ., 2009, 122 p. (in Russ.).
13. GOST 8734-75. *Truby stal'nye besshovnye kholodnodeformirovannye. Sortament* (State Standard 8734-75. Seamless Cold-Formed Steel Pipes. Assortment). Moscow, Standartinform Publ., 2007. 12 p. (in Russ.).
14. GOST 18475-82. *Truby kholodnodeformirovannye iz alyuminiya i alyuminievyykh splavov. Tekhnicheskie usloviya* (State Standard 18475-82. Cold-Formed Pipes Made of Aluminum and Aluminum Alloys. Technical Conditions). Moscow, Izdatel'stvo standartov Publ., 1993. 21 p. (in Russ.).
15. *ANSYS-Workbench user manual*, Vol. 14. Canonsburg: ANSYS SAS IP; 2012. URL: [https://www.fluid.tuwien.ac.at/322057?action=AttachFile&do=get&target=flu\\_ug.pdf](https://www.fluid.tuwien.ac.at/322057?action=AttachFile&do=get&target=flu_ug.pdf) (accessed 10.10.2024).

Received October 16, 2024

### Information about the authors

Sapozhnikov Sergey Borisovich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Chief Researcher of the Department of Technical Mechanics, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: [sapozhnikovsb@susu.ru](mailto:sapozhnikovsb@susu.ru), ORCID iD: <http://orcid.org/0000-0002-7022-4865>.

Zhikharev Mikhail Vladilenovich is Cand. Sc. (Engineering), Deputy Director of the Center for Applied Research and Development of New Structural Materials, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: [zhikharevmv@susu.ru](mailto:zhikharevmv@susu.ru), ORCID iD: <http://orcid.org/0000-0001-6908-5768>.

Erlich Vadim Viktorovich is Dr. Sc. (Biological), Associate Professor, Director of the Institute of Sports, Tourism and Service, Professor of the Department of Theory and Methodology of Physical Culture and Sports, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: [erlih-vadim@mail.ru](mailto:erlih-vadim@mail.ru), ORCID iD: <http://orcid.org/0000-0003-4416-1925>.

Baiguzhin Pavel Asifovich is Dr. Sc. (Biological), Leading Researcher at the Sports Science Research Center; Institute of Sports, Tourism and Service; South Ural State University, e-mail: [baiguzhinpa@susu.ru](mailto:baiguzhinpa@susu.ru), Chelyabinsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-5092-0943>.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДВУХКОМПОНЕНТНОГО ПОТОКА «ЖИДКОСТЬ–ГАЗ» НА ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОРИОЛИСОВА РАСХОДОМЕРА

**П.А. Тараненко, А.А. Кривоногов, Д.В. Телегин**

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

*E-mail: taranenko@susu.ru*

**Аннотация.** В связи с разработкой методов определения объемно-массовых параметров «жидкость–газ», выполняемой командой ученых Южно-Уральского государственного университета, в публикации представлены результаты натурных испытаний и моделирования процесса работы кориолисового расходомера с потоком газожидкостной смеси. Основной целью исследования является установление причин снижения точности измерения прибора при увеличении газовой фазы в потоке текущей среды. Для этого выполнена серия проливочных испытаний на специализированном стенде с возможностью впрыска газовой фракции в поток жидкости. Вычислено объемное содержание газовой фракции в текущей среде. Построена имитационная модель измерительной трубки кориолисового расходомера и выполнен нестационарный расчет в механическом и гидродинамическом модуле с двусторонней передачей полей давлений и перемещений на каждом временном шаге. Газожидкостная смесь смоделирована с использованием модели VOF. По результатам моделирования установлено, что на снижение точности измерения массового расхода влияет физика процесса, происходящего в системе «расходомерная трубка – газожидкостный поток». Выполнен сравнительный анализ результатов расчетов и испытаний и показано их качественное совпадение. Установлено, что в случае двухфазного потока управляющая электроника и алгоритмы обработки сигнала не являются основным источником ошибки измерения.

*Ключевые слова:* кориолисов расходомер; двухфазный поток; массовый расход; объемная доля газа; интерфейс «жидкость – твердое тело».

### Введение

Кориолисовы расходомеры широко применяют в самых разных отраслях промышленности для измерения массового расхода текущей однородной и однофазной среды. Успехи в применении кориолисовых расходомеров для решения задач измерения массового расхода однофазных и однородных потоков стимулируют попытки применить их и для измерения объемно-массовых параметров многофазной среды. При этом исследователи отмечают увеличение ошибки измерения массового расхода с ростом объемной доли воздуха в текущей среде. В частности, при попадании воздуха в текущую среду нарушается равномерность распределения флюида по длине измерительной трубки, возрастает демпфирование, что может повлиять на динамические свойства кориолисового расходомера (амплитуды, фазы колебаний и разность фаз, по которой определяется массовый расход).

Многие исследователи пытаются создать способ коррекции ошибки измерения двухфазного потока. В работах [1, 2] подчеркнуто, что фазовый сдвиг, по которому определяется массовый расход, зависит не только от массового расхода жидкости, но и от демпфирования в колебательной системе. В работе [3] предлагается повысить точность измерения расхода текущих жидкостей с пузырьками с помощью измерения скорости звука в технологической жидкости. В работе [4] предлагается повысить точность измерения расхода текущих жидкостей с пузырьками за счет эмпирических зависимостей, связывающих параметры потока двухфазной среды (объемная доля газа в текущей среде, расход среды, давления на входе и на выходе) с величиной массового расхода жидкости, выдаваемой измерительным прибором. В работе [5] указано, что ошибку измерения можно уменьшить путем регулирования коэффициента усиления привода катушки возбуждения.



Однако работ, посвященных исследованию причины снижения точности кориолисова расходомера с применением численного моделирования, не так много. В частности, в работе [6] предложена численная модель прохождения одиночного пузырька газа по прямолинейной трубке, смоделированной балкой Тимошенко, способная качественно описать отклик кориолисова расходомера на присутствие газовых пузырей в потоке жидкости. Но для определения причины увеличения ошибки этого недостаточно.

Наиболее поздняя работа Е. Шавриной [7] посвящена исследованию влияния асимметрии газораспределения на погрешность измерения расхода двухфазного потока «жидкость–газ» кориолисовым расходомером. По результатам конечноэлементных расчетов предлагается коррекция показаний расходомера, учитывающая эффект асимметричного распределения газа по измерительной трубке кориолисового расходомера. В публикации предлагается использовать модель многофазного течения VOF и модель турбулентности рейнольдсовых напряжений RSM. Однако входная граница модели разделена на два сегмента для воды и воздуха. Таким образом, в трубке получается переходный процесс смешивания компонентов, а не развитый двухфазный поток. В другой работе Е. Шавриной [8] выполнен двусторонний анализ кориолисового расходомера – FSI. Но моделирование выполнено для однофазного потока жидкости при кинематическом возбуждении приводной катушки, что приводит к некорректной временной задержке и, соответственно, массовому расходу.

Несмотря на опубликованные в современных статьях результаты исследований, эффект увеличения погрешности измерения кориолисового расходомера, обусловленный попаданием воздуха в текущую жидкость, остается необъясненным.

Таким образом задача создания имитационной модели, учитывающей двухкомпонентный поток «жидкость – газ» и двустороннее взаимодействие «поток–конструкция», является актуальной.

### Экспериментальные исследования

Схема проливочного стенда приведена на рис. 1. Стенд состоит из насоса 1 с системой управления 2, бака с водой 3, эталонного кориолисового расходомера (КР) 4 и исследуемого КР 5. При включении насоса 1 происходит подача воды в систему. Текущая вода проходит через эталонный КР 4. Между эталонным и опытным расходомером установлен узел 7, через который с помощью компрессора в текущую жидкость осуществляется подача воздуха. Далее смесь воды и воздуха поступает в исследуемый расходомер 5. Давление на входе и на выходе в опытный расходомер регистрируется датчиками давления. После опытного расходомера смесь попадает в бак 3, в котором естественным путем происходит выведение воздуха из состава флюида и возвращение среды в ее изначальное состояние.

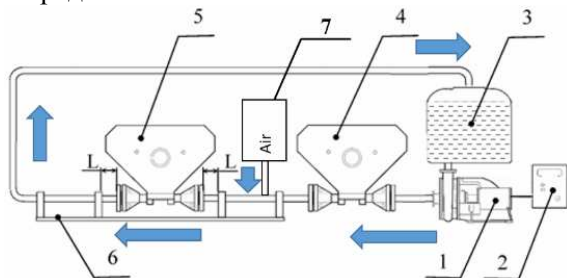
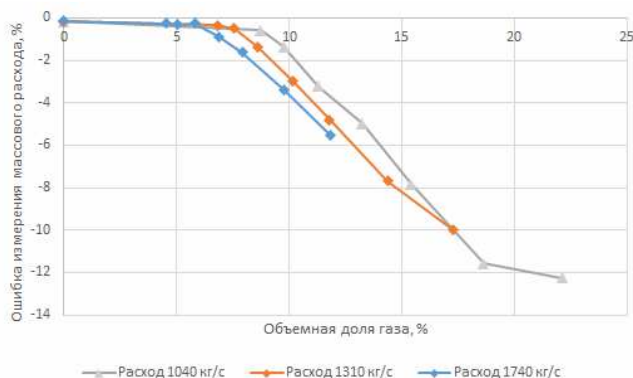


Рис. 1. Схема проливочного стенда: 1 – насос; 2 – система управления; 3 – бак с водой; 4 – эталонный КР; 5 – опытный КР; 6 – оснастка для закрепления исследуемого КР; 7 – устройство для впрыска воздуха в текущую среду

Целью экспериментов являлось сравнение показаний основных характеристик опытного и эталонного расходомера – исследование, необходимое для объяснения влияния газовой фазы на показания опытного расходомера.

Перед началом испытаний при фиксированном массовом расходе воды в 1 т/час (~0,3 кг/с) стенд работал в режиме холостого хода, т. е. перекачивал воду (без добавления воздуха) в течение 1,5 ч с целью стабилизации температуры в системе.

Эксперименты проведены при различном массовом расходе жидкости (1040 кг/ч, 1310 кг/ч, 1741 кг/ч), фиксировавшемся по эталонному расходомеру. Каждому расходу жидкости соответствовали 8 разных расходов воздуха. В эксперименте осуществляли запись напряжений с двух измерительных и центральной катушки эталонного и опытного расходомера, а также величин давления в газожидкостной смеси (ГЖС) на входе и выходе на опытном расходомере. Все данные регистрировались системой LMS Scadas Recorder. Длительность каждого эксперимента составляла 45 с.



**Рис. 2. Величина ошибки измерения массового расхода в зависимости от объемной доли газа**

расходомера, датчиков температуры в расходомерах, показаниям массового расхода эталонного расходомера и объемного расхода воздуха рассчитывали объемные доли воздуха в жидкости (GVF) и по выражению (1) определяли относительную погрешность измерения массового расхода жидкости:

$$Err_{MF} = \frac{MF_{on} - MF_{эм}}{MF_{эм}} \cdot 100 \% , \quad (1)$$

где  $MF_{on}$  – показания массового расхода на опытном расходомере;  $MF_{эм}$  – массовый расход воды на эталонном расходомере.

В эксперименте наблюдали ошибки измерения массового расхода и плотности на опытном кориолисовом расходомере. Ошибки измерения массового расхода в зависимости от объемной доли воздуха в текущей среде приведены на рис. 2.

Объемные доли воздуха в жидкости GVF (Gas Volume Fraction) рассчитывали по выражению

$$GVF = \frac{Qv_{air}}{Qv_{sum}} , \quad (2)$$

где  $Qv_{air} = \frac{MF_{air}}{\rho_{air}} \cdot \frac{T_1}{T_0} \cdot \frac{p_0}{p_1 + p_0}$  – объемный расход воздуха;  $Qv_{sum} = Qv_{fluid} + Qv_{air}$  – объемный расход

ГЖС;  $Qv_{fluid} = \frac{MF_{on}}{\rho_{fluid}}$  – объемный расход жидкости;  $p_1 = \frac{p_{in}^1 + p_{out}^1}{2}$  – избыточное давление в ра-

бочих условиях;  $p_{in}^1$  – избыточное давление в ГЖС на входе в расходомер;  $p_{out}^1$  – избыточное давление в ГЖС на выходе из расходомера;  $T_1 = 295,65$  К – температура в рабочих условиях;  $MF_{air}$ , кг/ч – массовый расход воздуха по показаниям массового расходомера;  $MF_{on}$ , кг/ч – массовый расход ГЖС на опытном расходомере;  $\rho_{fluid} = 998,2$  кг/м<sup>3</sup> – плотность воды при 20 °С;  $\rho_{air} = \rho_{air\_ideal} / Z = 1,20445$  кг/м<sup>3</sup> – плотность воздуха при стандартных условиях (20 °С, 1 атмосфера) по ГОСТ 30319.1-96;  $Z = 0,99963$  фактор сжимаемости воздуха;  $T_0 = 293,15$  К – температура, соответствующая стандартным условиям;  $p_0 = 101,325$  кПа – атмосферное давление.

## Численные исследования

Расчетная модель ориентирована на получение количественных оценок влияния потока текущей среды с заданным массовым расходом жидкости и объемной долей воздуха GVF на вынужденные колебания U-образной измерительной трубки кориолисового расходомера.

В рассматриваемом расчетном случае моделируется одна трубка, защемленная с обеих сторон по торцам (рис. 3). Учитывая очень слабое влияние скорости текущей среды на собственные частоты трубки в диапазоне рабочих расходов прибора и очень слабое изменение разности фаз в околорезонансной области, частоту вынуждающего воздействия принимали равной низшей собственной частоте трубки с неподвижной жидкостью при нулевом содержании воздуха.

Например, в статье [8] говорится, что разница между вынужденными и свободными колебаниями незначительна и поэтому в качестве вынуждающего воздействия используется кинематическое возбуждение сечения трубки, в котором расположена центральная катушка, и задаются его перемещения по синусоидальному закону с частотой, равной собственной частоте заполненной

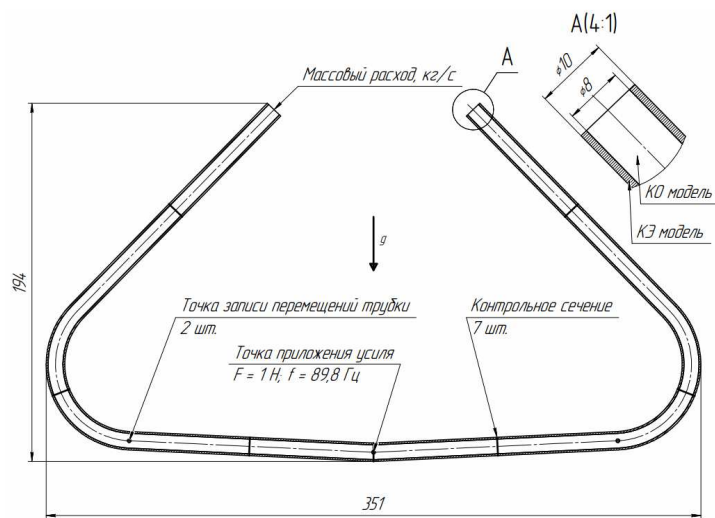


Рис. 3. Расчетная схема 2-way FSI модели

трубки с неподвижной средой. Однако в этом случае меняется форма установившихся вынужденных колебаний трубки, при этом форма вынужденных колебаний при таком возбуждении не совпадает с собственной формой вследствие ограничений, накладываемых на углы поворота трубки в сечении, соответствующем центральной катушке. Изменение формы вынужденных колебаний, в свою очередь, приводит к изменению временной задержки. Сопоставление расчетных и экспериментальных временных задержек показывает, что расчетные временные задержки, полученные при кинематическом возбуждении центрального сечения, не совпадают с экспериментальными, а расчетные временные задержки, полученные при силовом возбуждении, хорошо совпадают с показаниями опытного расходомера. Поэтому в рассматриваемой модели используется подход, при котором колебания измерительной трубки возбуждаются сосредоточенной силой, направленной перпендикулярно плоскости трубки.

Расчет колебательного режима трубки с протекающей по ней жидкостью выполняется как расчет переходного процесса, когда параметры состояния в каждой последующей временной точке используют предварительно найденные (заданные) параметры состояния в предыдущей временной точке. Расчет предусматривает выполнение итерационного анализа поведения жидкости и пошаговое выполнение расчетов во временных точках, соответствующих переходному процессу нарастающих колебаний (вызываемых действием сосредоточенной гармонической вынуждающей силы).

Расчет системы с текущей жидкостью выполняется с использованием двух разных решателей: модуля Transient Structural analysis для расчета трубки и модуля Fluent для расчета потока газожидкостной смеси. Взаимодействие модулей Transient Structural и Fluent реализуется по технологии Two-way FSI и управляется через модуль System Coupling.

Контрольно-объемная модель (КО модель) течения газожидкостной смеси создана в программном пакете ANSYS Fluent. Стратегия численного моделирования двухфазных потоков «газ–жидкость» в трубах выбрана на основе мирового опыта исследователей, изложенного в [9]. Для изучения процесса смешения компонент смеси вода/воздух решено использовать модель Volume of Fluid (VOF). Одно из её достоинств, отмеченное в статье [9], заключается в возможности получения различных режимов потоков.

Модели материалов воды (water-liquid) и воздуха (air) заимствованы из базы данных Fluent. В качестве первичной фазы выбран сжимаемый воздух, вторичной – вода. Поверхностное натяжение (surface tension) установлено постоянным и равным 0,072 Н/м. Реализована острая (sharp) граница раздела фаз. В численной реализации выбор остановлен на модели турбулентности SST.

В качестве входных граничных условий (inlet-water, inlet-gas) заданы массовые расходы воды и воздуха. На выходном отверстии в качестве граничного условия (pressure-outlet) задано избыточное давление, равное 0 МПа. Учтено влияние гравитации в уравнении импульсов, стенки опделены как гидравлически гладкие.

С целью анализа распределения воздуха по длине трубки в процессе прохождения среды построено 7 поперечных сечений (см. рис. 3). В каждом сечении записываются значения массового

расхода смеси, воды и воздуха, а также GVF.

Модель стальной трубки – конечно-элементная модель (КЭ модель) создана в модуле ANSYS Transient, торцы трубки жестко закреплены, а в центральной точке трубки приложено гармоническое силовое воздействие (3) в перпендикулярном плоскости трубки направлении:

$$F(t) = F_0 \sin(2\pi \cdot f \cdot t), \quad (3)$$

где  $t$  – время, с,  $f$  – резонансная частота системы с неподвижной средой (Гц),  $F_0$  – амплитуда силового возбуждения.

По результатам моделирования в контрольных точках № 1 и № 2 (см. рис. 3) строятся графики перемещений точек двух сечений по времени. После этого вычисляется временная задержка по фазовому сдвигу между точками при переходе через нулевое значение.

Время моделирования составляет 0,4 с. Предварительный этап от 0 до 0,2 с заложен для стабилизации временной задержки. Выполнено две серии расчетов с различными значениями объемной доли газа и двумя значениями шага по времени  $1 \cdot 10^{-4}$  с и  $5 \cdot 10^{-5}$  с. Соответствующие виброграммы приведены на рис. 4. Как видно из графиков, при меньшем шаге система дольше выходит на установившийся режим и имеет более высокие амплитуды. Однако по результатам расчетов установлено, что временная задержка стабилизируется раньше, чем осуществляется выход на установившийся режим по амплитудам колебаний.

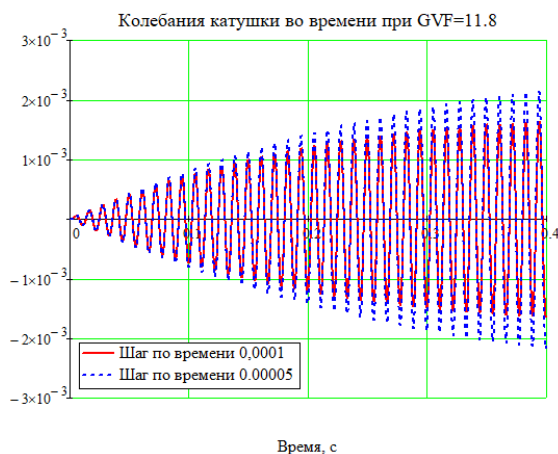


Рис. 4. Виброграммы измерительной катушки для двух шагов по времени

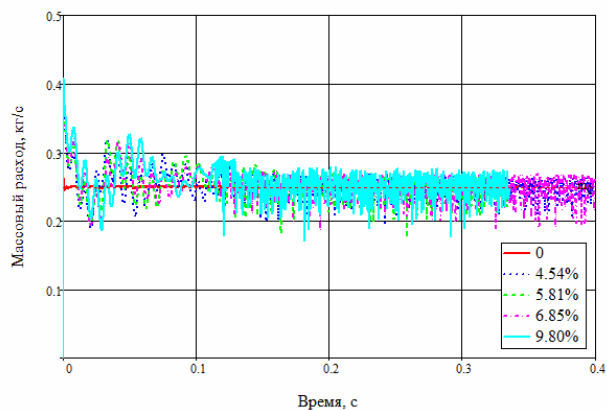


Рис. 5. Массовые расходы жидкости в седьмом сечении в зависимости от объемной доли воздуха

С целью подтверждения закона сохранения массы, переносимой по измерительной трубке, вычислены значения массового расхода по времени через каждое из семи сечений. Так, изменение массового расхода во времени через седьмое сечение в зависимости от объемной доли воздуха в текущей среде приведено на рис. 5. При осреднении по промежутку времени значения массового расхода независимо от объемной доли воздуха в текущей среде оказались равными заданному расходу. Таким образом на имитационной модели расходомера подтверждено выполнение закона сохранения массы: масса жидкости, протекающая через каждое из семи выбранных сечений, не изменяется. При этом прямо пропорциональная массовому расходу временная задержка, которая определяется по фазам механических колебаний измерительной трубки, при наличии пузырьков воздуха в текущей среде не совпадает с временной задержкой, полученной в случае течения однородной и однофазной жидкости (рис. 6). Из анализа результатов, приведенных на рис. 6, следует, что результаты FSI расчета зависят от шага по времени, однако качественно совпадают с результатами эксперимента. И при шаге по времени  $1 \cdot 10^{-4}$  с, и при  $5 \cdot 10^{-5}$  с наблюдается качественное совпадение расчетных временных задержек с экспериментальными – снижение временной задержки с ростом объемной доли воздуха в текущей среде. При этом необходимо отметить, что расчетная модель не содержит моделей системы управления и обработки сигналов, в ней, в частности, исключены функции поддержания резонансных колебаний и фильтрации сигналов с измерительных катушек. Таким образом, по результатам расчетов и испытаний установлено, что основным источником ошибки измерения массового расхода является взаимодействие текущей двухфазной среды с деформируемой измерительной трубкой кориолисового расходомера.

ра, приводящее к изменению кориолисовых сил, действующих со стороны текущей среды на измерительную трубку, и, как следствие, фаз механических колебаний узлов, соответствующих левой и правой измерительным катушкам расходомера.

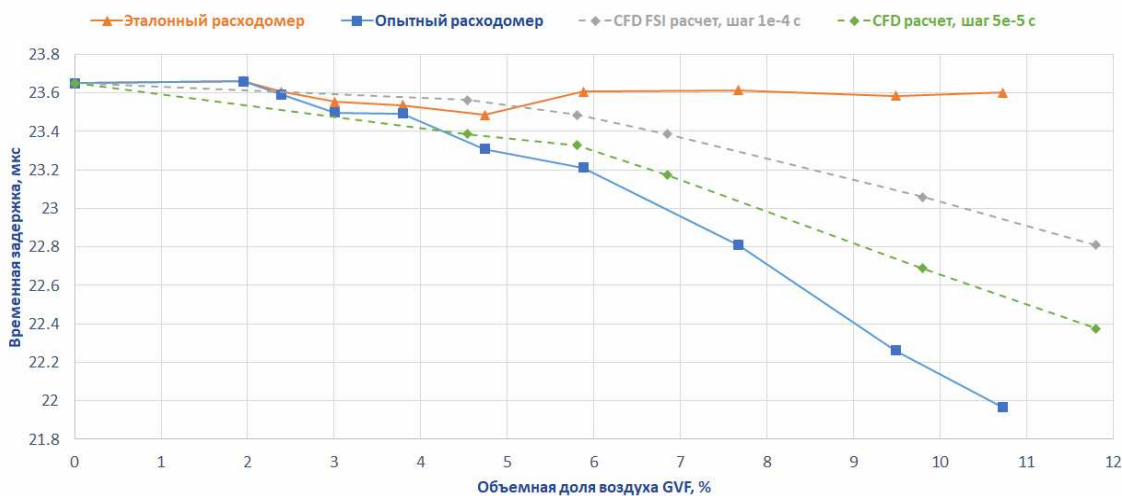


Рис. 6. Сравнение расчетных и экспериментальных временных задержек

### Заключение

Проведена серия экспериментальных исследований кориолисова расходомера в условиях течения двухфазной среды «жидкость–газ». В результате испытаний с ростом объемной доли воздуха в текущей среде наблюдали снижение показаний массового расходомера на опытном расходомере при неизменных показаниях на эталонном.

Разработана численная упруго-гидродинамическая модель течения двухфазной среды «жидкость–газ» по деформируемой измерительной трубке кориолисова расходомера, и выполнена серия расчетов при фиксированном расходе жидкости и различном объемном содержании воздуха в текущей среде. По результатам FSI расчетов установлено, что колебания расхода жидкости (и смеси) в выбранных произвольно семи сечениях трубки не зависят от объемной доли воздуха.

По результатам численного моделирования установлено, что при увеличении объемной доли воздуха в текущей двухфазной среде «вода–воздух» и постоянном расходе жидкости растет ошибка измерения в сторону уменьшения показаний расхода. Получено качественное совпадение результатов численного моделирования и эксперимента. По результатам численного моделирования исключено влияние алгоритмов управления и обработки сигналов на определение временной задержки.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-10151, <https://rscf.ru/project/23-29-10151/>.

### Литература

1. Basse, N. Coriolis Flowmeter Damping for Two-Phase Flow due to Decoupling / N. Basse // Flow Measurement and Instrumentation. – 2016. – Vol. 52. – P. 40–52.
2. Two-Phase Damping for Internal Flow: Physical Mechanism and Effect of Excitation Parameters / C. Charreton, C. Béguin, A. Ross *et al.* // Journal of Fluids and Structures. – 2015. – Vol. 56. – P. 56–74.
3. Gysling, D.L. Accurate Mass Flow and Density of Bubbly Liquids using Speed of Sound Augmented Coriolis Technology / D.L. Gysling // Flow Measurement and Instrumentation. – 2023. – Vol. 91. – 102358.
4. Predicting the Output Error of a Coriolis Flowmeter under Gas-Liquid Two-Phase Conditions through Analytical Modelling / J.Liu, T.Wang, Y.Yan, X.Wang // Proceedings of the 18th International Flow Measurement Conference, Lisbon, Portugal. – 2019. – P. 26–28.
5. How a Coriolis Mass Flow Meter can Operate in Two Phase (Gas/Liquid) Flow // M.P. Henry, M. Duta, M.S. Tombs *et al.* // <https://www.researchgate.net/publication/236986368> (accessed January 14, 2022).
6. Лех, И.А. Влияние пузырьков газа на вибрационные параметры измерительных трубок кориолисова расходомера / И.А. Лех, П.А. Тараненко, В.П. Бескачко // Вестник Южно-

Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2019. – Т. 10, № 3. – С. 47–55.

7. The Investigation of Gas Distribution Asymmetry Effect on Coriolis Flowmeter Accuracy at Multiphase Metering / E. Shavrina, Y. Zeng, B.C. Khoo, V.T. Nguyen // *Sensors*. – 2022. – Vol. 22, no. 20. – P. 7739.

8. Fluid-Solid Interaction Simulation Methodology for Coriolis Flowmeter Operation Analysis / E. Shavrina, V.-T. Nguyen, Z. Yan, B.C. Khoo // *Sensors*. – 2021. – Vol. 21. – 8105.

9. Ban, S. Numerical Simulation of Two-Phase Flow Regime in Horizontal Pipeline and Its Validation / S. Ban, W. Pao, M.S. Nasif // *International J of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*. – 2018. – Vol. 26, Iss. 6. – P. 1279–1314.

*Поступила в редакцию 3 декабря 2024 г.*

### Сведения об авторах

Тараненко Павел Александрович – кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой «Техническая механика», директор центра виброиспытаний и мониторинга состояния конструкций, Южно-Уральский государственный университет, Российская Федерация, e-mail: taranenkor@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-3787-5260>.

Кривоногов Алексей Александрович – кандидат технических наук, доцент, старший научный сотрудник, Передовая инженерная школа двигателестроения и специальной техники «Сердце Урала», Южно-Уральский государственный университет, Российская Федерация, e-mail: krivonogovaa@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-7042-1319>.

Телегин Дмитрий Владимирович – инженер центра виброиспытаний и мониторинга состояния конструкций, Южно-Уральский государственный университет, Российская Федерация, e-mail: telegindv@susu.ru.

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2025, vol. 17, no. 1, pp. 32–39*

---

DOI: 10.14529/mmph250104

## INVESTIGATION OF TWO-COMPONENT FLOW “LIQUID–GAS” INFLUENCE ON A CORIOLIS FLOWMETER DYNAMIC PARAMETERS

**P.A. Taranenko, A.A. Krivonogov, D.V. Telegin**  
*South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation*  
*E-mail: taranenkor@susu.ru*

**Abstract.** In connection with the development of methods for determining the volume-mass parameters of “liquid–gas” performed by a team of scientists from the South Ural State University, the paper presents the results of full-scale tests and modeling of the operation of a Coriolis flowmeter with a gas-liquid mixture flow. The study aims to establish the causes of reduction of measurement accuracy by the device with an increase in the gas phase in the fluid flow. For this purpose, a series of pouring tests were performed on a specialized stand with the possibility of injecting a gas fraction into the liquid flow. The gas volume fraction in the fluid was calculated. A simulation model of the measuring tube of the Coriolis flowmeter was built and a non-stationary calculation was performed in the mechanical and hydrodynamic module with two-way transmission of pressure and displacement fields at each time step. The gas-liquid mixture was modeled using the VOF model. Based on the simulation results, it was found that the reduction in mass flow measurement accuracy is affected by the physics of the process occurring in the “flow tube – gas-liquid flow” system. A comparative analysis of the calculation and test results was performed, and their qualitative coincidence was shown. It was found that in the case of a two-phase flow, the control electronics and signal processing algorithms are not the main source of measurement error.

**Keywords:** *Coriolis flowmeter; two-phase flow; mass flow; gas volume fraction; fluid-structure interaction.*

### References

1. Basse N. Coriolis Flowmeter Damping for Two-Phase Flow due to Decoupling. *Flow Measurement and Instrumentation*, 2016, Vol. 52, pp. 40–52. DOI: 10.1016/j.flowmeasinst.2016.09.005
2. Charreton C., Béguin C., Ross A., Étienne S., Pettigrew M.J. Two-Phase Damping for Internal Flow: Physical Mechanism and Effect of Excitation Parameters. *Journal of Fluids and Structures*, 2015, Vol. 56, pp. 56–74.
3. Gysling D.L. Accurate Mass Flow and Density of Bubbly Liquids using Speed of Sound Augmented CORIOLIS Technology. *Flow Measurement and Instrumentation*, 2023, Vol. 91, 102358. DOI: 10.1016/j.flowmeasinst.2023.102358
4. Liu J., Wang T., Yan Y., Wang X. Predicting the Output Error of a Coriolis Flowmeter under Gas-Liquid Two-Phase Conditions through Analytical Modelling. *Proc. 18th International Flow Measurement Conference*, Lisbon, Portugal, 2019, pp. 26–28.
5. Henry M.P., Duta M., Tombs M.S., Yeung H., Mattar W. *How a Coriolis Mass Flow Meter can Operate in Two Phase (Gas/Liquid) Flow*. <https://www.researchgate.net/publication/236986368> (accessed January 14, 2022).
6. Lekh I.A., Taranenko P.A., Beskachko V.P. The Influence of Gas Bubbles on the Vibration Parameters of Measuring Tubes of a Coriolis Flowmeter. *Bulletin of the South Ural State University Series “Mathematics. Mechanics. Physics”*, 2019, Vol. 10, no. 3, pp. 47–55. DOI: 10.14529/mmph190306
7. Shavrina E., Zeng Y., Khoo B.C., Nguyen V.T. The Investigation of Gas Distribution Asymmetry Effect on Coriolis Flowmeter Accuracy at Multiphase Metering. *Sensors*, 2022, Vol. 22, no. 20, p. 7739. DOI: 10.3390/s22207739
8. Shavrina E., Nguyen V.-T., Yan, Z., Khoo B.C. Fluid-Solid Interaction Simulation Methodology for Coriolis Flowmeter Operation Analysis. *Sensors*, 2021, Vol. 21, 8105. DOI: 10.3390/s21238105
9. Ban S., Pao W., Nasif M.S. Numerical Simulation of Two-Phase Flow Regime in Horizontal Pipeline and its Validation. *International J. of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 2018, Vol. 26, Iss. 6, pp. 1279–1314.

Received December 3, 2024

### Information about the authors

Taranenko Pavel Alexandrovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, Head of the Department of Technical Mechanics, Director of the Center for Vibration Testing and Structural Condition Monitoring, South Ural State University, e-mail: taranenkopa@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-3787-5260>.

Krivoногоv Alexey Aleksandrovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, Senior Staff Scientist, Advanced Engineering School of Engine Building and Special Equipment “Heart of the Urals”, South Ural State University, e-mail: krivonogovaa@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-7042-1319>.

Telegin Dmitry Vladimirovich is Engineer at the Center for Vibration Testing and Structural Condition Monitoring, South Ural State University, e-mail: telegindv@susu.ru.

## STRUCTURE AND ELECTRONIC PROPERTIES OF FLUOROGRAPHENE AND FLUOROGRAPHITE CRYSTALS

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

*Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
e-mail: me.belenkov@gmail.com*

**Abstract.** The paper presents the study of the structure and electronic properties of two-dimensional and three-dimensional crystals composed of monolayers of graphene polymorphs  $L_6$ ,  $L_{4-8}$ ,  $L_{3-12}$ ,  $L_{4-6-12}$ ,  $L_{5-7}$  functionalized by fluorine atoms with various types of attachment of fluorine atoms. It reveals that the interlayer distances in the studied crystals vary within a wide range from 4,73 to 5,96 Å and volumetric densities vary from 2,43 to 3,98 g/cm<sup>3</sup>. The value of the band gap in three-dimensional fluorographite crystals is on average 0,4 eV less than the band gap in the corresponding two-dimensional fluorographenes. The studied three-dimensional structures demonstrated a pattern: with an increase in the interlayer distance, the energy of the interlayer interaction decreases, and the volumetric density increases. The band gap of the fluorographenes and fluorographites decreases with an increase of sublimation energy. The paper establishes a correlation between the degree of C-C bond length variation of and the presence or absence of repulsive flagpole forces between the attached fluorine atoms. It proves that during functionalization, the values of the average C-C bond length increase for monolayers  $L_6$ ,  $L_{4-8}$ ,  $L_{3-12}$ ,  $L_{4-6-12}$  and  $L_{5-7}$ . The values of the average lengths of C-C bonds practically do not change during the formation of fluorographite from fluorographene. The variation of C-C bond lengths in fluorographites is minimal for F- $L_6$  T1 and equal to 0,2 %, while the maximum is observed for F- $L_{4-6-12}$  T1, which is 10,7 %.

*Keywords:* functionalization; fluorographite; fluorographene; polymorphism; attachment type; band gap.

### Introduction

Graphite, which is a three-dimensional (3D) crystal, consists of monolayers of two-dimensional (2D) graphene bounded to each other by van der Waals forces [1]. A 3D crystal can also be constructed from monolayers of functionalized 2D graphene. Obviously, the properties of such a three-dimensional crystal will differ from the properties of 2D monolayer functionalized graphene, just as the properties of graphite differ from the properties of graphene [2–4].

In [5–12], calculations of the structure and electronic properties of fluorine-functionalized 2D and 3D crystals formed on the basis of various types of fluorographene polymorphs  $L_6$ ,  $L_{3-12}$ ,  $L_{4-6-12}$ ,  $L_{5-7}$  and  $L_{4-8}$  were carried out. In order to identify new patterns, this work carries out a comparative analysis and generalization of the results obtained in these works.

### Calculations and methods

In this work, computer modeling of the structure and electronic properties of two-dimensional 2D fluorographene crystals and three-dimensional 3D fluorographite crystals was carried out. Fluorographene layers were obtained by fluoridation of graphene polymorphs  $L_6$ ,  $L_{3-12}$ ,  $L_{4-6-12}$ ,  $L_{5-7}$  и  $L_{4-8}$ . Calculations of the structural and energy characteristics of 2D fluorographene crystals were carried out using the DFT-GGA method using the open source software package Quantum Espresso [13].

As a result of calculations, it turned out that out of a possible 17 layers of fluorographene, 15 monolayers of fluorographene F- $L_6$ , F- $L_{3-12}$ , F- $L_{4-6-12}$ , F- $L_{5-7}$  and F- $L_{4-8}$ , shown in fig. 1, are stable. Stable layers were composed of 3D fluorographite crystals. The atom-atom potential method was used to calculate the three-dimensional structures of fluorographite. These structures were further used as the basis for calculations of the energy characteristics of the resulting fluorographites using the DFT-GGA method [13].



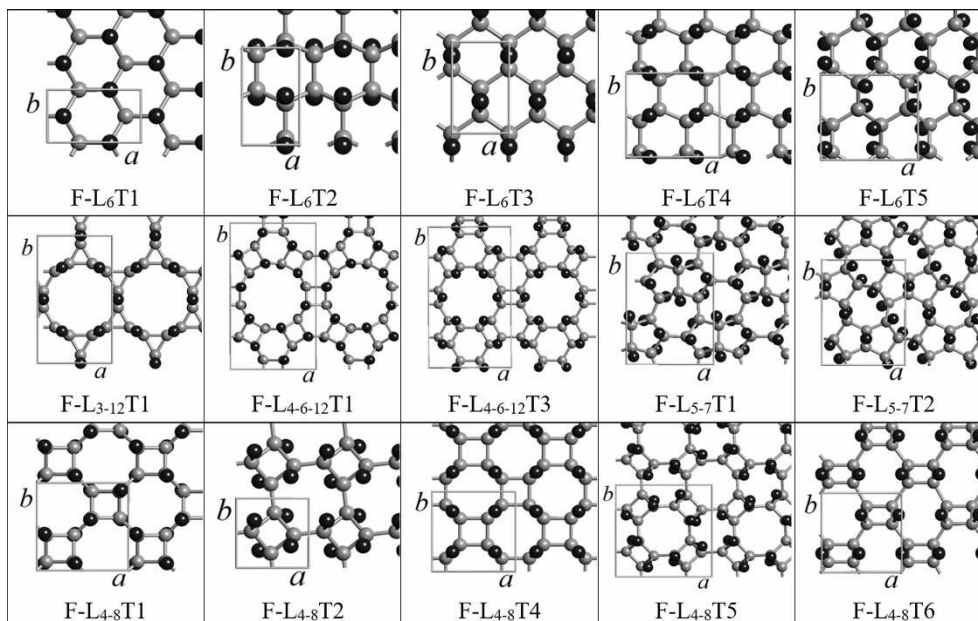


Fig. 1. Fluorographene monolayers used for building 3D-fluorographite crystals: F-L6, F-L3-12, F-L4-6-12, F-L5-7 и F-L4-8

### Results and discussions

Table 1 shows the structural parameters:  $d_L$  – interlayer distance,  $S$  – length of the shear vector and  $\rho$  – bulk density; and energy characteristics of the resulting 2D fluorographene crystals and 3D fluorographite crystals:  $E_{vdW}$  – energy of van der Waals bonds between layers;  $E_{sub2D}$  and  $E_{sub3D}$  are the sublimation energy of fluorographenes and fluorographites, respectively;  $E_{g2D}$  and  $E_{g3D}$  are the band gaps of fluorographenes and fluorographites, respectively.

Table 1

Crystal	$S$ , Å	$d_L$ , Å	$\rho$ , g/cm <sup>3</sup>	$E_{vdW} \cdot 10^2$ , eV	$E_{sub2D}$ , eV	$E_{sub3D}$ , eV	$E_{g2D}$ , eV	$E_{g3D}$ , eV
F-L <sub>6</sub> T1	0,00	5,39	3,26	3,04	14,32	14,37	3,321	2,727
F-L <sub>6</sub> T2	1,09	4,73	3,98	4,81	14,19	13,94	3,390	3,114
F-L <sub>6</sub> T3	1,52	5,75	3,26	2,93	14,31	14,33	3,557	3,108
F-L <sub>6</sub> T4	1,68	5,60	3,30	3,19	14,08	14,19	4,195	3,666
F-L <sub>6</sub> T5	1,06	5,46	3,23	3,02	14,20	14,22	3,044	2,505
F-L <sub>3-12</sub> T1	1,47	5,76	2,43	1,85	13,77	13,83	3,43	3,032
F-L <sub>4-6-12</sub> T1	0,05	5,49	2,59	2,38	13,84	13,89	3,193	2,827
F-L <sub>4-6-12</sub> T3	3,46	5,77	2,64	2,37	13,80	13,83	4,150	3,682
F-L <sub>5-7</sub> T1	3,71	5,50	3,21	2,90	13,85	13,90	4,09	3,663
F-L <sub>5-7</sub> T2	3,36	5,57	3,39	3,13	14,17	14,24	3,32	3,126
F-L <sub>4-8</sub> T1	2,78	5,46	2,91	2,65	13,98	14,04	3,211	2,781
F-L <sub>4-8</sub> T2	0,00	5,18	2,97	3,08	13,36	13,44	4,958	4,599
F-L <sub>4-8</sub> T4	1,74	5,55	3,12	3,11	14,05	14,12	3,946	3,413
F-L <sub>4-8</sub> T5	3,14	5,96	2,75	2,23	13,56	13,60	4,686	4,322
F-L <sub>4-8</sub> T6	1,74	5,57	3,09	3,13	14,01	14,08	4,877	4,257

The average interlayer distance by types  $d_L = 5,4$  Å in fluorographites F-L<sub>6</sub>T1 – F-L<sub>6</sub>T5, as it turned out, practically coincides with the distance  $d_L = 5,3$  Å obtained in an experiment of X-ray diffraction analysis [14] on a fluorographite sample, synthesized in the Institute of Inorganic Chemistry of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences in Novosibirsk according to the method described in [15]. From table 1 it can be seen that the difference between the minimum  $d_L = 4,73$  Å in F-L<sub>6</sub>T2 and the maximum  $d_L = 5,96$  Å in F-L<sub>4-8</sub>T5 values of the interlayer distance is quite significant – 1,23 Å (40 %).

The difference between the minimum and maximum values of bulk density is also quite significant: 1,55 g/cm<sup>3</sup> (50 %). From fig. 2 it can be seen that there is a one-to-one correspondence between the interlayer distance  $d_L$  and the bulk density  $\rho$  – the larger  $d_L$ , the smaller  $\rho$ .

The interlayer bond energy  $E_{vdW}$  is maximum in fluorographite F-L<sub>6</sub>T2 ( $E_{vdW} = 4,81 \cdot 10^{-2}$  eV) and is more than 2,6 times higher than the minimum value  $E_{vdW}$  in fluorographite F-L<sub>3-12</sub>T1 ( $E_{vdW} = 1,85 \cdot 10^{-2}$  eV).

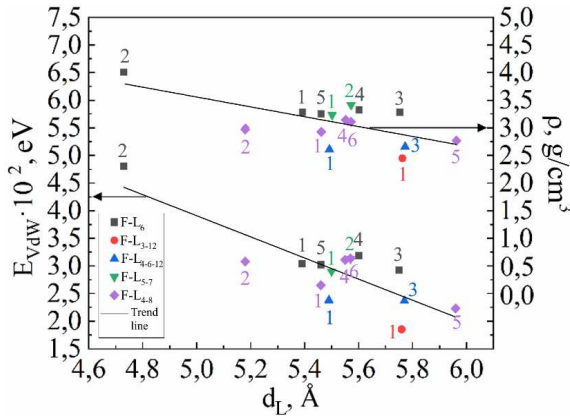


Fig. 2. The graph of interlayer distance  $d_L$  versus bulk density  $\rho$  and Van der Waals energy  $E_{VdW}$

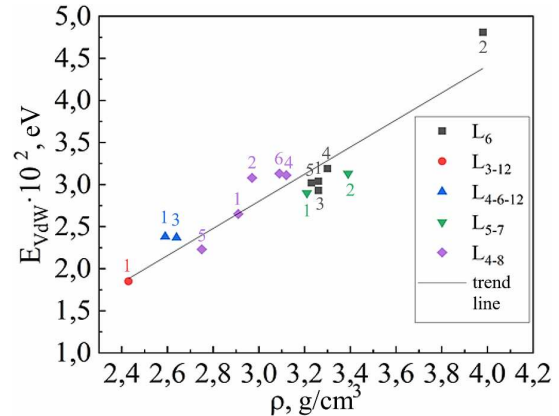


Fig. 3. The interlayer bond energy  $E_{VdW}$  versus bulk density  $\rho$

There is a connection between the van der Waals energy  $E_{VdW}$  and the interlayer distance  $d_L$ , as can be seen from fig. 2 – the greater  $E_{VdW}$ , the smaller  $d_L$ . According to fig. 3, there is also a connection between the Van der Waals energy  $E_{VdW}$  and the density  $\rho$ , namely, the higher the Van der Waals energy, the higher the bulk density.

The sublimation energy of 3D fluorographite crystals, with the exception of F-L6T2 fluorographite, is slightly (0,5 %) higher than the sublimation energy of 2D fluorographene crystals. Fluorographene and fluorographite F-L6T1 have the highest sublimation energy, and fluorographene and fluorographite F-L4-8T2 have the lowest.

In fluorographites F-L6T1 and F-L4-8T2 there is no layer shift, that is,  $S = 0$  (layer packing type AA), and in other fluorographites  $S$  is not equal to zero (layer packing type AB) and varies within a fairly wide range (from 0 to 3,71 Å). Note, that despite the same type of layer packing – type AA (no shear), fluorographites F-L6T1 and F-L4-8T2 are very different from each other in sublimation energies: for F-L6T1  $E_{sub} = 14,37$  eV, while for F-L4-8T2  $E_{sub} = 13,44$  eV.

It is interesting to note that, contrary to expectation, we did not find a link between the interlayer distance  $d_L$  and the shift  $S$ .

According to [16], in pure (non-functionalized) graphite the interlayer distance in AA type packaging is greater than in graphite in AB type packaging. In the functionalized materials studied in this work – fluorographites – no similar correlation between the distance  $d_L$  and the type of packaging was found.

The band gap of the studied fluorographites  $E_{g3D}$  varies widely from 2,51 eV (F-L6T5) to 4,60 eV (F-L4-8T2). It is on average 0,4 eV less than the band gap in fluorographene monolayers  $E_{g2D}$ .

Fig. 4 shows the dependence of the band gap  $E_{g3D}$  on the sublimation energy  $E_{sub3D}$  in fluorographites. It can be seen that the band gap decreases with the increase in sublimation energy. A similar dependence is observed in fluorographenes.

Based on the band gap, the fluorographenes and fluorographites we are studying should be classified as semiconductors or dielectrics.

Table 2 shows the average lengths of C-C bonds in the carbon frameworks of pure polymorphs of layered (2D) (graphenes) and three-dimensional (3D) (graphites) structures and fluorine-functionalized polymorphs of fluorographene (2D) and fluorographite (3D) and their relative changes:  $d_{C0}$  is the average length of the C-C bond in the functionalized material (fluorographene or fluorographite),

$\delta = \frac{d_C - d_{C0}}{d_{C0}} \cdot 100\%$  is the relative increase in the length of the C-C bond as a result of functionaliza-

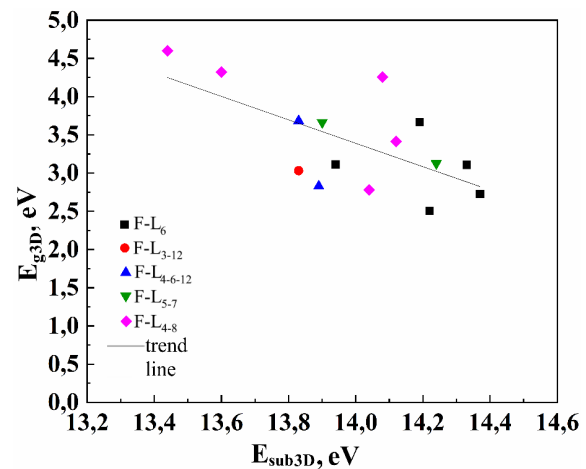


Fig. 4. The band gap  $E_{g3D}$  versus sublimation energy  $E_{sub3D}$  in fluorographites

tion,  $\Delta = \frac{d_{C_{\max}} - d_{C_{\min}}}{d_C} \cdot 100\%$  – spread – the relative difference between the maximum  $d_{C_{\max}}$  and minimum  $d_{C_{\min}}$  length of the C-C bond in the carbon framework.

Table 2

Average length of C-C-bond  $d_{C0}$  and  $d_C$ , the relative increase of the length of the C-C-bond as a result of the functionalization  $\delta$ , the spread of the lengths of C-C-bonds in the carbon frame  $\Delta$

Monolayer notation	Pure polymorphs (graphenes and graphites)		Functionalized polymorphs (fluorographenes and fluorographites)					
	2D, 3D		2D			3D		
	$d_{C0}, \text{Å}$	$\Delta, \%$	$d_C, \text{Å}$	$\delta, \%$	$\Delta, \%$	$d_C, \text{Å}$	$\delta, \%$	$\Delta, \%$
L <sub>6</sub> T1	1,43	0,2	1,57	9,8	0,1	1,57	9,8	0,2
L <sub>6</sub> T2			1,60	11,9	5,3	1,61	12,6	5,4
L <sub>6</sub> T3			1,58	10,5	1,1	1,58	10,5	1,8
L <sub>6</sub> T4			1,59	11,2	5,1	1,59	11,2	6,0
L <sub>6</sub> T5			1,59	11,2	1,9	1,59	11,2	3,1
L <sub>3-12</sub> T1	1,41	6,3	1,54	9,2	3,3	1,54	9,2	3,6
L <sub>4-6-12</sub> T1	1,45	7,6	1,59	9,7	10,3	1,59	9,7	10,7
L <sub>4-6-12</sub> T3			1,61	11,0	1,5	1,61	11,0	1,9
L <sub>5-7</sub> T1	1,41	8,9	1,57	11,3	4,4	1,56	10,3	8,8
L <sub>5-7</sub> T2			1,57	11,3	8,4	1,60	13,5	9,4
L <sub>4-8</sub> T1	1,44	6,3	1,57	9,0	6,8	1,57	9,0	6,7
L <sub>4-8</sub> T2			1,58	9,7	4,2	1,58	9,7	4,2
L <sub>4-8</sub> T4			1,58	9,7	4,9	1,58	9,7	4,9
L <sub>4-8</sub> T5			1,60	11,1	2,3	1,60	11,1	2,3
L <sub>4-8</sub> T6			1,58	9,7	3,8	1,58	9,7	3,8

A sufficiently large value of  $\delta$ , indicating a significant increase in the average length of the C-C bond  $d_C$ , indicates a deterioration in the structural properties of the studied graphenes and graphites during their functionalization.

In functionalized materials, during the transition from layered structures to three-dimensional ones, the values of  $d_C$  and  $\delta$  practically do not change, which indicates that the strength properties of layered and three-dimensional structures remain unchanged. In functionalized materials, the difference in the lengths of C-C bonds in the carbon frame  $\Delta$  during the transition from 2D to 3D crystals also practically does not change.

Noteworthy is the fact that there is a wide variety of C-C bond lengths in the carbon framework: from 0,2 % in F-L<sub>6</sub>T1 to 10,7 % in F-L<sub>4-6-12</sub>T1 in 3D-crystals. The reason for this is the following. In layers of both 2D fluorographenes and 3D fluorographites, fluorine atoms attached to neighboring carbon atoms in the C-C chain on one side of the layer (fig. 5, *a*) are close to each other and are repelled by flagpole forces [17, 18]. Let's call this option of attaching fluorine atoms to the carbon frame option *a*. Due to the repulsion of fluorine atoms, stretching occurs – elongation of the corresponding C-C bond. In another case, fluorine atoms attached to neighboring carbon atoms in the C-C chain on different sides of the layer (fig. 5, *b*) are far from each other and significant flagpole forces do not arise between them. Let's call this option for addition of fluorine atoms option *b*.

In the FL<sub>6</sub>T1 layer, fluorine atoms are attached according to option *b*, so the C-C bonds in it are not stretched. Ultimately, it turns out that in the FL<sub>6</sub>T1 layer, just as in the original L<sub>6</sub> graphene, all C-C bonds have the same length, and the degree of spread in the lengths of C-C bonds  $\Delta$  up to a calculation error (0,2 %) is equal to zero.

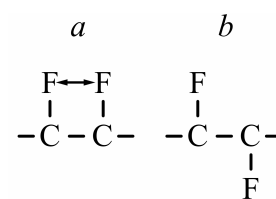


Fig. 5. Options for attaching fluorine atoms to the carbon frame: *a* – option *a*, *b* – option *b*

In the FL<sub>6</sub>T2 layer, unlike the FL<sub>6</sub>T1 layer, there is not one, but two groups of fluorine atoms: one group is attached according to option *a*, the other according to option *b*, so that some C-C bonds are stretched, while others are not. Therefore, this layer has a large degree of spread of the lengths of C-C bonds:  $\Delta = 5,3 \%$ .

In the FL<sub>4-6-12</sub>T3 layer there are two groups of C-C bonds: in one, short C-C bonds inside hexagonal cycles are stretched due to flagpole forces, in the other, long C-C bonds inside quadrangular cycles are not stretched. As a result, in the FL<sub>4-6-12</sub>T3 layer, the scatter in the lengths of C-C bonds turns out to be quite small ( $\Delta = 1,5 \%$ ) and less than in the original non-functionalized graphene L<sub>4-6-12</sub>, where  $\Delta = 7,6 \%$ .

In the FL<sub>4-6-12</sub>T3 layer there are more C-C bonds stretched due to flagpole forces than in the FL<sub>4-6-12</sub>T1 layer. Therefore, the average length of C-C bonds in the FL<sub>4-6-12</sub>T3 layer, where  $d_C = 1,61 \text{ \AA}$ , is greater than in the FL<sub>4-6-12</sub>T1 layer, where  $d_C = 1,59 \text{ \AA}$ .

## Conclusions

Computer modeling of the structure and electronic properties of two-dimensional and three-dimensional crystals fluorographenes and fluorographites was carried out. Fluorographenes – fluorine-functionalized graphene polymorphs F-L<sub>6</sub>, F-L<sub>3-12</sub>, F-L<sub>4-6-12</sub>, F-L<sub>5-7</sub> and F-L<sub>4-8</sub>, of various types of attachment. Fluorographites consisted of parallel stacked monolayers of fluorographene polymorphs. It was found that in the resulting structures, interlayer distances and bulk densities vary widely from layer to layer. Bulk density, interlayer distance and interlayer van der Waals energy show linear correlation with one another, in which: the greater the interlayer distance, the lower the bulk density and interlayer interaction energy, and the greater the interlayer interaction energy, the greater the bulk density. The sublimation energy of 3D fluorographite crystals is practically not different from the sublimation energy of 2D fluorographene monolayers. The band gap in fluorographite crystals is on average 0,4 eV less than the band gap in fluorographene monolayers. Based on the band gap, the studied fluorographites can be classified as semiconductors or dielectrics. It was found that the band gap in both fluorographenes and fluorographites decreases with increase of sublimation energy. The relation between the degree of spread of the lengths of C-C bonds, the order of fluorine atom arrangement on sides of the carbon layer framework, and the presence or absence of repulsive flagpole forces has been established.

## References

1. Rêgo C.R.C., Oliveira L.N., Tereshchuk P., Da Silva J.L.F. Comparative Study of van der Waals Corrections to the Bulk Properties of Graphite. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2015, Vol. 27, no. 41, P. 415502. DOI: 10.1088/0953-8984/27/41/415502.
2. Rohrer J., Hyldgaard P. Stacking and Band Structure of van der Waals Bonded Graphane Multilayers. *Physical Review B*, 2011, Vol. 83, no. 16, p. 165423. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.165423.
3. Antonov V.E., Bashkin I.O., Bazhenov A.V., Bulychev B.M., Fedotov V.K., Fursova T.N., Kolesnikov A.I., Kulakov V.I., Lukashov R.V., Matveev D.V., Sakharov M.K., Shulga Y.M. Multilayer Graphane Synthesized under High Hydrogen Pressure. *Carbon*, 2016, Vol. 100, pp. 465–473. DOI: 10.1016/j.carbon.2015.12.051.
4. Wen X.-D., Hand L., Labet V., Yang T., Hoffmann R., Ashcroft N.W., Oganov A.R., Lyakhov A.O. Graphane Sheets and Crystals under Pressure. *Proc. National Academy of Sciences*, 2011, Vol. 108, no. 17, pp. 6833–6837. DOI: 10.1073/pnas.1103145108.
5. Belenkov M.E., Chernov V.M. Three-Dimensional Structure and Electronic Properties of Crystals Formed from Layers of Fluorine Functionalized Hexagonal Graphene. *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*, 2021, Vol. 6, no. 3, pp. 363–374. DOI: 10.47475/2500-0101-2021-16310.
6. Belenkov M.E., Chernov V.M. Computer Simulation of Crystals Formed from 4-6-12 and 5-7 Fluorographene Layers. *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, Vol. 1967, P. 012058. DOI: 10.1088/1742-6596/1967/1/012058.
7. Belenkov M.E., Chernov V.M. Calculations of the Three-Dimensional Crystal Structures Consisting of 4-8 Graphene Layers Functionalized with Fluorine. *AIP Conference Proceedings*, 2021, Vol. 2402, P. 020021. DOI: 10.1063/5.0071577.
8. Belenkov M.E., Chernov V.M. Structure and Electronic Properties of 4-6-12 Graphene Layers Functionalized by Fluorine. *Letters on Materials*, 2020, Vol. 10, no. 3, pp. 254–259. DOI: 10.22226/2410-3535-2020-3-254-259.

9. Belenkov M.E., Chernov V.M., Belenkov E.A. Structure and Electronic Properties of Polymorphic Types of Fluorographene. *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*, 2024, Vol. 3, no. 2, pp. 202–211. (in Russ.). DOI: 10.24411/2500-0101-2018-13206.

10. Belenkov M.E., Chernov V.M., Belenkov E.A. Simulation of the Structure and Electronic Properties of Fluorographene Polymorphs formed on the Basis of 4-8 Graphene. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2019, Vol. 537, Iss. 2, P. 022058. DOI: 10.1088/1757-899X/537/2/022058.

11. Belenkov M.E., Chernov V.M. Crystal and Electronic Structure of 3-12 Graphene Functionalized by Fluorine. *Physical and Chemical Aspects of the Study of Clusters, Nanostructures and Nanomaterials*, 2019, Vol. 11, pp. 406–413. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.406.

12. Belenkov M.E., Chernov V.M. Ab Initio Calculations of the Crystalline and Electronic Structure of 5-7 Fluorographene Varieties. *Physical and Chemical Aspects of the Study of Clusters, Nanostructures and Nanomaterials*, 2020, Vol. 12, pp. 326–337. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.326.

13. Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T., Bunau O., Buongiorno Nardelli M., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Cococcioni M., Colonna N., Carnimeo I., Dal Corso A., De Gironcoli S., Delugas P., DiStasio Jr. R.A., Ferretti A., Floris A., Fratesi G., Fugallo G., Gebauer R., Gerstmann U., Giustino F., Gorni T., Jia J., Kawamura M., Ko H.-Y., Kokalj A., Kucukbenli E., Lazzeri M., Marsili M., Marzari N., Mauri F., Nguyen N.L., Nguyen H.-V., Otero-de-la-Roza A., Paulatto L., Ponce S., Rocca D., Sabatini R., Santra B., Schlipf M., Seitsonen A.P., Smogunov A., Timrov I., Thonhauser T., Umari P., Vast N., Wu X., Baroni S. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2017, Vol. 29, no. 46, P. 465901. DOI: 10.1088/1361-648X/aa8f79.

14. Belenkov M.E. X-ray Diffraction Analysis of Fluorographene. *Proc. VI International Scientific Conference for Young Scientists “Nanomaterials and Nanotechnology: Problems and the Prospects”*, Saratov, May 15–16, 2017, pp. 27–30.

15. Nair R.R., Ren W., Jalil R., Riaz I., Kravets V.G., Britnell L., Blake P., Schedin F., Mayorov A.S., Yuan S., Katsnelson M.I., Cheng H.-M., Strupinski W., Bulusheva L.G., Okotrub A.V., Grigorieva I.V., Grigorenko A.N., Novoselov K.S., Geim A.K. Fluorographene: A Two-Dimensional Counterpart of Teflon. *Small*, 2010, Vol. 6, Iss. 24, P. 2877–2884. DOI: 10.1002/sml.201001555.

16. Lee J.K., Kim J.G., Hembram K.P.S.S., Kim Y.-I., Min B.-K., Park Y., Lee J.-K., Moon D.J., Lee W., Lee S.-G., John P. The Nature of Metastable AA' Graphite: Low Dimensional Nano- and Single-Crystalline Forms. *Scientific Reports*, 2016, Vol. 6, p. 39624. DOI: 10.1038/srep39624.

17. Pumera M., Wong C.H.A. Graphane and Hydrogenated Graphene. *Chemical Society Reviews*, 2013, Vol. 42, Iss. 14, pp. 5987–5995. DOI: 10.1039/C3CS60132C.

18. Samarakoon D.K., Wang X.-Q. Chair and Twist-Boat Membranes in Hydrogenated Graphene. *ACS Nano*, 2009, Vol. 3, Iss. 12, P. 4017–4022. DOI: 10.1021/nn901317d.

*Received July 11, 2024*

### **Information about the authors**

Belenkov Maxim Evgenyevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Engineer of the Radiophysics and Electronics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: me.belenkov@gmail.com.

Chernov Vladimir Mikhailovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor of the Radiophysics and Electronics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: chernov@csu.ru.

Butakov Anatolii Vladimirovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Acting Chief of the Radiophysics and Electronics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: anatol912@bk.ru.

**СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ФТОРОГРАФЕНОВЫХ И ФТОРОГРАФИТОВЫХ КРИСТАЛЛОВ****М.Е. Беленков, В.М. Чернов, А.В. Бутаков**

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: me.belenkov@gmail.com

Аннотация. Проведено исследование структуры и электронных свойств двумерных (2D) (фторографенов) и трехмерных (3D) (фторографитов) кристаллов, составленных из функционализированных фтором монослоев полиморфов графена  $L_6$ ,  $L_{3-12}$ ,  $L_{4-6-12}$ ,  $L_{5-7}$  и  $L_{4-8}$  с различным типом присоединения атомов фтора. Установлено, что в исследуемых 3D-кристаллах изменяются в широких пределах межслоевые расстояния:  $4,73 \div 5,96 \text{ \AA}$  и объемные плотности:  $2,43 \div 3,98 \text{ г/см}^3$ . Значение ширины запрещенной зоны во фторографитах в среднем на 0,4 эВ меньше ширины запрещенной зоны в соответствующих фторографенах. Во фторографитах обнаружена закономерность: с увеличением межслоевого расстояния энергия межслоевого взаимодействия уменьшается, а объемная плотность увеличивается. Обнаружено, что ширина запрещенной зоны как во фторографенах, так и фторографитах уменьшается при увеличении энергии сублимации. Установлена связь между степенью разброса длин С-С-связей и наличием или отсутствием расталкивающих флэгроле-сил между присоединяемыми атомами фтора. Наблюдается, что при функционализации значения средней длины С-С связи увеличиваются для монослоев  $L_6$ ,  $L_{3-12}$ ,  $L_{4-6-12}$ ,  $L_{5-7}$  и  $L_{4-8}$ . Значения средних длин С-С связей при формировании фторографита из фторографена практически не изменяются. Разброс длин С-С связей варьируется от 0,2 % в F- $L_6T1$  до 10,7 % в F- $L_{4-6-12}T1$  для фторографитов.

*Ключевые слова:* функционализация; фторографит; фторографен; полиморфизм кристаллов; тип присоединения; ширина запрещенной зоны.

**Литература**

1. Rêgo, C.R.C. Comparative Study of van der Waals Corrections to the Bulk Properties of Graphite / C.R.C. Rêgo, L.N. Oliveira, P. Tereshchuk, J.L.F. Da Silva // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2015. – Vol. 27, no. 41. – P. 415502.
2. Rohrer, J. Stacking and Band Structure of van der Waals Bonded Graphane Multilayers / J. Rohrer, P. Hyldgaard // Physical Review B. – 2011. – Vol. 83, no. 16. – P. 165423.
3. Multilayer Graphane Synthesized under High Hydrogen Pressure / V.E. Antonov, I.O. Bashkin, A.V. Bazhenov *et al.* // Carbon. – 2016. – Vol. 100. – P. 465–473.
4. Graphane Sheets and Crystals under Pressure / X.-D. Wen, L. Hand, V. Labet *et al.* // Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2011. – Vol. 108, no. 17. – P. 6833–6837.
5. Беленков, М.Е. Трехмерная структура и электронные свойства кристаллов, сформированных из слоев гексагонального графена, функционализированного фтором / М.Е. Беленков, В.М. Чернов // Челябинский физико-математический журнал. – 2021. – Т. 6, № 3. – С. 363–374.
6. Belenkov, M.E. Computer Simulation of Crystals Formed from 4-6-12 and 5-7 Fluorographene layers / M.E. Belenkov, V.M. Chernov // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – Vol. 1967. – P. 012058.
7. Belenkov, M.E. Calculations of the Three-Dimensional Crystal Structures Consisting of 4-8 Graphene Layers Functionalized with Fluorine / M.E. Belenkov, V.M. Chernov // AIP Conference Proceedings. – 2021. – Vol. 2402. – P. 020021.
8. Belenkov, M.E. Structure and Electronic Properties of 4-6-12 Graphene Layers Functionalized by Fluorine / M.E. Belenkov, V.M. Chernov // Letters on Materials. – 2020. – Vol. 10, no. 3. – P. 254–259.
9. Беленков, М.Е. Структура и электронные свойства полиморфных разновидностей фторографена / М.Е. Беленков, В.М. Чернов, Е.А. Беленков // Челябинский физико-математический журнал. – 2018. – Т. 3, № 2. – С. 202–211.

10. Belenkov, M.E. Simulation of the Structure and Electronic Properties of Fluorographene Polymorphs Formed on the Basis of 4-8 Graphene / M.E. Belenkov, V.M. Chernov, E.A. Belenkov // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2019. – Vol. 537, Iss. 2. – P. 022058.

11. Беленков, М.Е. Кристаллическая и электронная структура 3-12 графена, функционализированного фтором / М.Е. Беленков, В.М. Чернов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. (под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова). – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – Вып. 11. – С. 406–413.

12. Беленков, М.Е. Ab initio расчеты кристаллической и электронной структуры полиморфов 5-7 фторографена / М.Е. Беленков, В.М. Чернов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2020. – Вып. 12. – С. 326–337.

13. Advanced Capabilities for Materials Modelling with Quantum ESPRESSO / P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme *et al.* // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2017. – Vol. 29, no. 46. – P. 465901.

14. Беленков М.Е. Рентгеноструктурный анализ фторографена / М.Е. Беленков // Наноматериалы и Нанотехнологии: проблемы и перспективы. Сборник материалов VI Международной научной конференции для молодых ученых, Саратов, 15–16 мая 2017 года. – 2017. – С. 27–30.

15. Fluorographene: A Two-Dimensional Counterpart of Teflon / R.R. Nair, W. Ren, R. Jalil *et al.* // Small. – 2010. – Vol. 6, Iss. 24. – P. 2877–2884.

16. The Nature of Metastable AA' Graphite: Low Dimensional Nano- and Single-Crystalline Forms / J.K. Lee, J.G. Kim, K.P.S.S. Hembram *et al.* // Scientific Reports. – 2016. – Vol. 6. – P. 39624.

17. Pumera, M. Graphane and Hydrogenated Graphene / M. Pumera, C.H.A. Wong // Chemical Society Reviews. – 2013. – Vol. 42, Iss. 14. – P. 5987–5995.

18. Samarakoon, D.K. Chair and Twist-Boat Membranes in Hydrogenated Graphene / D.K. Samarakoon, X.-Q. Wang // ACS Nano. – 2009. – Vol. 3, Iss. 12. – P. 4017–4022.

*Поступила в редакцию 11 июля 2024 г.*

#### **Сведения об авторах**

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

Чернов Владимир Михайлович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: chernov@csu.ru.

Бутакон Анатолий Владимирович – кандидат физико-математических наук, и.о. заведующего кафедрой радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: anatol912@bk.ru.

## ЗАМЕЧАНИЕ О ФОРМУЛАХ ДЛЯ СКОРОСТИ ВОЛН РЭЛЕЯ

**Е.В. Голубев**

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация  
e-mail: golubev@susu.ru

**Аннотация.** Представлен вывод выражения для скорости поверхностных волн на границе упругого полупространства (волн Рэлея) через значения скоростей объемных упругих волн. Получены обобщенные формулы Нкемзи и Малишевского. Приведено решение уравнения, выраженное через тригонометрические и гиперболические функции. Рассмотрены некоторые приближенные формулы.

**Ключевые слова:** поверхностные волны; скорость волны Рэлея; корни характеристического уравнения; точное решение; приближенная формула.

Скорость волны Рэлея в задачах акустики однородных упругих сред может быть найдена с помощью выражения  $c_r = c_t \xi = c_t \sqrt{x}$ , где  $x$  – единственный действительный корень, принадлежащий интервалу  $[0,1)$ , уравнения [1, с. 136]:

$$x^3 - 8x^2 + 8x(3 - 2u^2) - 16(1 - u^2) = 0, \quad (1)$$

где сделана замена  $x = \xi^2$  и введены обозначения:  $u^2 = (c_t/c_l)^2$ ,  $c_r, c_t, c_l$  – скорости поверхностных, поперечных и продольных волн соответственно.

### Решение алгебраическим методом

Решаемое уравнение имеет вид  $f(x) = 0$ , где  $f(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d$ ,  $a = 1$ ,  $b = -8$ ,  $c = 8(3 - 2u^2)$ ,  $d = -16(1 - u^2)$ . Дискриминант  $\Delta = -4b^3d + b^2 + c^2 - 4ac^3 + 18abcd - 27a^2d^2 = 128(128u^6 - 340u^4 + 502u^2 - 305) < 0$  при  $u^2 < 1,071$ , и, следовательно, уравнение имеет два комплексно сопряженных корня и один действительный.

Сделаем замену переменных  $x = y - b/3a = y + 8/3$ , тогда уравнение (1) примет вид  $y^3 + py + q = 0$ , где  $p = -8(6u^2 - 1)/3$ ,  $q = -16(45u^2 - 17)/27$ . Применим подстановку Виета  $y = z - p/(3z)$ , которая переводит уравнение в квадратное относительно  $z^3$ :  $z^6 + qz^3 - p^3/27 = 0$ . Получим  $(z^3)_{1,2} = (-9q \mp \sqrt{3}\sqrt{27q^2 - 4p^3})/18$  и  $z_k = \sqrt[3]{(-9q \mp \sqrt{3}\sqrt{27q^2 - 4p^3})/18} \exp(i2\pi k/3)$ , где  $k = 0, 1, 2$  – номер корня. Запишем выражения для корней исходного уравнения:

$$x_k = z_k - \frac{p}{3z_k} + \frac{8}{3} = \frac{8}{3} + \sqrt[3]{\frac{-9q \mp \sqrt{3}\sqrt{27q^2 - 4p^3}}{18}} \exp(i2\pi k/3) - \frac{p \exp(-i2\pi k/3) \sqrt[3]{18}}{3 \sqrt[3]{-9q \mp \sqrt{3}\sqrt{27q^2 - 4p^3}}}.$$

Введем обозначения

$$T = \sqrt{((-64u^2 + 107)u^2 - 62)u^2 + 11}, \quad U_{\pm} = \sqrt[3]{17 - 45u^2 \pm 3\sqrt{3}T}$$

и запишем решения уравнения (1) в виде, аналогичном [2, см. (11)]:

$$x_k = \frac{8}{3} - \frac{2}{3} \left[ U_{\pm} \exp(i2\pi k/3) + \frac{2(6u^2 - 1)}{U_{\pm}} \exp(-i2\pi k/3) \right], \quad k = 0, 1, 2. \quad (2)$$

Действительный корень уравнения (1) определяется этим выражением при  $k = 0$ :

$$x = \frac{8}{3} - \frac{2}{3} \left[ U_{\pm} + \frac{2(6u^2 - 1)}{U_{\pm}} \right], \quad (3)$$

где в выражении для  $U_{\pm}$  выбор знака произволен.

Для случая «+» формула (3) получена Д. Нкемзи [2, см. (10)], а П.Г. Малишевским формулы (2) и (3) получены из более простых и удобных для вычисления выражений для корней уравне-



ния Рэлея [2, см. (5) и (6); 3, см. (3) и (4); 4, см. (3)–(6)], которые, с учетом наших рассуждений, можно записать в обобщенном виде ( $\gamma = u^2$ ):

$$\begin{aligned} h_1(\gamma) &= 3\sqrt{33 - 186\gamma + 321\gamma^2 - 192\gamma^3}, \\ h_2(\gamma) &= -17 + 45\gamma \pm h_1(\gamma), \quad h_3(\gamma) = 17 - 45\gamma \pm h_1(\gamma), \quad h_4(\gamma) = 1/6 - \gamma, \\ x(\gamma) &= \frac{2}{3} \left[ 4 - \sqrt[3]{h_3(\gamma)} + \text{sign}[h_4(\gamma)] \sqrt[3]{\text{sign}[h_4(\gamma)] \cdot h_2(\gamma)} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

Заметим, что в выражениях для  $h_2(\gamma)$  и  $h_3(\gamma)$  выбор знака, как и в (3), на значение  $x$  не влияет. Связь между (3) и (4) устанавливается путем преобразований, аналогичных приведенным в [2]. При  $\gamma > \gamma_0 \approx 0,321498\dots$  [4], что соответствует переходу подкоренного выражения  $h_1(\gamma)$  к отрицательным значениям, корень остается действительным, так как в квадратных скобках суммируются комплексно сопряженные числа. Для случая выбора знака «-», выражение для действительного корня приведено и проанализировано в [5, 6]. Выражения (3) и (4) также можно использовать в аналитическом выражении для производной определителя Рэлея при нахождении вычета, приведенного в [6].

При численной реализации формул (3) и (4) в конкретной системе необходима проверка качества реализации функции извлечения кубического корня из комплексного числа и коррекция ее выбора корня при необходимости. Так, например, в одних системах  $\sqrt[3]{-1} = -1$ , в других – выбирается значение корня, лежащее в первой четверти ( $\text{Re}, \text{Im} \geq 0$ ).

### Решение с использованием тригонометрических и гиперболических функций

Запишем, следуя работе Г. Холмса [7], решение исходного уравнения  $f(x) = 0$ . Введем обозначения:

$$\begin{aligned} x_N &= -\frac{b}{3a} = \frac{8}{3}, \quad y_N = f(x_N) = \frac{16(17 - 45u^2)}{27}, \quad \Delta = \sqrt{\frac{3ac - b^2}{9a^2}} = \frac{2\sqrt{2}}{3} \sqrt{1 - 6u^2}, \\ \delta = i\Delta &= \frac{2\sqrt{2}}{3} \sqrt{6u^2 - 1}, \quad h = 2a\delta^3 = \frac{32\sqrt{3}}{27} (6u^2 - 1)^{3/2}, \quad H = 2a\Delta^3 = \frac{32\sqrt{3}}{27} (1 - 6u^2)^{3/2}. \end{aligned}$$

В работах [7, 8] при использовании тригонометрических и гиперболических формул получены выражения для корней в трех случаях, которые реализуются для нашего уравнения на разных интервалах значения параметра  $u^2$ :

$$1) \text{Re}(y_N/h) = 0: \quad x = x_N - 2\Delta \sinh \left[ \frac{1}{3} \sinh^{-1} \left( \frac{y_N}{H} \right) \right], \text{ т. е.}$$

$$x = \frac{8}{3} - \frac{4\sqrt{2}}{3} \sqrt{1 - 6u^2} \sinh \left[ \frac{1}{3} \sinh^{-1} \left( \frac{17 - 45u^2}{2\sqrt{2}(1 - 6u^2)^{3/2}} \right) \right] \text{ при } u^2 \leq 1/6; \quad (5)$$

$$2) y_N/h > +1: \quad x = x_N - 2\delta \cosh \left[ \frac{1}{3} \cosh^{-1} \left( \frac{y_N}{h} \right) \right], \text{ т. е.}$$

$$x = \frac{8}{3} - \frac{4\sqrt{2}}{3} \sqrt{6u^2 - 1} \cosh \left[ \frac{1}{3} \cosh^{-1} \left( \frac{17 - 45u^2}{2\sqrt{2}(6u^2 - 1)^{3/2}} \right) \right] \text{ при } 1/6 < u^2 < u_0^2, \quad (6)$$

$$3) |y_N/h| \leq -1: \quad x = x_N + 2\delta \cos \left[ \frac{1}{3} \cos^{-1} \left( \frac{y_N}{h} \right) \right], \text{ т. е.}$$

$$x = \frac{8}{3} - \frac{4\sqrt{2}}{3} \sqrt{6u^2 - 1} \cos \left[ \frac{1}{3} \cos^{-1} \left( \frac{17 - 45u^2}{2\sqrt{2}(6u^2 - 1)^{3/2}} \right) \right] \text{ при } u^2 \geq u_0^2, \quad (7)$$

где  $u_0^2 = \gamma_0 \approx 0,321498\dots$ . Формула (7) для уравнения (1) была впервые представлена в [9] и, как (5) и (6), не содержит кубических радикалов или интегральных выражений.

**Построение приближенной формулы для вычисления корня уравнения Рэлея**

Использование приближенных выражений оправдано при недостатке вычислительных мощностей для численного решения исходного уравнения или использования аналитического выражения ввиду его математической сложности, если их погрешность вычисления меньше заданной величины. Обычно, приближенные формулы проще точных аналитических выражений, что позволяет быстро оценить необходимую величину или использовать простое программное обеспечение цифровых двойников и снизить требования к аппаратной части оборудования, сопровождающего технологические процессы.

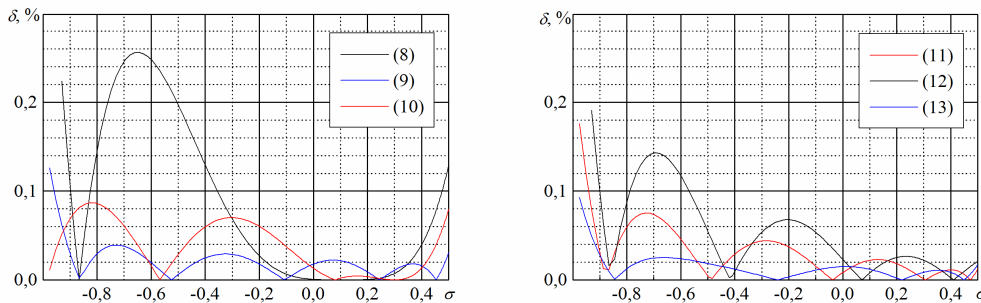
Построение приближенных формул требует интуиции и опыта, например, по графику функции необходимо предложить комбинацию из приближающих ее элементарных функций или предложить преобразование функции и ее переменных для наилучшего ее такого приближения. Также формулы можно конструировать методами математического анализа: заменой переменных, линеаризацией исходного выражения или разложением в ряд по различным, например, ортогональным функциям и т. д.

Для оценки погрешности приближения будем использовать обычную формулу для относительной погрешности:  $\delta = |f_{\text{точн}} - f_{\text{прибл}}| \cdot 100\% / f_{\text{точн}}$ , где  $f_{\text{точн}}$ ,  $f_{\text{прибл}}$  – точное и приближенное значение соответственно.

П.Г. Малишевский в [10] предложил приближать функцию  $\sqrt{x}$  полиномом третьей степени от коэффициента Пуассона  $\sigma = (2\gamma - 1) / 2(\gamma - 1) = (2u^2 - 1) / 2(u^2 - 1)$ . При использовании точной формулы (4) (со знаком «+») и метода наименьших квадратов была получена формула

$$\sqrt{x} \approx 0,874027 + 0,195608\sigma - 0,0425231\sigma^2 - 0,0569549\sigma^3. \quad (8)$$

Погрешность такого приближения не превышает 0,45 % на области определения и 0,1% при  $\sigma \in [0, 0,5]$ , в области  $[0, 0,2]$  относительная погрешность не превышает 0,0006 %. В качестве недостатка можно отметить быстрый рост погрешности вне интервала  $\sigma \in [0, 0,2]$  (см. рисунок).



**Зависимость погрешности приближенных формул (8)–(13) от коэффициента Пуассона  $\sigma$**

Поскольку для очень многих веществ коэффициент Пуассона находится в области  $[0, 0,4]$ , а также за последние 100 лет было открыто много кристаллических и пористых материалов с отрицательными коэффициентами Пуассона, то можно поставить задачу об уточнении формулы. Будем дальше искать преобразование, которое приведет функцию к виду, который лучше приближается полиномом. Так, замечено, что если аргументом оставить  $\sigma$ , то обратная функция к экспоненте от  $\sqrt{x}$  и обратные тригонометрические и гиперболические функции приближаются полиномом третьей степени с большим коэффициентом корреляции и меньшей дисперсией. Выбор пробных функций был обусловлен в том числе и видом выражений (5)–(7). По возможности будем минимизировать относительную погрешность в «рабочей» области  $\sigma \in [0, 0,4]$  и во вторую очередь – погрешность на всей области определения.

В результате численных экспериментов найдены следующие приближенные формулы:

$$\sqrt{x} \approx \exp(-0,13481767 + 0,22245627\sigma - 0,064405126\sigma^2 - 0,050681185\sigma^3). \quad (9)$$

$$\sqrt{x} \approx \exp(-0,13450658 + 0,221488406\sigma - 0,06617292\sigma^2 - 0,04966605\sigma^3). \quad (10)$$

$$\sqrt{x} \approx \sinh(0,78938470 + 0,14577804\sigma - 0,034075524\sigma^2 - 0,035363364\sigma^3). \quad (11)$$

$$\sqrt{x} \approx \cos(0,50694159 - 0,39660365\sigma - 0,057051772\sigma^2 + 0,040189213\sigma^3). \quad (12)$$

$$\sqrt{x} \approx \tanh(1,3493561 + 0,82668967\sigma + 0,43981743\sigma^2 + 0,11823013\sigma^3). \quad (13)$$

Формула (9) была получена логарифмированием функции  $\sqrt{x(\sigma)}$  и вычислением коэффициентов полинома третьей степени методом наименьших квадратов для  $\sigma \in [-1, 0,5]$ . Для уточнения формулы в рабочей области была попытка построить такую же формулу (10), но проходящую через точку  $\sqrt{x(0,3)}$  и имеющую такую же первую производную в этой точке, что и у точной формулы. Минимизация происходила по первым двум параметрам, третий и четвертый – вычислялись по ним для соблюдения поставленных условий. Формулы (11)–(13) построены аналогично (9). Выражения с  $\sin$ ,  $\cosh$  дают большую погрешность вычислений и не приведены.

Анализ погрешности приближенных формул показывает, что наименьшая погрешность (менее 0,0006 %) в диапазоне  $\sigma \in [0, 0,2]$  у самой простой формулы П.Г. Малишевского (8). Для использования в диапазоне  $[-0,5, 0,5]$  с погрешностью менее 0,02 % и в диапазоне  $[-0,9, 0,5]$  с погрешностью менее 0,03 % можно использовать приближенную формулу (13).

### Заключение

Приведены алгебраическое и тригонометрическое решения исходного кубического уравнения, выраженные через квадрат отношения скоростей объемных волн. Алгебраическое решение получено в виде двух эквивалентных форм, которые сохраняются для всего исследуемого диапазона  $0 \leq u^2 \leq 0,75$ . Решение, записанное через тригонометрические функции и их аналитическое продолжение – гиперболические функции, требует разделения исходного диапазона на три интервала, на которых оно определено различными выражениями. Однако оно не требует работы с комплексными числами и вычисления кубических радикалов. Можно предположить, что разнообразие форм записи точных решений может облегчить рассмотрение задач возбуждения и распространения поверхностных волн в аналитическом виде, построения новых приближенных формул для скорости волн Рэлея и задач дифракции.

### Литература

1. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1987. – 248 с.
2. Malischewsky, P.G. A Note on Rayleigh-Wave Velocities as a Function of the Material Parameters / P.G. Malischewsky // Geofísica Internacional. – 2004. – Vol. 43, no. 3. – P. 507–509.
3. Malischewsky, P.G. Discussion Comment to “A New Formula for the Velocity of Rayleigh Waves” by D. Nkemzi [Wave Motion 26 (1997) 199–205] / P.G. Malischewsky // Wave Motion. – 2000. – Vol. 31. – P. 93–96.
4. Malischewsky, P.G. Some Special Solutions of Rayleigh’s Equation and the Reflections of Body Waves at a Free Surface / P.G. Malischewsky // Geofísica Internacional. – 2000. – Vol. 39, no. 2. – P. 155–160.
5. Mechkour, H. The Exact Expressions for the Roots of Rayleigh Wave Equation / H. Mechkour // Proceedings of the 2-nd International Colloquium of Mathematics in Engineering and Numerical Physics (MENP-2) April 22–27, 2002, Bucharest, Romania. – P. 96–104.
6. Гуревич, С.Ю. Замечание о вычислении скорости волны Рэлея и производной определителя Рэлея в упругих средах / С.Ю. Гуревич, Е.В. Голубев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2023. – Т. 15, № 1. – С. 69–75.
7. Holmes, G.C. The Use of Hyperbolic Cosines in Solving Cubic Polynomials / G.C. Holmes // The Mathematical Gazette. – 2002. – Vol. 86, no. 507. – P. 473–477.
8. Nickalls, R.W.D. A New Approach to Solving the Cubic: Cardan’s Solution Revealed / R.W.D. Nickalls // The Mathematical Gazette. – 1993. – Vol. 77. – P. 354–359.
9. Rahman, M. Exact Expressions for the Roots of the Secular Equation for Rayleigh Waves / M. Rahman, J.R. Barber // Journal of Applied Mechanics. – 1995. – Vol. 62. – P. 250–252.
10. Vinh, P.C. Explanation for Malischewsky’s Approximate Expression for the Rayleigh Wave Velocity / P.C. Vinh, P.G. Malischewsky // Ultrasonics. – 2006. – Vol. 45. – P. 77–81.

*Поступила в редакцию 8 декабря 2024 г.*

### Сведения об авторе

Голубев Евгений Валерьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: golubev@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-6641-0702>.

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2025, vol. 17, no. 1, pp. 48–52*

---

DOI: 10.14529/mmph250106

## NOTES ON FORMULAS FOR THE RAYLEIGH WAVE VELOCITY

**E.V. Golubev**

*South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation*

*e-mail: golubev@susu.ru*

**Abstract.** The paper derives the expression for the velocity of surface waves on the boundary of an elastic half-space (Rayleigh waves) through the velocities of volume elastic waves. It presents the generalized D. Nkemzi and P.G. Malischewsky's formulas, proposes the solution to the equation expressed through trigonometric and hyperbolic functions and considers some approximate formulas.

*Keywords:* surface waves; Rayleigh wave velocity; characteristic equation roots; exact solution.

### References

1. Landau L.D., Lifshitz E.M. *Theory of Elasticity* (3rd ed.). Oxford, England: Butterworth Heinemann, 1986, 204 p.
2. Malischewsky P.G. A Note on Rayleigh-Wave Velocities as a Function of the Material Parameters. *Geofisica Internacional*, 2004, Vol. 43, no. 3, pp. 507–509.
3. Malischewsky P.G. Discussion Comment to “A New Formula for the Velocity of Rayleigh Waves” by D. Nkemzi [Wave Motion 26 (1997) 199–205]. *Wave Motion*, 2000, Vol. 31, pp. 93–96.
4. Malischewsky P.G. Some Special Solutions of Rayleigh's Equation and the Reflections of Body Waves at a Free Surface. *Geofisica Internacional*, 2000, Vol. 39, no. 2, pp. 155–160.
5. Mechkour H. The Exact Expressions for the Roots of Rayleigh Wave Equation. *Proc. 2-nd International Colloquium of Mathematics in Engineering and Numerical Physics (MENP-2)* April 22–27, 2002, Bucharest, Romania, pp. 96–104.
6. Gurevich S.Yu., Golubev E.V. A Note on Calculating Rayleigh Wave Velocity and the Derivative of the Rayleigh Determinant in Elastic Media. *Bulletin of the South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*, 2023, Vol. 15, no. 1, pp. 69–75. DOI: 10.14529/mmph230108
7. Holmes G.C. The Use of Hyperbolic Cosines in Solving Cubic Polynomials. *The Mathematical Gazette*, 2002, Vol. 86, no. 507, pp. 473–477.
8. Nickalls R.W.D. A New Approach to Solving the Cubic: Cardan's Solution Revealed. *The Mathematical Gazette*, 1993, Vol. 77, pp. 354–359.
9. Rahman M., Barber J.R. Exact Expressions for the Roots of the Secular Equation for Rayleigh Waves. *Journal of Applied Mechanics*, 1995, Vol. 62, pp. 250–252. DOI: 10.1115/1.2895917
10. Vinh P.C., Malischewsky P.G. Explanation for Malischewsky's Approximate Expression for the Rayleigh Wave Velocity. *Ultrasonics*, 2006, Vol. 45, pp. 77–81.

*Received December 8, 2024*

### Information about the author

Golubev Evgeniy Valer'evich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Optoinformatics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: golubev@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-6641-0702>.

# AB INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВЫДЕЛЕНИЙ КАРБИДА ВАНАДИЯ В ОЦК-ЖЕЛЕЗЕ

**А.А. Мирзоев, А.В. Верховых**

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

*E-mail: mirzoevaa@susu.ru*

**Аннотация.** Согласно экспериментальным исследованиям, выделения карбида ванадия значительно повышают твердость сталей. В то же время мало что известно о том, как происходит сам процесс. В этой статье в рамках теории функционала плотности выполнены расчеты ряда энергетических параметров, позволяющих понять, как образуется карбид ванадия, а также описать энергию его границы с ферритной фазой.

*Ключевые слова:* *ab initio моделирование; карбид ванадия; межфазная граница; энергия растворения; энергия связи.*

## Введение

Карбиды ванадия считаются одним из важных видов твердых компонентов и измельчителей зерна в мартенситных сталях. Ванадий достаточно легко растворяется в железе и образует с ним непрерывный ряд твердых растворов, поскольку атомный радиус ванадия лишь на 6 % больше, чем у железа [1]. При этом ванадий относится к элементам, которые выклинивают  $\gamma$ -фазу в системе Fe-C, поэтому железованадиевые стали при содержании более 1,5 масс. % V являются ферритными. Легирование феррита ванадием повышает предел его прочности, что связано с выделением карбидов ванадия, среди которых наиболее часто обнаруживается карбид VC, имеющий кубическую решетку типа NaCl. Стехиометрический карбид VC, полученный химическим путем, имеет параметр решетки  $a = 0,4190$  нм, а параметр решетки карбида ванадия в сталях несколько ниже –  $a = 0,415$ – $0,416$  нм [1]. Выделения считаются ключевыми элементами, влияющими на прочность и внутреннюю структуру стали. В процессе  $\gamma \rightarrow \alpha$  превращения карбиды ванадия зарождаются на границах раздела фаз и внутри зерен феррита в виде непрерывных выделений. Межфазная граница формируется между кристаллами Fe(100) и VC(100) в так называемом ориентационном соотношении Бейкера–Наттинга, которое часто наблюдается экспериментально для выделений карбидов с кристаллической структурой B1 (NaCl), внедренных в ферритовую ОЦК-матрицу [1]. Это ориентационное соотношение выражается как  $(001)\text{Fe}/(001)\text{VC}$  и  $[100]\text{Fe} \parallel [110]\text{VC}$ .

Несмотря на важность явления для физического металловедения, расчётов энергетических характеристик поверхности раздела феррит-VC в системе Fe–V–C практически не проводилось. Можно указать только на работу [2], где было проведено моделирование захвата атомов водорода границей раздела между карбидом ванадия и ферритом. В связи с этим представляется важным провести первопринципный расчет всех необходимых энергетических параметров наноразмерных выделений карбида ванадия VC в ОЦК-железе, чему и посвящена настоящая статья. Все расчеты проводились в рамках теории функционала плотности PAW-методом с учетом обобщенного градиентного приближения [3] в программном пакете VASP [4] методом суперячейки с периодическими граничными условиями.

## Моделирование взаимодействия атомов ванадия и углерода в неупорядоченном твердом растворе Fe–V–C

При моделировании была использована суперячейка, состоящая из 54 узлов ОЦК-решетки. Такой выбор определялся результатами работы [5], в которой проводился анализ сходимости результатов моделирования от размера суперячейки и было показано, что ячейка из 54 узлов ОЦК-железа обеспечивает необходимую точность до  $20 \cdot 10^{-3}$  эВ. Для системы Fe–V–C 53 узла заполнены атомами железа, 1 узел – атомом ванадия в позиции замещения и 1 атом углерода – в позиции внедрения. При интегрировании в обратном пространстве и вычислении электронной плотности использовалась схема Монхорста–Пака с сеткой  $4 \times 4 \times 4$   $k$ -точек зоны Бриллюэна. Энергия

обрезания плоской волны установлена равной 420 эВ. При оптимизации атомной структуры использовался критерий сходимости: изменение энергии между двумя циклами самосогласования составляет менее  $10^{-6}$  эВ, а силы, действующие на каждый из атомов, не превышают 0,01 эВ/Å. Энергия растворения примеси внедрения (С) и замещения (V) вычислялась по формуле

$$E_{d1} = E(\text{Fe}_n\text{X}) - nE(\text{Fe}) - E(\text{X}), \quad (1)$$

где  $E(\text{Fe}_n\text{X})$  – полная энергия системы содержащей  $n$  атомов железа (для примеси внедрения  $n = 54$ , для замещения –  $n = 53$ ) и один атом примеси;  $E(\text{Fe})$  и  $E(\text{X})$  – энергии одного атома железа и одного атома примеси соответственно. Для расчетов, содержащих углерод в качестве эталонного состояния для С, использовалась структура графита. Параметры структуры графита были взяты из экспериментальной работы [6] ( $a = b = 2,462 \text{ \AA}$ ,  $c = 6,656 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 120^\circ$ ), поскольку известно, что DFT-GGA не дает точного описания связи Ван-дер-Ваальса между слоями графита [7]. Атомы углерода в ОЦК-железе занимают преимущественно октаэдрические поры [8], поэтому при добавлении примеси углерода равновесный параметр решетки ОЦК-железа увеличивается на 0,56 %, и таким образом на один атом железа приходится объем  $11,55 \text{ \AA}^3$ , что хорошо согласуется с данными других работ ( $11,42 \text{ \AA}^3$  [9];  $11,59 \text{ \AA}^3$  [10]). Кроме того, решетка приобретает небольшую тетрагональность  $c/a = 1,01$ , что согласуется с другими данными ( $c/a = 1,019$  [11]). Было получено, что энергия растворения углерода в октапоре составляет  $E_{d1} = 0,69$  эВ, что согласуется как с экспериментом 0,63–0,98 [11], так и с другими работами (0,72 эВ [9], 0,74 эВ [12]). Магнитный момент, приходящийся на атом железа, был равен  $2,23\mu_B$  (увеличивается на  $0,03\mu_B$  по сравнению с магнитным моментом, приходящимся на один атом железа ОЦК-решетки без примеси), а для атома углерода  $-0,14\mu_B$  (знак минус означает, что магнитный момент атома углерода антипараллелен магнитному моменту атомов железа).

В данной работе производилось вычисление энергии связи ванадия с примесью углерода С, которая рассчитывалась по следующей формуле:

$$E_{bin} = [E(\text{Fe}_{53}\text{VC}) - E(\text{Fe}_{54}\text{C})] - [E(\text{Fe}_{53}\text{V}) - E(\text{Fe}_{54})],$$

где  $E(\text{Fe}_{53}\text{V})$  – полная энергия системы, состоящей из 53 атомов железа и атома ванадия;  $E(\text{Fe}_{54})$  – полная энергия системы, состоящей из  $n$  атомов железа;  $E(\text{Fe}_{53}\text{VC})$  – полная энергия системы, состоящей из 53 атомов железа, одного атома углерода и атома ванадия;  $E(\text{Fe}_{54}\text{C})$  – полная энергия системы, состоящей из 54 атомов железа, одного атома углерода С. Это выражение можно трактовать как разницу энергии растворения ванадия в чистом металле и энергии растворения ванадия в системе с примесью. Отрицательное (положительное) значение энергии связи углерода с примесью ванадия означает наличие притяжения (отталкивания) между ними.

Для оценки влияния друг на друга пары примесей (X и Y) энергия растворения каждой из них по отдельности определялась по следующей формуле:

$$E_{d2}(Y) = E(\text{Fe}_{54-m}\text{XY}) - E(\text{Fe}_{54-k}\text{X}) + kE(\text{Fe}) - E(Y), \quad (2)$$

где  $m = 1$  и  $k = 0$  для примеси углерода,  $m = 2$  и  $k = 1$  для примеси ванадия.

При исследовании взаимодействия ванадия с углеродом в ОЦК-решетке железа были рассмотрены первые три окружения для ванадия, когда атом углерода постепенно удаляется от атома V, последовательно занимая позиции 1–3 (рис. 1). Для каждого случая размещения пары V–C выполнялась структурная и объемная оптимизации системы. При этом было обнаружено, что параметр решетки оставался постоянным и равным  $2,851 \text{ \AA}$ .

В табл. 1 представлены магнитные моменты на примесях ванадия (M(V)) и углерода (M(C)), энергии их растворения, а также энергия связи между атомами C–V.

Таблица 1  
Значения энергии растворения углерода в присутствии примеси замещения V, энергия растворения примеси V, энергии связи C–V

№	M(C), $\mu_B$	M(V), $\mu_B$	$E_{d2}(C)$ , эВ	$E_{d2}(V)$ , эВ	$E_{bin}(V-C)$ , эВ
1	-0,08	-0,75	1,19	-0,22	0,50
2	-0,11	-1,16	0,77	-0,63	0,09
3	-0,14	-1,27	0,67	-0,73	0,01

На рис. 2 представлено сравнение результатов моделирования данной работы с имеющимися в литературе данными [13, 14].

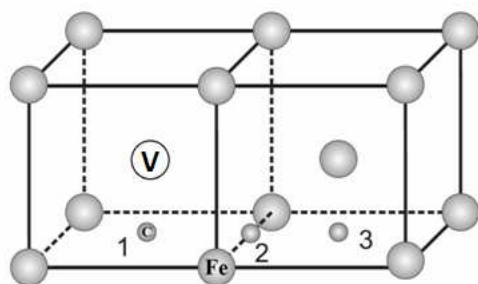


Рис. 1. Схематическое представление конфигурации V–C в ОЦК-железе. Атом углерода занимает октаэдрические позиции 1–3, которые соответствуют первым трем координационным сферам относительно ванадия

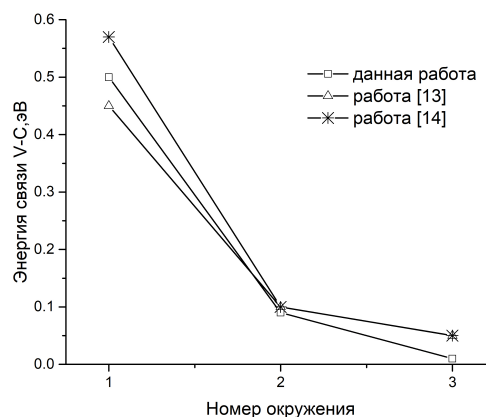


Рис. 2. Сравнение результатов ab initio расчета энергии связи V–C в ОЦК-Fe с данными Бакаева [13] и Лю [14]

Из данных, представленных в табл. 1, видно, что при сближении атомов углерода и ванадия энергия их связи существенно увеличивается. При этом она имеет положительный знак, что говорит об их сильном отталкивании при нахождении в ближайшем окружении друг друга. Это разительно отличается от случая аустенитной фазы, где термодинамические расчеты приводят к выводу о довольно сильном притяжении между C и V в ближайшем окружении [1, 15]. Вероятнее всего, природа этого отталкивания связана с магнитными эффектами. Действительно, магнитные моменты на атомах C и V также резко уменьшаются при их сближении, оставаясь антипараллельными моменту матрицы железа. Необходимо отметить, что в 3-м окружении относительно углерода магнитные моменты и на C, и на V практически совпадают со значениями моментов одиночных примесей углерода и ванадия в ОЦК-железе. Таким образом, основное состояние одиночной примеси соответствует наличию у нее определённого магнитного момента. При их сближении магнитные моменты значительно снижаются, что приводит к возрастанию их общей энергии, т. е. к возникновению положительной энергии связи. Тогда становятся понятными изменения знака взаимодействия C–V в аустените, где магнитные эффекты отсутствуют. Таким образом, наши расчеты показывают, что в ОЦК-фазе железа примесь ванадия активно выдавливает углерод из своего ближайшего окружения. Этот результат указывает, что образование карбида ванадия внутри бездефектной фазы ОЦК-Fe невозможно. Следствием этого обстоятельства является повышение энергии растворения ванадия и углерода в ближайших окружениях друг друга. Таким образом, ванадий уменьшает растворимость углерода в железе. Результаты энергии связи, согласно рис. 2, хорошо согласуются с данными других исследований [13, 14].

### Моделирование энергии межфазной границы ОЦК-железа и карбида ванадия

Исследуемая межфазная граница формируется между кристаллами Fe(100) и VC(100) в так называемом ориентационном соотношении Бейкера–Наттинга, которое часто наблюдается экспериментально для выделений карбидов с кристаллической структурой B1 (NaCl) [16], внедренных в ферритовую ОЦК-матрицу. Это ориентационное соотношение выражается как

$$(001)Fe/(001)VC \text{ и } [100]Fe||[110]VC.$$

В данном ориентировочном соотношении различные параметры решеток двух фаз создают небольшие несоответствия, которые при выделениях размером более 10 нм компенсируются дислокациями. Более того, экспериментальные наблюдения позволяют предположить, что для микровыделений возможен преимущественно когерентный интерфейс [17, 18]. По этим причинам будем рассматривать только когерентные границы.

Важно отметить, что существуют три возможных вида границы, отличающиеся сдвигом кристаллов Fe и VC вдоль границы: конфигурация, в которой атомы Fe расположены прямо над атомами C; конфигурация, в которой атомы Fe расположены прямо над атомами V; и переходная конфигурация, в которой атомы Fe имеют в качестве ближайших соседей два атома C и два атома V (рис. 3). Верхняя и нижняя панели представляют плоскости интерфейса (001)Fe и (001)VC соответственно. Наиболее стабильной является конфигурация, в которой атомы Fe расположены прямо над атомами C [2].

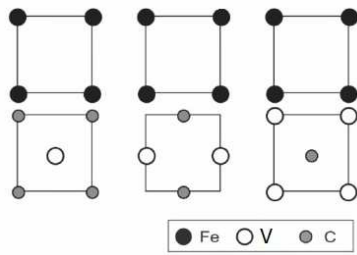


Рис. 3. Схематическое расположение атомов на межфазной границе Fe–VC

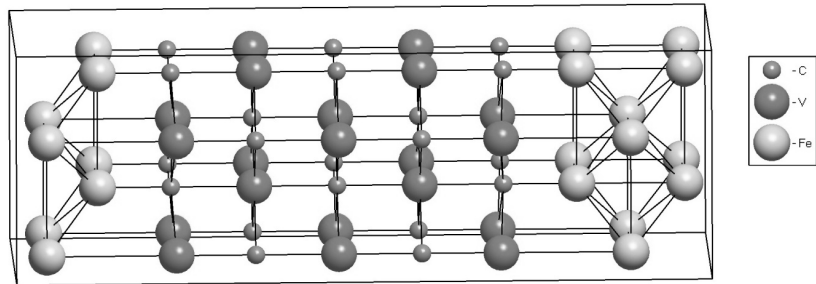


Рис. 4. Схематическое изображение структуры Fe–VC

По этой причине нами была исследована именно данная конфигурация, представленная на рис. 4. Данная структура содержит пять слоев феррита и пять слоев карбида ванадия.

Для того чтобы определить энергетические характеристики выделений карбида ванадия в железе Fe–VC, были найдены равновесные параметры решеток элементарных фаз. Полученные результаты приведены в табл. 2.

Таблица 2  
Сравнение полученных нами значений равновесных параметров решетки ( $a$ ) и модуля упругости ( $B$ ) для эталонных структур ОЦК-железа, ОЦК-ванадия, углерода (графит), карбида ванадия VC в сравнении с результатами других авторов

Структура	$a$ , Å	$B$ , ГПа
VC	4,158, 4,160 [16], 4,155 [2]	303, 311[16]
V	2,998, 2,996 [2]	178
C	2,462, 6,656; 2,468, 8,704 [2]	–
Fe	2,831, 2,835 [16], 2,836 [2]	174,8, 175 [16]

Из табл. 2 видно, что наши результаты находятся в хорошем согласии с другими работами. После этого была рассчитана энтальпия образования карбида ванадия как разность энергий между полной энергией объемного VC и суммой энергий составляющих его элементов:

$$H_f(VC) = \frac{E_{VC} - mE_V - mE_C}{2m}, \quad (3)$$

где  $E_{VC}$  – полная энергия VC из  $m$  атомов ванадия и  $m$  атомов углерода, а  $E_V$  и  $E_C$  – полные энергии на атом объемных кристаллов V и C соответственно. Было получено, что это значение равно  $-0,437$  эВ или  $-42,13$  кДж/моль, что находится в согласии с другими результатами [2, 19], а также с экспериментальным значением энтальпии образования карбида ванадия, близким к  $-50$  кДж/моль [20]. Отрицательное значение указывает на то, что образование объемного VC энергетически более выгодно по сравнению с чистыми элементами. Отметим, что при нулевом давлении и температуре полная энергия и энтальпия эквивалентны.

Затем структура представленной на рис. 4 суперячейки, содержащей межфазную границу феррит – карбид ванадия, была предварительно оптимизирована для получения минимально возможной полной энергии. При этом были получены значения параметров суперячейки  $a = 5,82853$ ,  $b = 17,44302$ ,  $c = 5,88740$  Å.

Энергия формирования межфазной границы Fe–VC определялась соотношением

$$\gamma_{Fe/VC} = \frac{E_{Fe/VC} - E_{Fe} - E_{VC}}{2S}, \quad (4)$$

где  $E_{Fe/VC}$  – полная энергия системы содержащей межфазную границу;  $E_{Fe}$  – полная энергия объемного кристалла феррита;  $E_{VC}$  – полная энергия объемного кристалла VC;  $S$  – площадь границы. Было получено, что энергия формирования межфазной границы феррит-карбид ванадия равна  $-0,083$  Дж/м<sup>2</sup>, что находится в хорошем согласии с другими результатами [2, 16]. Отрицательное значение указывает, что образование границы энергетически более выгодно по сравнению с объемными состояниями карбида ванадия и феррита. Соответственно, из этого следует, что образующиеся межатомные связи на границе сильнее, чем в соответствующих объемных фазах. Сле-



дует отметить, что ещё Гиббс указывал на необходимость положительного знака поверхностной энергии границы раздела жидкость–жидкость и жидкость–твердое тело для её устойчивости. Обычно предполагается, что отрицательное значение поверхностной энергии приводит к неограниченному увеличению площади границы. Но в последнее время появились примеры существования отрицательной поверхностной энергии, приводящие к образованию метастабильных или даже стабильных дисперсных структур [20]. Вполне возможно, что отрицательный знак поверхностной энергии является причиной давно отмеченной практиками исключительной мелкозернистости выделений карбида ванадия на границах ферритной фазы [1]. Однако полученное нами значение поверхностной энергии невелико по модулю. Поэтому с ростом микровыделений когерентный интерфейс из-за несоответствия параметров решеток феррита и карбида переходит в полуккогерентный, что приводит к появлению дополнительного положительного вклада упругой энергии. Начиная с некоторого размера выделений VC отрицательный знак поверхностной энергии изменится на положительный и рост размера выделений остановится.

## Выводы

Основные выводы статьи сводятся к следующему. Установлено, что в ферритной ОЦК-фазе примесь ванадия активно выдавливает углерод из своего ближайшего окружения. Причина такого отталкивания имеет магнитную природу. Это обстоятельство показывает, что образование карбида ванадия внутри бездефектной ферритной фазы невозможно. Поэтому наблюдаемые выделения VC внутри феррита обязательно связаны с дефектами структуры решетки. Расчетное значение энергии образования карбида ванадия  $-42,1$  кДж/моль близко к CALPHAD-значению  $-50$  кДж/моль, что свидетельствует о достаточной достоверности термодинамического описания карбида ванадия в рамках данного пакета. Полученная при моделировании небольшая величина энергии формирования межфазной границы феррит–карбид ванадия ( $-0,083$  Дж/м<sup>2</sup>) позволяет объяснить хорошо известную мелкозернистость выделений карбида ванадия.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-10039.*

## Литература

1. Голиков, И.Н. Ванадий в стали / И.Н. Голиков, М.И. Гольдштейн, И.И. Мурзин. – М.: Металлургия, 1968. – 291 с.
2. Density Functional Theory Calculations of Iron-Vanadium Carbide Interfaces and the Effect of Hydrogen / S.E. Restrepo, D. Di Stefano, M. Mrovec, A.T. Paxton // International Journal of Hydrogen Energy. – 2020. – Vol. 45, Iss. 3. – P. 2382–2389.
3. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Physical Review Letters. – 1996. – Vol. 77, Iss. 18. – P. 3865.
4. Kresse, G. Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set / G. Kresse, J. Furthmüller // Physical Review B. – 1996. – Vol. 54, Iss. 16. – P. 11169.
5. Olsson, P. Ab Initio Study of Solute Transition-Metal Interactions with Point Defects in BCC Fe / P. Olsson, T.P.C. Klaver, C. Domain // Physical Review B. – 2010. – Vol. 81, Iss. 5. – P. 054102.
6. Ludsteck A. Bestimmung der Änderung der Gitterkonstanten und des Anisotropen Debye–Waller-Faktors von Graphit Mittels Neutronenbeugung im Temperaturbereich von 25 bis 1850° C / A. Ludsteck // Acta Crystallographica Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography. – 1972. – Vol. 28, Iss. 1. – P. 59–65.
7. Kern, G. Ab Initio Molecular-Dynamics Studies of the Graphitization of Flat and Stepped Diamond (111) Surfaces / G. Kern, J. Hafner // Physical Review B. – 1998. – Vol. 58, Iss. 19. – P. 13167.
8. Jack, D.H. Invited Review: Carbides and Nitrides in Steel / D.H. Jack, K.H. Jack // Materials Science and Engineering. – 1973. – Vol. 11, Iss. 1. – P. 1–27.
9. Solubility of Carbon in  $\alpha$ -Iron under Volumetric Strain and Close to the  $\Sigma 5(310)[001]$  Grain Boundary: Comparison of DFT and Empirical Potential Methods / E. Hristova, R. Janisch, R. Drautz, A. Hartmaier // Computational Materials Science. – 2011. – Vol. 50, Iss. 3. – P. 1088–1096.
10. Hatcher, N. DFT-Based Tight-Binding Modeling of Iron-Carbon / N. Hatcher, G.K.H. Madsen, R. Drautz // Physical Review B. – 2012. – Vol. 86, Iss. 15. – P. 155115.
11. Schlirrmann, E. Carburisation Equilibria of Alpha-Iron with Methane-Hydrogen Mixtures in the 600–800 °C Range / E. Schlirrmann, T. Schmidt, F. Tillmann // Giesserei-Forschung. – 1967. – Vol. 19, Iss. 1. – P. 35–41.

12. Jiang, D.E., Carter, E.A. Carbon Dissolution and Diffusion in Ferrite and Austenite from First Principles / D.E. Jiang, E.A. Carter // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 67, Iss. 21. – P. 214103.
13. Interaction of Minor Alloying Elements of High-Cr Ferritic Steels with Lattice Defects: An Ab Initio Study / A. Bakaev, D. Terentyev, G. Bonny *et al.* // *Journal of Nuclear Materials*. – 2014. – Vol. 444, Iss. 1-3. – P. 237–246.
14. Effects of Dilute Substitutional Solutes on Interstitial Carbon in  $\alpha$ -Fe: Interactions and Associated Carbon Diffusion from First-Principles Calculations / P. Liu, W. Xing, X. Cheng *et al.* // *Physical Review B*. – 2014. – Vol. 90, Iss. 2. – P. 024103.
15. Lee, B.J. A Thermodynamic Study on the Fe-V-C System / B.J. Lee, D.N. Lee // *Calphad*. – 1991. – Vol. 15, Iss. 3. – P. 293–306.
16. Fors, D.H.R. Theoretical Study of Interface Structure and Energetics in Semicoherent Fe(001)/MX(001) Systems (M = Sc, Ti, V, Cr, Zr, Nb, Hf, Ta; X = C or N) / D.H.R. Fors, G. Wahnström // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 82, Iss.19. – P. 195410.
17. Szost, B.A. Hydrogen-Trapping Mechanisms in Nanostructured Steels/ B.A.Szost, R.H.Vegter, P.E.J. Rivera-Díaz-del Castillo // *Metall Mater Trans A*. – 2013. – Vol.44, Iss. 4. – P. 4542–4550.
18. Takahashi, J. Origin of Hydrogen Trapping Site in Vanadium Carbide Precipitation / J.Takahashi, K. Kawakami, Y. Kobayashi // *Acta Mater*. – 2018. – Vol. 153. – P. 193–204.
19. Electronic Structures Mechanical and Thermal Properties of V–C Binary Compounds / X. Chong, Y. Jiang, R. Zhou, J. Feng // *RSC Advances*. – 2014. – Vol. 4, Iss. 85. – P. 44959–44971.
20. Fernández Guillermet, A Cohesive Properties and Vibrational Entropy of 3d-Transition Metal Carbides / A. Fernández Guillermet, G. Grimvall // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 1992. – Vol. 53, Iss. 1. – P. 105–125.
21. Frolov, T. Stable Nanocolloidal Structures in Metallic Systems / T. Frolov, Y. Mishin // *Physical Review Letters*. – 2010. – Vol. 104, Iss. 5. – P. 055701.

*Поступила в редакцию 24 ноября 2024 г.*

#### **Сведения об авторах**

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

Верховых Анастасия Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: avverkhovykh@susu.ru.

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2025, vol. 17, no. 1, pp. 53–60*

---

DOI: 10.14529/mmph250107

## **THE COMPARATIVE RESULTS OF THE THERMODYNAMIC AND FIRST-PRINCIPLE MODELING OF DISORDERED SOLUTIONS OF THE Fe–V SYSTEM**

**A.A. Mirzoev, A.V. Verkhovykh**

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

**Abstract.** Experimental studies have shown that the precipitation of vanadium carbide significantly increases the hardness of steels. However, little is known about the process itself. The article presents the calculations of a number of energy parameters within the framework of density functional theory. This allows us to understand the formation of vanadium carbides and to describe the energy of their boundary with the ferrite phase.

**Keywords:** *ab initio modeling; vanadium carbide; interphase boundary; solution energy; binding energy.*

### References

1. Golikov I.N., Goldstein M.I., Murzin I.I. *Vanadiy v stali* (Vanadium in Steel). Moscow, Metallurgy Publ., 1968, 291 p. (in Russ.).
2. Restrepo S.E., Di Stefano D., Mrovec M., Paxton A.T. Density Functional Theory Calculations of Iron-Vanadium Carbide Interfaces and the Effect of Hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020, Vol. 45, Iss. 3, pp. 2382–2389. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2019.11.102.
3. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 1996, Vol. 77, Iss. 18, p. 3865. [Erratum *Phys. Rev. Lett.*, 1997, vol. 78, p. 1396] DOI: 10.1103/physrevlett.77.3865.
4. Kresse G., Furthmüller J. Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set. *Physical Review B*, 1996, Vol. 54, Iss. 16, p. 11169. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169.
5. Olsson P., Klaver T.P.C., Domain C. Ab Initio Study of Solute Transition-Metal Interactions with Point Defects in BCC Fe. *Physical Review B*, 2010, Vol. 81, Iss. 5, p. 054102. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.054102.
6. Ludsteck A. Bestimmung der Änderung der Gitterkonstanten und des Anisotropen Debye-Waller-Faktors von Graphit Mittels Neutronenbeugung im Temperaturbereich von 25 bis 1850° C. *Acta Crystallographica Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography*, 1972, Vol. 28, Iss. 1, pp. 59–65. DOI: 10.1107/s0567739472000130.
7. Kern G., Hafner J. Ab Initio Molecular-Dynamics Studies of the Graphitization of Flat and Stepped Diamond (111) Surfaces. *Physical Review B*, 1998, Vol. 58, Iss. 19, p. 13167. DOI: 10.1103/PhysRevB.58.13167.
8. Jack D.H., Jack K.H. Invited Review: Carbides and Nitrides in Steel. *Materials Science and Engineering*, 1973, Vol. 11, Iss. 1, pp. 1–27. DOI: 10.1016/0025-5416(73)90055-4.
9. Hristova E., Janisch R., Drautz R., Hartmaier A. Solubility of Carbon in  $\alpha$ -Iron under Volumetric Strain and Close to the  $\Sigma 5(310)[001]$  Grain Boundary: Comparison of DFT and Empirical Potential Methods. *Computational Materials Science*, 2011, Vol. 50, Iss. 3, pp. 1088–1096. DOI: 10.1016/j.commatsci.2010.11.006.
10. Hatcher N., Madsen G.K.H., Drautz R. DFT-Based Tight-Binding Modeling of Iron-Carbon. *Physical Review B*, 2012, Vol. 86, Iss. 15, p. 155115. DOI: 10.1103/physrevb.86.155115.
11. Schlirrmann, E., Schmidt, T., Tillmann, F. Carburisation Equilibria of Alpha-Iron with Methane-Hydrogen Mixtures in the 600–800°C Range. *Giesserei-Forschung*, 1967, Vol. 19, Iss. 1, pp. 35–41.
12. Jiang, D.E., Carter, E.A. Carbon Dissolution and Diffusion in Ferrite and Austenite from First Principles. *Physical Review B*, 2003, Vol. 67, Iss. 21, p. 214103. DOI: 10.1103/PhysRevB.67.214103
13. Bakaev A., Terentyev D., Bonny G., Klaver T.P.C., Olsson P., Van Neck D. Interaction of Minor Alloying Elements of High-Cr Ferritic Steels with Lattice Defects: An ab initio study. *Journal of Nuclear Materials*, 2014, Vol. 444, Iss. 1-3, pp. 237–246.
14. Liu P., Xing W., Cheng X., Li D., Li Y., Chen X.Q. Effects of Dilute Substitutional Solutes on Interstitial Carbon in  $\alpha$ -Fe: Interactions and Associated Carbon Diffusion from First-Principles Calculations. *Physical Review B*, 2014, Vol. 90, Iss. 2, P. 024103. DOI: 10.1103/PhysRevB.90.024103.
15. Lee B.J., Lee D.N. A Thermodynamic Study on the Fe-V-C System. *Calphad*, 1991, Vol. 15, Iss. 3, pp. 293–306. DOI: 10.1016/0364-5916(91)90007-7.
16. Fors D.H.R., Wahnström G. Theoretical Study of Interface Structure and Energetics in Semicohesive Fe(001)/MX(001) Systems (M = Sc, Ti, V, Cr, Zr, Nb, Hf, Ta; X = C or N). *Physical Review B*, 2010, Vol. 82, Iss.19, p. 195410. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.195410.
17. Szost B.A., Vegter R.H., Rivera-Díaz-del Castillo P.E.J. Hydrogen-Trapping Mechanisms in Nanostructured Steels. *Metall Mater Trans A*, 2013, Vol. 44, Iss.4, pp.4542–4550. DOI: 10.1007/s11661-013-1795-7.
18. Takahashi J., Kawakami K., Kobayashi Y. Origin of Hydrogen Trapping Site in Vanadium Carbide Precipitation. *Acta Materialia*, 2018, Vol. 153, pp. 193–204. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.05.003
19. Chong X., Jiang Y., Zhou R., Feng J. Electronic Structures Mechanical and Thermal Properties of V-C Binary Compounds. *RSC Advances*, 2014, Vol. 4, Iss. 85, pp. 44959–44971. DOI: 10.1039/c4ra07543a.

20. Fernández Guillermet A., Grimvall G. Cohesive Properties and Vibrational Entropy of 3d-Transition Metal Carbides. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1992, Vol. 53, Iss. 1, pp. 105–125. DOI: 10.1016/0022-3697(92)90019-A.

21. Frolov T., Mishin Y. Stable Nanocolloidal Structures in Metallic Systems. *Physical Review Letters*, 2010, Vol. 104, Iss. 5, p. 055701. DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.055701.

*Received November 24, 2024*

### Information about the authors

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

Verkhovykh Anastasiia Vladimirovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Physics of Nanoscale System Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: avverkhovykh@susu.ru.

## ЭВОЛЮЦИЯ И РАЗРУШЕНИЕ ЛИНИИ РОСТА КРИСТАЛЛА В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ РАСПЛАВЕ

**О.Н. Шабловский**

Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, г. Гомель,  
Республика Беларусь  
E-mail: shablovsky-on@yandex.by

**Аннотация.** Изучена макроскопическая форма линии роста кристалла в переохлажденном расплаве чистого вещества. Центральным пунктом проведенного анализа является учет пространственной неоднородности переохлаждения на фазовой границе кристаллизации. Показано, что существует пороговое значение параметра неоднородности, и этому порогу соответствует периодическая по поперечной направлению роста координате ячеистая структура фронта кристаллизации. Отношение периода структуры к радиусу кривизны отдельной ячейки равно числу  $\pi$ . По обе стороны порога вершина линии роста имеет клиновидную форму, а при переходе через порог наблюдаются бифуркативные ситуации, обусловленные тем, что ячейки являются промежуточной структурой между плоским фронтом и дендритами. Анализ выполнен для случая, когда малой величиной первого порядка малости является угол между нормалью и осью симметрии линии роста. В рамках такого приближения уравнение роста имеет вид уравнения Бюргера. Известным в литературе точным решением этого уравнения дана новая физическая интерпретация, позволившая рассмотреть следующие процессы: волна возмущения, вызванного разрывом кривизны; волна разрушения – предвестник расщепления вершины; излом – сильный разрыв угла заострения; опрокидывание линии роста – предвестник втягивания внутрь носика вершины. Выполнен сопоставительный анализ устойчивого и неустойчивого изломов линии роста. Обнаружено, что различия между затуплением вершины за изломом и опрокидыванием обусловлены именно направлением перехода через пороговое значение параметра неоднородности. Даны примеры расчетов, иллюстрирующие свойства скорости волн возмущения и разрушения.

*Ключевые слова:* высокоскоростная кристаллизация; ячеистая структура; форма дендрита; расщепление вершины; морфологическая неустойчивость.

**Введение.** В задаче о росте кристалла из однокомпонентного чистого переохлажденного расплава важное место занимают вопросы о свойствах ячеистой и дендритной структур и о форме вершины дендрита [1–3]. В данной работе рассматривается макроскопическая форма линии роста кристалла и основное внимание обращено на морфологическую устойчивость/неустойчивость ее вершины. Известно [1–3], что ячейки являются промежуточной структурой между плоским фронтом и дендритами. Это обстоятельство существенно при изучении закономерностей формирования и разрушения линии роста. Дендритный режим наблюдается при достаточно больших переохлаждениях  $\Delta T$ : например, для никеля при  $\Delta T > 57$  К. Боковые ветви дендрита инициируются возмущениями кривизны фазовой границы кристаллизации (ФГК): изломами, изгибами и складками на поверхности роста [1–6].

Эти фундаментальные задачи служат теоретической основой при разработке современных технологий кристаллизации веществ в неравновесных условиях [7, 8]. При больших переохлаждениях расплава тепловые процессы в твердой фазе обладают отчетливо выраженными локально-неравновесными свойствами, поэтому применяем модель Максвелла [9], учитывающую релаксацию теплового потока:

$$\mathbf{q} + \gamma(\partial \mathbf{q} / \partial t) = -\lambda \text{grad } T.$$

Уравнение энергии имеет вид

$$c(\partial T / \partial t) + \text{div } \mathbf{q} = 0.$$

Здесь  $T$  – температура;  $\mathbf{q}$  – вектор удельного теплового потока;  $c = \rho c_p$  – объемная теплоемкость;  $\rho$  – плотность;  $t$  – время;  $\gamma$  – время релаксации теплового потока. Далее рассматриваем двухмерную задачу на плоскости декартовых координат  $(x, y)$ . Моделируем ФГК линией сильного разрыва теплового поля. Применяем известный алгоритм [10] и выводим динамическое условие совместности на этом разрыве как следствие интегрального закона сохранения энергии. Отличительная черта изучаемых решений – учет пространственной неоднородности переохлаждения на фронте кристаллизации. Детальный анализ этого подхода к исследованию свойств линии роста представлен в [11, 12].

Цель настоящей работы – определить закономерности влияния конечного возмущения кривизны на устойчивость/неустойчивость линии роста в окрестности ее вершины.

**Уравнение роста.** Двухмерная фазовая граница (линия сильного разрыва)  $x - F(y, t) = 0$  перемещается со скоростью  $N$  справа налево:  $N = N\mathbf{n}$ ,  $N < 0$  (рис. 1). Координатная ось  $x$  направлена вдоль оси симметрии в сторону твердой фазы;  $y$  – поперечная декартова координата. Внутренняя нормаль  $\mathbf{n}$  границы образует угол  $\theta$  с осью  $x$ :  $\cos \theta = 1/G$ ,  $G = (1 + (\partial F/\partial y)^2)^{1/2}$ . Отсчет угла  $\theta$  выполняется от  $\mathbf{n}$  в сторону оси  $x$ . Угол  $\theta_1 = (\pi/2) - \theta$  характеризует заострение линии роста и отсчитывается от оси  $x$  тоже против хода часовой стрелки (см. рис. 1). Возрастание/убывание с течением времени угла  $\theta_1$  относится к режимам затупления/заострения линии роста.

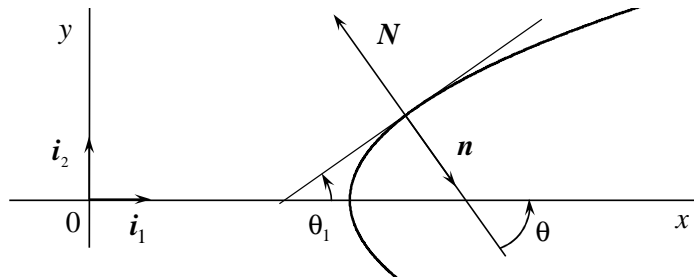


Рис. 1. Геометрические параметры линии роста

Замкнутая система трех граничных условий на фронте кристаллизации имеет следующий вид. Баланс энергии:

$$q_j = N(c_j T_j - c_* T_*) + NT_c(c_* - c_j) - Q, \quad Q = L \left( N + \gamma_j \frac{\partial N}{\partial t} \right), \quad (1)$$

где звездочкой отмечены параметры расплава, который находится в однородном отрелаксированном тепловом состоянии:  $q_* \equiv 0$ ,  $T_* \equiv \text{const}$ ; индекс  $j$  относится к функциям, вычисленным на правой стороне сильного разрыва, в твердой фазе;  $q_j$  – нормальная к границе составляющая вектора теплового потока;  $T_j$  – температура кристалла;  $T_c$  – равновесная температура кристаллизации;  $L$  – теплота фазового перехода единицы объема вещества. Теплофизические свойства расплава и кристалла считаем постоянными по обе стороны сформировавшегося сильного разрыва.

Кинетическое соотношение

$$|N| = \mu(T_e - T_j), \quad T_e = T_c [1 - (UK/L)] \quad (2)$$

определяет нормальный механизм роста из расплава. Здесь  $\mu$  – кинетический коэффициент роста;  $U$  – поверхностная энергия границы раздела фаз;  $T_e$  – температура равновесия между твердой и жидкой фазами; средняя кривизна границы равна  $K = (\partial^2 F/\partial y^2)/G^3$ .

Зависимость переохлаждения ФГК от угловой координаты  $\theta$  постулируем в виде

$$T_c - T_j = (\cos \theta)^\delta B, \quad B, \delta - \text{const}, \quad (3)$$

который обусловлен отклонением температуры кристалла  $T_j$  от равновесного значения  $T_c$ . Здесь  $B = T_c - T_j(\theta = 0) > 0$ ; положительный параметр  $\delta$  характеризует пространственную неоднородность переохлаждения  $T_c - T_j$ . Существенно, что правая часть выражения (3) неявным образом зависит от кривизны  $K = \partial\theta/\partial s$ , где  $s$  – дуговая координата, которая отсчитывается от вершины вдоль линии роста. Дополнительные сведения, относящиеся к анализу формулы (3), имеются в

[11]. Выражения (1)–(3) составляют замкнутую систему уравнений для трех неизвестных функций  $N$ ,  $T_j$ ,  $q_j$ . Уравнение роста, определяющее зависимость  $F = F(y, t)$ , получаем из (2), (3) с учетом формулы  $N = (\partial F / \partial t) G^{-1} < 0$ :

$$\varphi \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial^2 F / \partial y^2}{1 + (\partial F / \partial y)^2} - \alpha B \left[ 1 + \left( \frac{\partial F}{\partial y} \right)^2 \right]^{(1-\delta)/2}. \quad (4)$$

$$\alpha = L / (UT_c), \quad \varphi = \alpha / \mu.$$

Безразмерные и размерные уравнения записываем в одинаковой форме, взяв следующее соответствие между безразмерными и размерными величинами:  $x \rightarrow (x/x_b)$ ,  $y \rightarrow (y/y_b)$ ,  $T \rightarrow (T/T_b)$ ,  $\mu B \rightarrow (\mu B)/|N_b|$ ,  $B \rightarrow (B/T_b)$ ,  $\varphi \rightarrow \varphi y_b |N_b|$ ,  $\alpha \rightarrow \alpha y_b T_b$ ,  $x_b = y_b = |N_b| t_b$ . Нижним индексом  $b$  отмечены масштабы величин, применяемые при обезразмеривании;  $|N_b|$  – масштаб модуля скорости ФГК.

Ясно, что  $\partial F / \partial y = \operatorname{tg} \theta$ , поэтому (4) можно записать в виде

$$\varphi \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial \theta}{\partial y} - \alpha B [\cos \theta]^{\delta-1}. \quad (5)$$

Модуль скорости перемещения линии роста и ее кривизна выглядят так:

$$-N \equiv N_m = \mu \left[ (\cos \theta)^\delta B - \frac{1}{\alpha} \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial y} \right], \quad K = \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial y}. \quad (6)$$

**Ячеистая периодическая структура.** Уравнение (4) при  $\delta = 1$  имеет точное решение:

$$F(y, t) = A_1 t + A_2(y), \quad A_1 \equiv \operatorname{const} < 0;$$

$$A \equiv \frac{dA_2}{dy} = \operatorname{tg}(y' + \pi n_0), \quad y' = y \varphi (\mu B + A_1);$$

$$A_2(y) = \left[ \varphi (\mu B + A_1) \right]^{-1} \ln \left| \cos(y' + \pi n_0) \right|^{-1}; \quad n_0 = 0, 1, 2, \dots$$

$$0 < (-A_1) < \mu B; \quad N(\theta) = A_1 \cos \theta.$$

Это решение представляет собой семейство стационарных контуров, расположенных на интервалах вида:  $n_0 = 0$ ,  $y' \in (-\pi/2, \pi/2)$ ;  $n_0 = 1$ ,  $y' \in (\pi/2, 3\pi/2)$  и т. д. Вершины этих контуров ( $A = 0$ ,  $A_2 = 0$ ) находятся в точках  $y' = \pi n_0$ , а сами контуры смыкаются друг с другом при  $x \rightarrow \infty$  (рис. 2). Каждая ячейка такой периодической структуры имеет конечные размеры по отношению к координате  $y$ . А именно: период  $y_c$  структуры равен

$$y_c = \pi / K(\theta = 0), \quad (7)$$

где  $K(\theta = 0) = \varphi [\mu B + N(\theta = 0)]$  есть кривизна вершины отдельной ячейки.

Дальнейшее рассмотрение уравнения роста (5) – это построение и анализ его решений в конечных левой и правой окрестностях значения  $\delta = 1$ . Будут даны примеры бифуркативных ситуаций, относящихся к переходу через порог  $\delta = 1$ . Полученные аналитические результаты показывают, что по обе стороны этого порога вершина линии роста имеет клиновидную форму:  $y = 0$ ,  $\theta > 0$ ,  $\partial \theta / \partial y > 0$ . Вместе с тем заострение исходной клиновидной вершины ассоциируется с начальной стадией перехода к игольчатой форме дендрита; затупление означает переход к плоскому фронту.

**Уравнение Бюргера.** Продифференцировав обе части уравнения (5) по  $y$ , получаем дифференциальное следствие уравнения роста:

$$\varphi \frac{\partial \theta}{\partial t} = \cos^2 \theta \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \alpha B (\delta - 1) (\cos \theta)^\delta \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial y}. \quad (8)$$

Для достаточно малых углов  $\theta$ , а именно: при  $\theta \in [0, \theta_\varepsilon)$ , где  $\theta_\varepsilon$  – малая величина первого порядка малости, считаем приближенно  $\cos^2 \theta \cong 1$ ,  $\sin \theta \cong \theta$ . Например, для углов  $\theta = \pi/180$ ;  $\pi/90$ ;  $\pi/60$  имеем соответственно  $1 - \cos^2 \theta \cong 0,3046 \cdot 10^{-3}$ ;  $1,2179 \cdot 10^{-3}$ ;  $2,7390 \cdot 10^{-3}$ ;  $1 - (\sin \theta / \theta) \cong 0,5074 \cdot 10^{-4}$ ;  $2,0306 \times 10^{-4}$ ;  $4,5685 \times 10^{-4}$ . Следовательно, в малой окрестности  $\theta = 0$  уравнение (8) имеет вид уравнения Бюргера

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{1}{\varphi} \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \beta \theta \frac{\partial \theta}{\partial y}, \quad \beta = \mu B(\delta - 1). \quad (9)$$

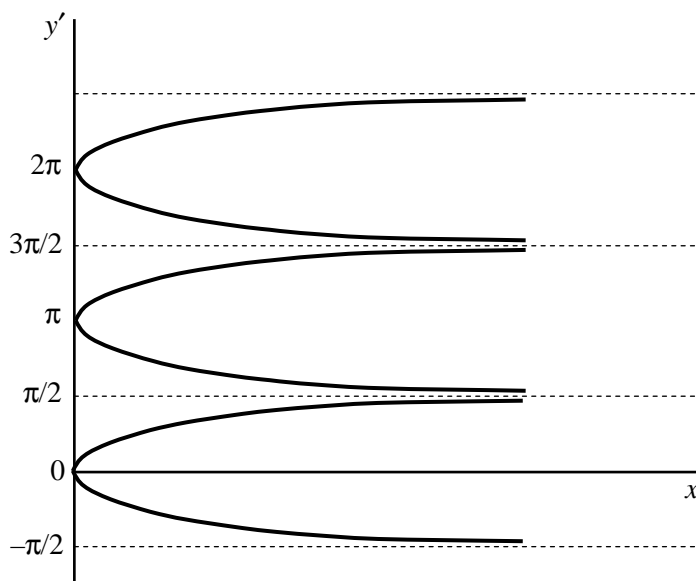


Рис. 2. Ячеистая ( $\delta = 1$ ) периодическая структура фронта кристаллизации

Далее рассматриваем значения  $\delta \in (0, 2]$ . Интересный в физическом отношении случай  $\delta = 3$  (изолированный дендрит игольчатой формы) был изучен в [11,12] на основе уравнения (4). На рис. 3 показано влияние параметра  $\delta$  на качественные свойства переохлаждения  $T_c - T_j$ . Если  $\delta = 1$ , то (9) выглядит как обычное уравнение теплопроводности. По обе стороны порогового значения  $\delta = 1$ , т. е. при  $\beta < 0$  и  $\beta > 0$  конвективный член уравнения Бюргера имеет разные знаки. Следовательно, если мы имеем решение  $\theta = \theta(y, t)$  при  $\beta > 0$ , то формальная замена  $\theta \rightarrow (-\theta)$  дает решение уравнения (9) при  $\beta < 0$ . Вопрос о физическом истолковании этих решений должен быть предметом отдельного анализа. Дело в том, что не для каждого точного решения существует нужное нам физическое содержание. В дальнейшем будем применять следующие варианты записи уравнения (9):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t'} = h \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \theta \frac{\partial \theta}{\partial y}, \quad h = 1/(\beta \varphi), \quad t' = \beta t, \quad \beta \neq 0; \quad (10)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \bar{t}} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{y}^2} + \theta \frac{\partial \theta}{\partial \bar{y}}, \quad \bar{y} = \beta \varphi y, \quad \bar{t} = \beta^2 \varphi t, \quad \beta \neq 0. \quad (11)$$

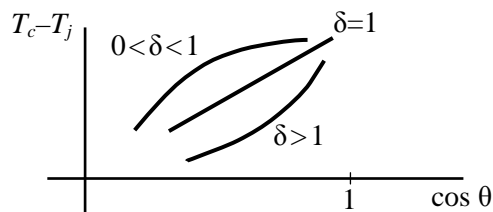


Рис. 3. Качественная зависимость переохлаждения  $T_c - T_j$  от параметра неоднородности  $\delta$

Для  $\beta < 0$  удобно записывать  $\theta = -\Phi$  посредством решения уравнения

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \bar{t}} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{y}^2} + \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \bar{y}}, \quad \bar{y} = -\beta \varphi y, \quad \bar{t} = \beta^2 \varphi t. \quad (12)$$

Согласно (6) имеют физический смысл ( $N_m > 0, K > 0$ ) решения  $\theta = \theta(y, t)$ , удовлетворяющие неравенствам



$$0 \leq \theta < \theta_\varepsilon, \quad 0 < (\partial\theta/\partial y) < \alpha B (\cos \theta)^{\delta-1}.$$

Уравнение (9) можно рассматривать как следствие интегрального закона сохранения [13]

$$\int_C \theta dy + \left( \beta \frac{\theta^2}{2} + \frac{1}{\varphi} \frac{\partial\theta}{\partial y} \right) dt = 0, \quad (13)$$

где  $C$  – произвольный замкнутый контур, ограничивающий область переменных  $(y, t)$ . На основе (13) выводим динамическое условие совместности на сильном разрыве  $y = y_j(t)$ , который перемещается со скоростью  $D = dy_j/dt$ :

$$D\{\theta\} + \left\{ \frac{1}{\varphi} \frac{\partial\theta}{\partial y} + \beta \frac{\theta^2}{2} \right\} = 0. \quad (14)$$

Здесь фигурные скобки – символ скачка функции при переходе через разрыв. В условии (14) допускаются ненулевые скачки  $\{\delta\} \neq 0$ ,  $\{B\} \neq 0$ , т. е.  $\{\beta\} \neq 0$ , а для упрощения формул естественно принять  $\{\mu\} = 0$ . Пример развернутой записи:  $\{\theta\} = \theta_j^{(2)} - \theta_j^{(1)}$ ,  $\theta_j = \theta(y_j, t)$ ;  $\{\beta\} = \beta_2 - \beta_1$  и т. д., где индексы «1» и «2» относятся к состояниям линии роста перед и за скачком  $y = y_j(t)$  соответственно. Ясно, что сильный разрыв  $\{\theta\} \neq 0$  представляет собой излом линии роста. Если  $\{\theta\} = 0$ , то (14) дает непрерывную первую производную  $\{\partial\theta/\partial y\} = 0$  при любом конечном  $D$ .

На разрыве (14) должен быть выполнен закон возрастания энтропии  $\{S\} > 0$ , где

$$S = \int_0^T (c_p/T) dT, \quad \{c_p\} = 0.$$

Условие  $\{S\} = c_p \ln(T_j^{(2)}/T_j^{(1)}) > 0$  дает неравенство  $T_j^{(2)} > T_j^{(1)} > 0$ , которое с учетом (3) приводит к оценке термодинамически допустимых значений параметров задачи:

$$0 < B_2 (\cos \theta_j^{(2)})^{\delta_2} < B_1 (\cos \theta_j^{(1)})^{\delta_1}. \quad (15)$$

Другой самостоятельный объект нашего исследования – волна возмущения  $y = y_m(t)$ , т. е. слабый разрыв функции  $\theta(y, t)$ . Здесь терпит разрыв первого рода первая производная по координате  $\partial\theta/\partial y$ , т. е. имеем разрыв кривизны линии роста, см. (6). Этот слабый разрыв не является следствием (14), его скорость распространения  $dy_m/dt$  определяется единственным образом для фиксированного фона  $\theta = \theta_p(y)$  перед фронтом волны возмущения.

Во всех последующих задачах будем применять такие обозначения:  $\theta_p^0 = \theta_p(y=0)$ ,  $\theta_p^\infty = \theta_p(y \rightarrow \infty)$ ;  $y=0$ ,  $k_p = d\theta_p/dy$ ;  $y=0$ ,  $t=0$ ,  $k_0 = \partial\theta/\partial y$ .

**Волны возмущения и разрушения.** Подстановка Хопфа [14]  $\theta = (2h/u)\partial u/\partial y$  сводит уравнение (10) к уравнению теплопроводности

$$\partial u/\partial t' = h(\partial^2 u/\partial y^2). \quad (16)$$

Решение  $u = u(y, t')$  не зависит от перемены знака параметра  $\beta$ . Этот знак проявляет себя в итоговом выражении  $\theta(y, t')$ . Обсудим два примера, основанных на известных элементарных решениях уравнения теплопроводности.

Пусть  $u = u_1 + u_2$ ,  $u_i = a_i E_i$ ,  $E_i = \exp(hc_i^2 t' - c_i y)$ ,  $i = 1, 2$ ;  $a_i, c_i$  – произвольные постоянные.

Тогда

$$\theta = -2h(c_1 E_1 + a_{21} c_2 E_2)/(E_1 + a_{21} E_2), \quad a_{21} = a_2/a_1. \quad (17)$$

Примем  $\beta > 0$  и получим  $\theta > 0$ , если  $a_{21} > 0$ ,  $c_1 < 0$ ,  $c_2 < 0$ . Волна возмущения  $y_m = mt'$ ,  $m \equiv \text{const} > 0$  распространяется по неоднородному фону

$$\theta_p(y) = -2h(c_1 E_{1p} + c_2 a_{21} E_{2p})/(E_{1p} + a_{21} E_{2p}),$$

$$E_{ip} = \exp\left[\left(\frac{hc_i^2}{m} - c_i\right)y\right], \quad i = 1, 2; \quad y \geq 0;$$

$$\theta_p^0 = \theta(y=0, t'=0), \theta_p^\infty = \theta(y=0, t' \rightarrow \infty) = \theta_\infty.$$

Здесь  $\theta_p^\infty = -2hc_1 = \theta_\infty$ , если  $c_1 < c_2 < 0$  либо  $\theta_p^\infty = -2hc_2 = \theta_\infty$ , если  $c_2 < c_1 < 0$ . В обоих случаях  $0 < \theta_p^0 < \theta_p^\infty = \theta_\infty$ , а также  $(d\theta_p/dy) \rightarrow 0$  при  $y \rightarrow \infty$ . На вершине, в точке  $y = 0$ , имеем в начальный момент времени:

$$y=0, t'=0, k_0 = 2ha_{21}(c_1 - c_2)^2 / (1 + a_{21})^2 ;$$

$$y=0, k_p = k_0 \left[ 1 - \frac{h}{m}(c_1 + c_2) \right] > k_0.$$

Следовательно, волна возмущения инициируется разрывом кривизны  $K$  линии роста. При  $t' > 0$  происходит заострение ( $\theta_\infty > \theta_p^0$ ) исходной клиновидной вершины, т. е. уменьшается угол  $\theta_1$ , рис. 1. Кривизна на вершине клина  $y = +0$  с течением времени уменьшается и стремится к нулю.

Решение (17) содержит произвольные постоянные  $a_{21}, c_1, c_2, m$ . Приведем описание последовательности вычислений при  $c_1 < c_2 < 0$ . Задаем  $\theta_p^0$  и  $\theta_p^\infty > \theta_p^0$ , находим  $c_1 = \theta_p^\infty / (-2h)$ ; применяем вспомогательный параметр  $\delta_0 \in (0,1)$  и определяем  $k_0 = \delta_0 \theta_p^0 (\theta_p^\infty - \theta_p^0) / (2h)$ , а затем выбираем (независимо от  $\theta_p^0, \theta_p^\infty$ ) дробь  $(k_p/k_0) > 1$ . Теперь подсчитываем  $a_{21} = (\theta_p^\infty - \theta_p^0) / (\theta_p^0 \delta_0)$ ,

$$c_2 = [\theta_p^\infty - (1 + a_{21})\theta_p^0] / (2ha_{21}), 2m = [\theta_p^\infty + \theta_p^0(1 - \delta_0)] / [(k_p/k_0) - 1].$$

Именно разрыв производной  $\partial\theta/\partial y$  обеспечивает конечную скорость  $m\beta$  волны возмущения. В предельном случае  $k_p/k_0 = 1 + 0$  волна уходит на бесконечность  $y \rightarrow \infty$  с неограниченно большой скоростью.

Теперь рассмотрим случай, когда в (16)  $u = u_1 + u_2$ ,

$$u_1 = a_1 \exp(hc_1^2 t' + c_1 y) + b_1, u_2 = a_2 \exp(-y\sqrt{\omega/2h}) \cos Y,$$

$$Y = -y\sqrt{\frac{\omega}{2h}} + \omega t' + \frac{\pi}{4}; a_1, b_1, c_1, a_2, \omega - \text{const.}$$

Решение уравнения (10) имеет вид:

$$\theta = 2h \frac{c_{12}E + \sqrt{\frac{\omega}{2h}}(\sin Y - \cos Y)}{E + \cos Y + b_{12} \exp\left(y\sqrt{\frac{\omega}{2h}}\right)}, \quad (18)$$

$$E = \exp\left(hc_1^2 t' + c_1 y + y\sqrt{\frac{\omega}{2h}}\right), a_{21} = a_2/a_1, b_{12} = b_1/a_2, c_{12} = c_1/a_{21}.$$

Волна возмущения  $y_m = mt'$ ,  $m = \sqrt{2h\omega} > 0$  распространяется по неоднородному фону

$$\theta_p(y) = 2hc_{12}E_p / \left[ E_p + \frac{1}{\sqrt{2}} + b_{12} \exp\left(y\sqrt{\frac{\omega}{2h}}\right) \right], E_p(y) = \exp(yh_{11}), h_{11} = \frac{hc_1^2}{m} + c_1 + \sqrt{\frac{\omega}{2h}}.$$

Условия выполнения неравенств  $\theta_p > 0, d\theta_p/dy > 0, y \geq 0$  указаны ниже. Обсудим два интересных варианта решения (18).

Вариант 1 включает в себе следующие связи:  $c_1^2 = a_{21} \omega/h, c_0^2 = 2a_{21}$ , где  $c_1 = c_0 \sqrt{\omega/2h} > 0, a_{21} > 0$ . В этом случае в области определения решения  $y \in [0, y_m], t' \geq 0$  имеем  $\theta(y, t) > 0, \partial\theta/\partial y > 0$  при  $c_0 > 3$ ,

$$b_{12} = \delta_{12} \frac{(c_0/2) + E_0 \sqrt{2}[c_0 + 1 + (c_0^2/2)]}{c_0(E_0 - 1)}, E_0 = \exp(c_0^2 \pi/8),$$

где  $\delta_{12} > 1$  – вспомогательный параметр, определяющий выбор  $b_{12}$ . Параметры фона такие:

$$\theta_p^0/\theta_p^\infty = [1 + (1/\sqrt{2}) + b_{12}]^{-1}, \theta_p^\infty = 2m/c_0,$$

$$\frac{k_p}{k_0} = \frac{(1/\sqrt{2})[(c_0^2/2) + c_0 + 1] + b_{12}[(c_0^2/2) + c_0]}{c_0[b_{12} - (1/2) - (b_{12}/\sqrt{2})]} > 1. \quad (19)$$

Выражение  $k_p$  через  $c_0$ ,  $b_{12}$  здесь не приводится: его нетрудно воспроизвести. Порядок расчетов соответствует обратной задаче, а именно: находим  $k_0$  и  $k_p$ , при которых существует априорно заданная скорость  $m\beta$ . Сначала задаем константу  $c_0 > 3$  и угол  $\theta_p^\infty$ , тем самым фиксируя величину  $m = c_0\theta_p^\infty/2$ . Находим  $\omega = m^2/(2h)$ ; задаем  $\delta_{12} > 1$  и вычисляем  $b_{12}$ ,  $k_p$ ,  $\theta_p^0/\theta_p^\infty$ ,  $k_p/k_0$ , а также  $\theta_p^0$  и  $k_0$ .

В возмущенной области (и, в частности, на вершине  $y = 0$ ) экспонента  $E$  быстро подавляет колебания. Вершина клина заостряется:  $\theta(y = 0, t = 0) < \theta(y = 0, t \rightarrow \infty)$ , и при этом  $K(y = 0, t \rightarrow \infty) = 0$ . Своеобразие данного решения в том, что для каждого фиксированного  $c_0$  дробь  $k_p/k_0$  зависит от  $\theta_p^0/\theta_p^\infty$ , а именно:  $[\partial(k_p/k_0)/\partial(\theta_p^0/\theta_p^\infty)] > 0$ . В этом его отличие от решения (17), в котором эти параметры независимы друг от друга и  $[\partial(m\beta)/\partial(k_p/k_0)] < 0$ . Отметим еще, что при больших  $b_{12} \gg 1$  имеем  $(k_p/k_0) \cong (c_0 + 2)/(2 - \sqrt{2})$ , и тогда для рассматриваемого режима роста скорость  $m\beta$  – монотонно возрастающая функция аргумента  $(k_p/k_0) > 1$ , характеризующего скачок кривизны за волной возмущения. Этот частный пример показывает, что корреляция  $(k_p/k_0) \leftrightarrow (\theta_p^0/\theta_p^\infty)$  может влиять существенным образом на свойства скорости волны возмущения.

Вариант 2 решения (18):  $c_1 = -m/h$ ,  $a_{21} = -1$ . Входные параметры:  $\theta_p^0$ ,  $\theta_p^\infty$ ,  $k_p > 0$ . Последующие оценки и формулы расчета такие:

$$\begin{aligned} & \left[1 + (1/\sqrt{2})\right]^{-1} < (\theta_p^0/\theta_p^\infty) < 1; \quad m = \sqrt{2h\omega}, \\ b_{12} = & \left[ \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \frac{\theta_p^0}{\theta_p^\infty} - 1 \right] \left[1 - \frac{\theta_p^0}{\theta_p^\infty}\right]^{-1}, \quad \omega = \frac{k_p}{2\sqrt{2}} \left[1 - \frac{\theta_p^0}{\theta_p^\infty}\right]^{-2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Для дальнейшего важно, что при  $b_{12} > 0$  за фронтом слабого разрыва  $y_m = mt'$  получаем  $\partial\theta/\partial y < 0$ , т. е. кривизна  $K$  терпит разрыв первого рода, и еще при этом меняет знак «+»  $\rightarrow$  «-». Таким образом, в начальном ( $t = 0$ ) состоянии в точке  $y = 0$  имеем предвестник расщепления клиновидной вершины:  $k_p > 0$ ,  $k_0 < 0$ . В данном случае  $|k_0| = k_p [b_{12}(4 - \sqrt{2}) + 1 + 3\sqrt{2}]/\sqrt{2}$ . Волна  $y_m = mt'$  представляет собой волну разрушения линии роста; ее скорость равна  $\beta\sqrt{2h\omega}$ . Величину  $|k_0|$  можно назвать параметром разрушения. Действительно, если  $k_p = 0$ , то  $|k_0| = 0$ , и разрушение отсутствует. Другой предельный случай: если  $(\theta_p^0/\theta_p^\infty) = 1 - \varepsilon$ , где  $\varepsilon > 0$  малое число, то  $|k_0| \sim k_p\varepsilon^{-1}$ ,  $m \sim \varepsilon^{-1}\sqrt{k_p}$ . Следовательно, при  $\varepsilon \rightarrow 0$  неограниченно большие значения  $|k_0|$  и  $m$  характеризуют начальное ( $t = 0$ ) состояние уже сформировавшегося расщепления клиновидной вершины.

Пример расчета. Для переохлажденного расплава чистого никеля имеем следующие значения теплофизических параметров:  $T_c = 1728$  К;  $L = 2,14 \cdot 10^9$  Дж/м<sup>3</sup>;  $U = 0,38$  Дж/м<sup>2</sup>. Возьмем  $\Delta T = 166$  К;  $|N_b| = 5,3$  м/с;  $B = 1$  К;  $\mu = 9,53$  м/(К с). Обоснование выбора этих числовых значений и необходимые библиографические ссылки приведены в [12]. Такие же входные данные будем применять в последующих иллюстративных расчетах.

Пусть  $\delta = 1,5$ ;  $\theta_p^0/\theta_p^\infty = 0,6$ . В результате получаем  $\varphi = 7,1795 \cdot 10^4$  с/м<sup>2</sup>;  $h = 2,9231 \cdot 10^{-6}$  м;  $\beta = 4,765$  м/с;  $b_{12} = 0,0607$ ;  $\omega = k_p \times 2,2097$  м<sup>-1</sup>;  $(dy_m/dt) = m\beta = \sqrt{k_p} \times 17,1261 \cdot 10^{-3}$  м/с. Отсюда видно, что если, например,  $k_p \sim 10^6$  м<sup>-1</sup>, то  $(dy_m/dt) \sim 17$  м/с.

**Перемена знака  $\beta$  и неавтономность.** Будем рассматривать процессы роста при  $\beta < 0$ . Известное точное решение [15, с. 15] уравнения (12) дает выражение

$$-\Phi \equiv \theta = (\bar{y} - a)/(\bar{t} + b)\beta^2 \varphi t, \quad a < 0, b > 0; a, b - \text{const}. \quad (21)$$

Волна возмущения  $y_m = -m\beta t$ ,  $m > 0$  распространяется по неоднородному фону

$$\begin{aligned} \theta_p(y) &= m(y - \widehat{h}a) / (y + m\widehat{h}b), \quad \widehat{h} = 1/(-\beta\phi), \\ \theta_p^0 &= -a/b, \quad \theta_p^\infty = m, \quad 0 < (\theta_p^0/\theta_p^\infty) < 1, \quad k_0 = 1/(\widehat{h}b), \\ (k_p/k_0) &= 1 - (\theta_p^0/\theta_p^\infty) > 0. \end{aligned}$$

Порядок расчетов соответствует обратной задаче: фиксируем  $m = \theta_p^\infty$ , т. е. указываем скорость волны ( $-m\beta$ ); задаем  $\theta_p^0$  и  $k_p$ . Подсчитываем  $k_p/k_0$  и находим  $k_0$ ; теперь определяем  $b = 1/(\widehat{h}k_0)$  и  $a = -b\theta_p^0$ . Отличия от режима роста  $\beta > 0$ , (18), (19) состоят в следующем: 1)  $\theta_p^0 = \theta(y=0, t=0) > \theta(y=0, t \rightarrow \infty) = 0$ ; при  $t > 0$  угол  $\theta$  уменьшается, угол заострения  $\theta_1$  растет, т. е. происходит затупление клиновидной вершины дендрита,  $K(y=+0, t \rightarrow \infty) = 0$ ; 2) теперь скачок кривизны подчиняется неравенству  $0 < (k_p/k_0) < 1$ , и знак производной  $\partial(k_p/k_0)/\partial(\theta_p^0/\theta_p^\infty) < 0$  меняется на противоположный.

Проанализируем неавтономное решение [15, с.16] уравнения (12):

$$-\Phi \equiv \theta = \frac{-m_1}{m_1^2 \bar{t} + a} \left[ 2 \operatorname{th} \left( \frac{m_1 \widehat{y} + b}{m_1^2 \bar{t} + a} \right) - m_1 \widehat{y} - b \right], \quad a, b, m_1 - \text{const.} \quad (22)$$

Волна возмущения  $y_m = -m_1 m_2 \beta t$ ,  $m_1 > 0$ ,  $m_2 = b/a > 0$  распространяется по неоднородному фону

$$\begin{aligned} \theta_p(y) &= \left[ m_1^2 y + m_1 \widehat{h} (b - 2 \operatorname{th} m_2) \right] / \left[ \widehat{h} a + (y m_1 / m_2) \right] > 0, \quad d\theta_p(y)/dy > 0, \\ a &> [(b - 2 \operatorname{th} m_2)/m_2] > 0, \quad \theta_p^\infty = m_1 m_2, \\ \theta_p^0/\theta_p^\infty &= [(b - 2 \operatorname{th} m_2)/b] < 1, \\ k_p &= \frac{(\theta_p^\infty - \theta_p^0)^2}{2 \widehat{h} m_2 \operatorname{th} m_2}, \quad k_p/k_0 = \left[ \frac{\theta_p^\infty}{\theta_p^\infty - \theta_p^0} - m_2^1 \right]^{-1}, \\ 0 &< (k_p/k_0) < \infty, \quad m_2^1 = 2 m_2 / \operatorname{sh} m_2, \quad m_2^1 \in (0, 1). \end{aligned} \quad (23)$$

Для неавтономного решения (22) значение  $\theta_p^0/\theta_p^\infty$  является пороговым при выборе  $m_2$  или, что то же самое, при выборе  $k_p$ : если

$$(\theta_p^0/\theta_p^\infty) < \left[ m_2^1 / (1 + m_2^1) \right] < 1,$$

то  $k_p/k_0 > 1$ ; если

$$\left[ m_2^1 / (1 + m_2^1) \right] < (\theta_p^0/\theta_p^\infty) < 1,$$

то  $0 < (k_p/k_0) < 1$ . В обоих случаях  $\partial(k_p/k_0)/\partial(\theta_p^0/\theta_p^\infty) < 0$ . После формального перехода  $m_2 \rightarrow \infty$ ,  $m_2^1 \rightarrow 0$  [для конечных значений  $b$  и  $\theta_p^\infty$ ] дробь  $k_p/k_0$  в (23) имеет вид, полученный при анализе автономного решения (21). Порядок расчета соответствует обратной задаче: фиксируем  $m_1 m_2 = \theta_p^\infty$ , т. е. указываем скорость волны ( $-m_1 m_2 \beta$ ); задаем  $\theta_p^0$  и  $m_2$ ; последовательно находим  $m_1$ ,  $b$ ,  $a$ ,  $k_p$ ,  $k_p/k_0$ ,  $k_0$ .

Дадим в дополнение к (18), (20) еще один пример волны разрушения. Для  $\beta < 0$  уравнение (12) имеет точное решение [15, с. 16]:

$$-\Phi \equiv \theta = -m_1 - 2a \operatorname{th} [a(\widehat{y} - m_1 \bar{t}) + b]; \quad a, b, m_1 - \text{const.} \quad (24)$$

Аналог этого решения при  $\beta > 0$  описывает волну возмущения, имеющую такие же свойства, как в случае (17). Зависимости (24) соответствует волна  $y_m = -m\beta t$ , перед фронтом которой располагается неоднородный фон, имеющий положительную кривизну линии роста:

$$\theta_p(y) = m_1 - 2a \operatorname{th} \left[ -a\beta \varphi y \left( 1 - \frac{m_1}{m} \right) + b \right], \quad y \geq y_m,$$

$$d\theta_p/dy > 0; \quad m_1 > m > 0, \quad a < 0, \quad b > 0; \quad 0 < \operatorname{th} b < (\theta_p^0 / \theta_p^\infty) < 1;$$

$$\theta_p^0 = m_1 - 2a \operatorname{th} b, \quad \theta_p^\infty = m_1 - 2a.$$

Вместе с тем за фронтом волны имеем  $\partial\theta/\partial y < 0$ , что означает разрушение линии роста, предшествующее расщеплению клиновидной вершины. В начальном ( $t = 0$ ) состоянии предвестник разрушения находится в точке  $y = 0$ :  $k_p > 0$ ,  $k_0 < 0$ . Основные формулы:

$$\operatorname{th} b = (1 - b_1)/(1 + b_1),$$

$$b_1 = -\beta \varphi (\theta_p^\infty - \theta_p^0)^2 / (2|k_0|), \quad -2a(1 - \operatorname{th} b) = \theta_p^\infty - \theta_p^0,$$

$$2\varphi_1 = -\beta \varphi \left[ (\theta_p^\infty)^2 - (\theta_p^0)^2 \right],$$

$$-\beta \varphi m = |k_0|(\varphi_1 - |k_0|) / [(|k_0| + k_p)(\theta_p^\infty - \theta_p^0)], \quad (25)$$

$$m_1 = \frac{1}{2}(\theta_p^0 + \theta_p^\infty) - \frac{|k_0|}{(\theta_p^\infty - \theta_p^0)(-\beta)\varphi}.$$

Отметим, что здесь выполнено равенство  $k_p/|k_0| = (m_1/m) - 1$ . Решение содержит четыре константы  $a, b, m_1, m$ , которым соответствуют четыре входных параметра  $\theta_p^0, \theta_p^\infty, |k_0|, k_p$ , и при этом оказывается, что значения  $|k_0|$  располагаются в конечном интервале

$$\varphi_1 \delta_\theta < |k_0| < \varphi_1, \quad (26)$$

$$\delta_\theta = (\theta_p^\infty - \theta_p^0) / (\theta_p^\infty + \theta_p^0), \quad \delta_\theta \in (0,1).$$

Неравенства (26) получены как следствия условий  $m_1 > 0, 0 < \operatorname{th} b < 1$ . При фиксированном  $k_p$  функция  $m = m(|k_0|)$  в (25) немонотонная, имеет максимум при

$$|k_0| = |k_0|_m = -k_p + \sqrt{k_p^2 + \varphi_1 k_p}. \quad (27)$$

Цепочка неравенств (26) будет выполнена для параметра разрушения (27), если  $k_p > k_p^1$ ,  $k_p^1 = [\varphi_1 \delta_\theta^2 / (1 - 2\delta_\theta)] > 0$ . Отметим еще, что если  $0 < k_p < (\varphi_1/3)$ , то  $k_p < |k_0|_m$ ; если  $k_p > (\varphi_1/3)$ , то  $k_p > |k_0|_m$ . Для дальнейшего анализа функции (25) и неравенств (26) учтем, что  $k_p = |k_0|_m^2 / (\varphi_1 - 2|k_0|_m)$  и будем пользоваться аргументами  $\varepsilon_m, \eta$  вместо  $|k_0|_m, |k_0|$ :

$$m_1 = \frac{1}{2}(\theta_p^0 + \theta_p^\infty) \frac{\eta(2 - \eta\varepsilon_m)(1 - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m + 2\eta(1 - \varepsilon_m)}, \quad (28)$$

$$(2\delta_\theta/\varepsilon_m) < \eta < (2/\varepsilon_m), \quad \delta_\theta \in (0,1), \quad \varepsilon_m \in (0,1), \quad (29)$$

$$|k_0|_m = \varepsilon_m \varphi_1 / 2, \quad |k_0| = \eta |k_0|_m, \quad k_p = \varphi_1 \varepsilon_m^2 / [4(1 - \varepsilon_m)].$$

Здесь  $\eta = 1$  соответствует точке максимума (27), а  $\varepsilon_m = 1 - 0$  характеризует предельное исходное состояние  $k_p \rightarrow \infty, |k_0|_m \rightarrow (\varphi_1/2)$ , которое остается неподвижным,  $m \rightarrow 0$ . Если  $2\delta_\theta/\varepsilon_m \geq 1$ , то  $\eta = 1$  не входит в физически содержательную область определения функции (28), т. е. имеем монотонное убывание:  $\partial m/\partial \eta < 0$ . Если  $0 < (2\delta_\theta/\varepsilon_m) < 1$ , то функция  $m = m(\eta, \varepsilon_m)$  немонотонная по отношению к аргументу  $\eta$ , она имеет максимум  $m(\eta = 1) = (\theta_p^0 + \theta_p^\infty)(1 - \varepsilon_m)/2$ . Отметим еще, что  $\partial m/\partial \varepsilon_m < 0$ , т. е.  $\partial m/\partial k_p < 0$ . Такое поведение  $m(\eta, \varepsilon_m)$  отличается от режима разрушения  $\beta > 0$ , (18), (20), для которого скорость волны пропорциональна  $\sqrt{k_p}$  и зависит от  $\theta_p^0/\theta_p^\infty$ . Кроме того, решение (28) не содержит вырожденный случай  $k_p = 0, |k_0| = 0$ . Качественные различия между режимами разрушения при  $\beta > 0$  и  $\beta < 0$  дают количественные различия для скорости волны  $dy_m/dt$ . Порядок расчетов: задаем  $\theta_p^0, \theta_p^\infty$ ; находим  $\delta_\theta, \varphi_1$ ; задаем  $\varepsilon_m$  или, что то же самое,  $k_p$ ; находим

$|k_0|_m$  и границы интервала (29), в котором располагается  $\eta$ ; выбор  $\eta$  означает выбор параметра разрушения  $|k_0|$  и влияет на величину  $m$ .

Пример расчета:  $\delta = 0,5$ ;  $\theta_p^0 = 1,8 \times 10^{-2}$ ,  $\theta_p^\infty = 3 \times 10^{-2}$ ;  $\delta_\theta = 0,25$ ;  $\varphi_1 = 98,5260$  1/м;  $\varepsilon_m = 0,8$ ;  $|k_0|_m = 39,4104$  1/м;  $k_p = 78,8208$  1/м;  $0,625 < \eta < 2,5$ ; если  $\eta = 1$ , то  $dy_m/dt = (-m\beta) = 2,2872 \cdot 10^{-2}$  м/с. Для сравнения изменим только один входной параметр: пусть  $\varepsilon_m = 0,1$ . Тогда  $|k_0|_m = 4,9263$  1/м;  $k_p = 0,2737$  1/м;  $5 < \eta < 20$ ; если  $\eta = 6$ , то  $dy_m/dt = (-m\beta) = 7,9318 \cdot 10^{-2}$  м/с.

**Излом линии роста.** Уравнение (11) имеет точное решение [14]:

$$\theta = 2b / [1 + a \exp(-b^2 \bar{t} - b \bar{y})]; a, b - \text{const.} \quad (30)$$

Физическое истолкование этого решения при  $\beta > 0$  дает такие же результаты, как в случае (17). Примем  $\beta < 0$  и рассмотрим сильный разрыв (излом) вида (14), который распространяется по однородному фону  $\theta^{(1)} \equiv \text{const}$ :  $y_j = Dt$ ,  $D = -\beta_2 b_2$ ,  $\beta_1 = \beta_2 = \beta < 0$ . Решение  $\theta^{(2)}(y, t)$ ,  $y \in [0, y_j]$ ,  $t \geq 0$  дается формулой (30), содержащей константы  $b_2 > 0$ ,  $a_2 \in (-1, 0)$ . За фронтом излома имеем  $\theta_j^{(2)} = 2b_2 / (1 + a_2) > 0$ ,

$$k_j^{(2)} = (\partial \theta^{(2)} / \partial y)_j = a_2 \beta_2 \varphi(\theta_j^{(2)})^2 / 2,$$

и тогда находим

$$D = -\beta_2 \theta_j^{(2)} \left[ \left( \frac{\theta^{(1)}}{\theta_j^{(2)}} \right)^2 - \frac{\theta_\infty^{(2)}}{\theta_j^{(2)}} \right] / \left[ 2 \left( \frac{\theta^{(1)}}{\theta_j^{(2)}} - 1 \right) \right] > 0, \quad (31)$$

$$\theta_\infty^{(2)} = \theta^{(2)}(y = 0, t \rightarrow \infty) = 2b_2.$$

Соотношения между углами выглядят так:  $0 < \theta_\infty^{(2)} < \theta_j^{(2)} < \theta^{(1)}$ . На этих неравенствах основан порядок расчетов: задаем угол  $\theta^{(1)} > 0$ , характеризующий исходный клин перед изломом, а затем выбираем соответствующие этим неравенствам углы  $\theta_j^{(2)}$  и  $\theta_\infty^{(2)}$ ; подсчитываем  $D$ , см. (31). Теперь остается найти  $b_2 = D / (-\beta_2)$  и вычислить  $a_2 \in (-1, 0)$ , априорно задавая  $k_j^{(2)}$  с учетом оценки  $0 < 2k_j^{(2)} < (\theta_j^{(2)})^2 (-\beta\varphi)$ . Отметим еще, что выпуклость излома обращена вверх, рис. 4, а, и за этим сильным разрывом происходит затупление клиновидной вершины. Предельный случай:  $\theta^{(1)} = \theta_j^{(2)} + 0$ ; излом вырождается в клин, удаляясь на бесконечность с неограниченно большой скоростью. Условие (15) возрастания энтропии будет выполнено при подходящем выборе  $\theta_j^{(2)}$ , если  $B_2 / B_1 = [(\delta_1 - 1) / (\delta_2 - 1)] < 1$ , т. е.  $0 < \delta_2 < \delta_1 < 1$ .

Пример расчета. Пусть  $B_1 = 1$  К;  $B_2 = 0,9$  К;  $\delta_1 = 0,5$ ;  $\delta_2 = 4/9$ ;  $\theta^{(1)} = 3 \cdot 10^{-2}$ ;  $\theta_j^{(2)} = 2 \times 10^{-2}$ ;  $\theta_\infty^{(2)} = 1 \times 10^{-2}$ . В результате получаем  $D = 0,1906$  м/с.

Для уравнения (11) возьмем точное решение [15, с. 16]:

$$\theta^{(1)} \equiv \theta(\bar{y}, \bar{t}) = -D' + 2a \operatorname{th}[a(\bar{y} - D'\bar{t}) + b], \quad (32)$$

$$a, b, D' - \text{const},$$

и на его основе рассмотрим излом, для которого  $\beta = \beta_1 = \beta_2 > 0$ ,  $\theta^{(2)} = \theta_j^{(2)} \equiv \text{const}$ ,  $\partial \theta^{(2)} / \partial y \equiv 0$ . Решение (32) определяет состояние линии роста перед сильным разрывом  $y_j = D't$ ,  $D = \beta D'$ ,  $y \geq y_j$ ,  $t \geq 0$ . Основные формулы:

$$\theta_j^{(1)} = -D' + 2a_1 \operatorname{th} b_1 > 0, \quad \theta_\infty^{(1)} = \theta^{(1)}[(y - y_j) \rightarrow \infty] = -D' + 2a_1 > 0,$$

$$k_j^{(1)} = (\partial \theta^{(1)} / \partial y)_j = a_1 (1 + \operatorname{th} b_1) (\theta^{(2)} - \theta_j^{(1)}) / h, \quad h = 1 / (\beta \varphi),$$

$$a_1 = \frac{\theta^{(2)} - \theta_j^{(1)}}{2(1 - \text{th } b)}, \quad \text{th } b = \frac{2k_j^{(1)}h - (\theta^{(2)} - \theta_j^{(1)})^2}{2k_j^{(1)}h + (\theta^{(2)} - \theta_j^{(1)})^2}, \quad D' = \frac{k_j^{(1)}h}{\theta^{(2)} - \theta_j^{(1)}} - \frac{1}{2}(\theta^{(2)} + \theta_j^{(1)}). \quad (33)$$

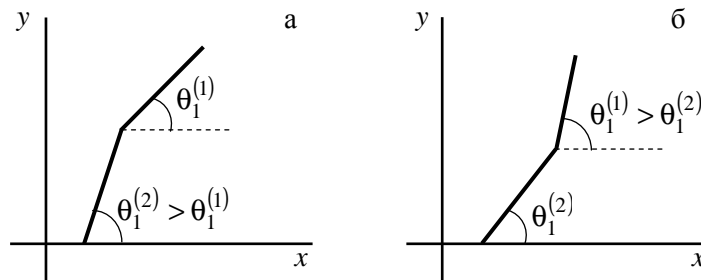


Рис. 4. Схематическое изображение углов заострения слева и справа от излома линии роста. Излом движется слева направо – от вершины на периферию

Входные параметры должны удовлетворять неравенствам:  $\theta^{(2)} > \theta_j^{(1)} > 0$ ,  $k_j^{(1)} > \left[ (\theta^{(2)})^2 - (\theta_j^{(1)})^2 \right] / (2h)$ , и тогда  $a_1 > 0$ ,  $0 < \text{th } b < 1$ ,  $D' > 0$ . Если  $k_j^{(1)}$  не превышает указанное пороговое значение, то излом (33) не существует. Условие (15) возрастания энтропии будет выполнено, если  $B_1 = B_2$ ,  $\delta_1 = \delta_2$ . Здесь, в отличие от решения  $\beta < 0$ , (30), (31), излом вогнутый, рис. 4б. С течением времени исходная линия роста трансформируется в клин  $\theta = \theta^{(2)} = \theta_\infty^{(1)}$ . Предельный случай  $\theta^{(2)} = \theta_j^{(1)} + 0$  аналогичен тому, что наблюдался для (31).

Пример расчета.  $B_1 = B_2 = 1$  К;  $\delta_1 = \delta_2 = 1,5$ ;  $\theta^{(2)} = 3 \cdot 10^{-2}$ ;  $\theta_j^{(1)} = 2 \cdot 10^{-2}$ ;  $D = k_j^{(1)} \times 1,3928 \cdot 10^{-3} - 0,1191$  м/с;  $k_j^{(1)} \geq 86$  1/м.

Теперь рассмотрим излом  $y_j = Dt \geq 0$ , для которого  $\beta_1 > 0$ ,  $\beta_2 < 0$ . Состояние линии роста перед сильным разрывом определяется решением (32),  $y \geq y_j$  – всем константам, входящим в эту формулу, присваиваем индекс «1». За разрывом применяем точное решение уравнения (12) вида [15, с. 15]:

$$\theta^{(2)} = -b_2 - \frac{2}{\hat{y} + b_2 \bar{t} + a_2}, \quad y \in [0, y_j]. \quad (34)$$

Сюда входят произвольные константы  $a_2 < 0$ ,  $b_2 < 0$ . Стыковка решений (32) и (34) на линии  $y_j = Dt$  выполняется с помощью условия (14). Основные формулы:  $D = D'_1 \beta_1 = b_2 \beta_2$ ;

$$k_j^{(1)} = \left( \frac{\partial \theta^{(1)}}{\partial y} \right)_j = \frac{2a_1^2}{h_1 \text{ch}^2 b_1}, \quad k_j^{(2)} = \left( \frac{\partial \theta^{(2)}}{\partial y} \right)_j = \frac{2}{h_2 a_2^2}, \quad (35)$$

$$h_1 = 1/(\beta_1 \varphi), \quad h_2 = 1/(-\beta_2 \varphi), \quad \theta_\infty^{(1)} = \theta^{(1)}(y \rightarrow \infty, t = 0) = 2a_1 - D'_1, \quad \theta_\infty^{(2)} = \theta^{(2)}(y = 0, t \rightarrow \infty) = -b_2.$$

Порядок расчетов основан на цепочке неравенств:  $0 < \theta_j^{(1)} < \theta_\infty^{(1)} < \theta_\infty^{(2)} < \theta_j^{(2)}$ . Сначала задаем углы  $\theta_j^{(1)}$  и  $\theta_\infty^{(1)}$ , характеризующие начальное состояние правой части излома. Подсчитываем

$$\theta_\infty^{(2)} = \theta_\infty^{(1)} \left[ 1 - \left( \sqrt{\beta_2^2 - \beta_1 \beta_2} / \beta_2 \right) \right], \quad \text{определяя тем самым } b_2 \text{ и скорость } D = b_2 \beta_2. \text{ Тогда } D'_1 = D / \beta_1,$$

$2a_1 = D'_1 + \theta_\infty^{(1)}$ . Задаем  $\theta_j^{(2)}$  и находим  $a_2$ ,  $b_1$ :

$$2/a_2 = \theta_\infty^{(2)} - \theta_j^{(2)} < 0, \quad 1 - \text{th } b_1 = (\theta_\infty^{(1)} - \theta_j^{(1)}) / (2a_1).$$

Здесь выполнено ограничение  $0 < \text{th } b_1 < 1$ . Выпуклость излома обращена вниз (рис. 4, б); с течением времени происходит затупление вершины клина. Условие (15) возрастания энтропии выполняется для всех  $B_2 \leq B_1$  при подходящем выборе  $\theta_j^{(1)}$ ,  $\theta_\infty^{(1)}$ . На основе формул (35) получаем

$$D = \frac{k_j^{(1)}}{\varphi(\theta_\infty^{(1)} - \theta_j^{(1)})} - \frac{\beta_1}{2}(\theta_\infty^{(1)} + \theta_j^{(1)}), \quad k_j^{(2)} = (\theta_j^{(2)} - \theta_\infty^{(2)})^2 / (2h_2).$$

Излом существует ( $D > 0$ ), если  $2k_j^{(1)}h_1 > [(\theta_\infty^{(1)})^2 - (\theta_j^{(1)})^2]$ .

Приведем два примера. Пусть  $B_1 = 1$  К;  $B_2 = 0,9$  К. Если  $\theta_j^{(1)} = 0,01$ ;  $\theta_\infty^{(1)} = 0,012$ ;  $\delta_1 = 1,5$ ;  $\delta_2 = 0,5$ , то допускается излом, для которого  $\theta_\infty^{(2)} = 0,0294$ ;  $\theta_j^{(2)} = 0,03$ ;  $D = k_j^{(1)} \times 6,9643 \cdot 10^{-3} - 0,0524$  м/с;  $k_j^{(1)} \geq 8$  1/м;  $k_j^{(2)} = 4,904 \cdot 10^{-2}$  1/м. Если  $\theta_j^{(1)} = 0,005$ ;  $\theta_\infty^{(1)} = 0,01$ ;  $\delta_1 = 1,01$ ;  $\delta_2 = 0,9$ , то допускается излом  $\theta_\infty^{(2)} = 0,0205$ ;  $\theta_j^{(2)} = 0,024$ ;  $D = k_j^{(1)} \times 2,7857 \cdot 10^{-3} - 0,0357$  м/с;  $k_j^{(1)} \geq 13$  1/м;  $k_j^{(2)} = 1,8420 \cdot 10^{-4}$  1/м.

**Опрокидывание линии роста.** Продолжим работу с решением (32), выполнив инверсию: теперь, в отличие от излома (35), берем  $\beta_1 < 0$ ,  $\beta_2 > 0$ . Фон перед сильным разрывом  $y_j = Dt \geq 0$  однородный:  $\theta^{(1)} = \theta_j^{(1)} \equiv \text{const} > 0$ ,  $\partial\theta^{(1)}/\partial y \equiv 0$ . Левая часть излома  $\theta^{(2)} = \theta^{(2)}(y, t)$ ,  $y \in [0, y_j]$  определяется решением (32): здесь константам  $a$ ,  $b$ ,  $D'$  присваиваем индекс «2». Основные формулы:  $0 < \theta_j^{(2)} < \theta^{(1)}$ ,

$$\theta^{(2)}(y=0, t) = -D'_2 + 2a_2 \text{th}(b_2 - a_2 \beta_2^2 \varphi D'_2 t), \quad \theta_j^{(2)} = \theta^{(2)}(y=0, t=0) = -D'_2 + 2a_2 \text{th} b_2 > 0; \quad a_2 > 0, \quad b_2 > 0;$$

$$k_j^{(2)} = \left( \frac{\partial \theta^{(2)}}{\partial y} \right)_j = \frac{2a_2^2}{h_2 \text{ch}^2 b_2}, \quad h_2 = 1/(\beta_2 \varphi), \quad D = D'_2 \beta_2,$$

$$D(\theta^{(1)} - \theta_j^{(2)}) = \frac{k_j^{(2)}}{\varphi} + \frac{\beta_2}{2}(\theta_j^{(2)})^2 - \frac{\beta_1}{2}(\theta^{(1)})^2. \quad (36)$$

Своеобразие ситуации в том, что в конечный момент времени  $t = t_0 > 0$  имеем  $\theta^{(2)}(y = 0, t = t_0) = 0$ , а при  $t > t_0$  начинается опрокидывание линии роста,  $\theta^{(2)}(y = 0, t > t_0) < 0$ . Значит, при  $t = t_0$  появляется предвестник втягивания внутрь носика клиновидной вершины:

$$\text{th}(a_2^1 t_0) = \theta_j^{(2)} / (2a_2 - D'_2 \text{th} b_2), \quad a_2^1 = a_2 \beta_2^2 \varphi D'_2.$$

Такой физический смысл данного решения обусловлен двумя обстоятельствами: 1)  $\theta^{(1)} > \theta_j^{(2)} > 0$ , т. е. в начальном состоянии выпуклость излома обращена вверх; 2)  $\beta_2 > 0$ , что обеспечивает условие  $k_j^{(2)} > 0$ . Обращаем внимание на то, что опрокидывание происходит в левой части излома, где угол заострения  $\theta_1^{(2)} = (\pi/2) - \theta_j^{(2)}$  больше, чем в правой части, (рис. 4, а).

Порядок расчетов: задаем  $\theta^{(1)}$ ,  $\theta_j^{(2)}$  и  $k_j^{(2)} > 0$ ; определяем  $D$  из (36); находим  $D'_2 = D/\beta_2$ ; для вычисления  $a_2 > 0$  и  $\text{th} b_2 \in (0, 1)$  применяем формулы

$$2a_2^2 = k_j^{(2)} h_2 + [(D'_2 + \theta_j^{(2)})^2 / 2], \quad \text{th} b_2 = (D'_2 + \theta_j^{(2)}) / (2a_2)$$

и подсчитываем  $\text{th}(a_2^1 t_0) \in (0, 1)$ . Чем больше параметр кривизны  $k_j^{(2)}$ , тем быстрее происходит опрокидывание:  $\partial t_0 / \partial (k_j^{(2)}) < 0$ . Для фиксированных  $\theta^{(1)}$ ,  $\theta_j^{(2)}$ ,  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  всегда существует такое  $0 < B_2 < B_1$ , что (15) выполнено при  $t \in [0, t_0)$ . Отметим, что здесь нет порога при выборе  $k_j^{(2)} > 0$ . Данное решение, содержащее предвестник опрокидывания, можно рассматривать и при  $\beta_1 > 0$ ,  $\beta_2 > 0$ , но тогда, согласно (36), условие  $D > 0$  указывает оценку нижней границы положительных значений  $k_j^{(2)}$  – запись не приводится.

Пример расчета:  $\theta^{(1)} = 0,03$ ;  $\theta_j^{(2)} = 0,02$ ;  $\delta_1 = 0,9$ ;  $\delta_2 = 1,01$ ;  $B_1 = 1$  К;  $B_2 = 0,9$  К;  $\beta_1 = -0,953$  м/с;  $\beta_2 = 8,537 \cdot 10^{-2}$  м/с;  $k_j^{(2)} = 2 \cdot 10^3$  1/м;  $D = 2,83028$  м/с;  $a_2 = 16,5142$ ;  $\text{th} b_2 = 0,9997$ ;  $t_0 = 1,928 \cdot 10^{-6}$  с.



**Заключение.** Для ячеистого ( $\beta = 0$ ) фронта кристаллизации получена корреляция (7) между периодом структуры и радиусом кривизны вершины отдельной ячейки. Значение  $\beta = 0$  является пороговым: по обе его стороны наблюдаются различия качественных свойств роста. Волны разрушения различаются характером зависимости скорости волны от кривизны фона: [решение (18), (20);  $\beta > 0$ ,  $\partial m / \partial k_p > 0$ ]  $\leftrightarrow$  [решение (24)–(29);  $\beta < 0$ ,  $\partial m / \partial k_p < 0$ ]. Другие различия соотносятся с режимами заострения и затупления вершины. Волна возмущения: [решения (17) и (18), (19);  $\beta > 0$ , заострение]  $\leftrightarrow$  [решение (21);  $\beta < 0$ , затупление]. Устойчивый излом: [решение (30), (31);  $\beta_1 = \beta_2 < 0$ , затупление вершины за изломом, (см. рис. 4, а)]; [решение (32);  $\beta_1 = \beta_2 > 0$ , заострение вершины за изломом, (см. рис. 4, б)]; [решение (32), (34);  $\beta_1 > 0$ ,  $\beta_2 < 0$ , затупление вершины за изломом]. Таким образом, для устойчивых ситуаций (возмущение, излом) положительно- / отрицательному значению  $\beta$  соответствует заострение / затупление клиновидной вершины. Неустойчивый излом – режим опрокидывания: [решение (32), (36);  $\beta_1 < 0$ ,  $\beta_2 > 0$ , опрокидывание за линией излома]. Этот пример в сравнении с устойчивым изломом показывает, что важную роль играет направление перехода, которое характеризуется знаками  $\beta$  перед и за изломом.

### Литература

1. Brener, E.A. Pattern Selection in Two-Dimensional Dendritic Growth / E.A. Brener, V.I. Mel'nikov // *Advances in Physics*. – 1991. – Vol. 40, Iss. 1. – P. 53–97.
2. Kurz, W. Progress in Modeling Solidification Microstructures in Metals and Alloys. Part II: Dendrites from 2001 to 2018 / W. Kurz, M. Rappaz, R. Trivedi // *International Materials Reviews*. – 2021. – Vol. 66, Iss. 1. – P. 30–76.
3. Strickland, J. On Directional Dendritic Growth and Primary Spacing – A Review / J. Strickland, B. Nenchev // *Crystals*. – 2020. – Vol. 10, Iss. 7. – P. 627–656.
4. Gurtin, M.E. Interface Evolution in three Dimensions with Curvature-Dependent Energy and Surface Diffusion: Interface-Controlled Evolution, Phase Transitions, Epitaxial Growth of Elastic Films / M.E. Gurtin, M.E. Jabbour // *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. – 2002. – Vol. 163. – P. 171–208.
5. Шибков, А.А. Морфологический отбор евклидовых и фрактальных форм неравновесного роста льда в переохлажденной воде / А.А. Шибков, М.А. Желтов, А.Е. Золотов // *Кристаллография*. – 2011. – Т. 56, № 2. – С. 362–366.
6. Glicksman, M.E. Capillary-Mediated Interface Perturbations: Deterministic Pattern Formation / M.E. Glicksman // *Journal of Crystal Growth*. – 2016. – Vol. 450. – P. 119–139.
7. Herlach, D.M. Metastable Solids from Undercooled Melts / D.M. Herlach, P. Galenko, D. Holland-Moritz – Oxford: Pergamon, 2007. – 448 p.
8. Математическая модель образования кристаллических зародышей в переохлажденном расплаве эвтектического сплава / А.Д. Дрозин, М.В. Дудоров, В.Е. Рощин и др. // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика»*. – 2012. – № 11(270), Вып. 6. – С. 66–77.
9. Жоу, Д. Расширенная необратимая термодинамика / Д. Жоу, Х. Касас-Баскес, Дж. Лебон – Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. – 528 с.
10. Седов, Л.И. Механика сплошной среды. Т. 1. / Л.И. Седов. – М.: Наука, 1973. – 492 с.
11. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двухмерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // *Прикладная физика*. – 2012. – № 4. – С. 40–46.
12. Шабловский, О.Н. Динамика неустойчивости волновых возмущений и боковое ветвление дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль // *Успехи прикладной физики*. – 2022. – № 2. – С. 189–202.
13. Рождественский, Б.Л. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике / Б.Л. Рождественский, Н.Н. Яненко. – М.: Наука, 1968. – 592 с.
14. Уизем, Дж. Линейные и нелинейные волны / Дж. Уизем. – Москва: Мир, 1977. – 622 с.
15. Полянин, А.Д. Справочник по нелинейным уравнениям математической физики: точные решения / А.Д. Полянин, В.Ф. Зайцев. – М.: Физматлит, 2002. – 431 с.

*Поступила в редакцию 17 апреля 2024 г.*

### Сведения об авторе

Шабловский Олег Никифорович – доктор физико-математических наук, профессор, Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого, г. Гомель, Республика Беларусь, e-mail: shablovsky-on@yandex.by

**EVOLUTION AND DESTRUCTION OF THE CRYSTAL GROWTH LINE  
IN A SUPERCOOLED MELT****O.N. Shablovskii***Pavel Sukhoi State Technical University of Gomel, Republic of Belarus**E-mail: shablovsky-on@yandex.by*

Abstract. The paper studies the macroscopic shape of the crystal growth line in a supercooled melt of a pure substance. The analysis focuses on the spatial heterogeneity of supercooling at the crystallization phase boundary. The paper shows that there is a threshold value of the heterogeneity parameter, and this threshold corresponds to the cellular structure of the crystallization front which is periodic along the coordinate transverse to the growth direction. The ratio of the structure period to the curvature radius of an individual cell is equal to  $\pi$ . The tip of the growth line is wedge-shaped on both sides of the threshold. When crossing the threshold, bifurcated situations are observed, since the cells are an intermediate structure between the flat front and the dendrites. The paper analyses the case when the small value of the first order of smallness is the angle between the normal and the symmetry axis of the growth line. Under this approximation, the growth equation has the form of the Burgers equation. A new physical interpretation is given to the exact solutions of this equation known in the literature, which allows considering the following processes: a disturbance wave caused by the curvature rupture; a destruction wave is a precursor of tip splitting; a rupture is a strong discontinuity of the sharpness angle; overturning of the growth line is a precursor to the tip neck introvolution. The paper comprehensively analyses stable and unstable ruptures of the growth line. It reveals that the differences between the blunting of the tip behind the rupture and overturning are explained by the direction of the transition through the threshold value of the heterogeneity parameter. The paper gives calculation examples illustrating the properties of the velocity of disturbance and destruction waves.

*Keywords: rapid solidification; regular cellular array; dendrite shape; dendrite tip splitting; morphological instability.*

**References**

1. Brener E.A., Mel'nikov V.I. Pattern Selection in Two-Dimensional Dendritic Growth. *Advances in Physics*, 1991, Vol. 40, Iss. 1, pp 53–97. DOI: 10.1080/00018739100101472.
2. Kurz W., Rappaz M., Trivedi R. Progress in Modeling Solidification Microstructures in Metals and Alloys. Part II: Dendrites from 2001 to 2018. *Int. Mater. Rev.*, 2021, Vol. 66, no. 1, pp 30–76. DOI: 10.1080/09506608.2020.1757894.
3. Strickland J., Nenchev B. On Directional Dendritic Growth and Primary Spacing. *A Review. Crystals*, 2020, Vol. 10, Iss. 7, pp 627–656. DOI: 10.3390/cryst10070627.
4. Gurtin, M.E., Jabbour M.E. Interface Evolution in Three Dimensions with Curvature-Dependent Energy and Surface Diffusion: Interface-Controlled Evolution, Phase Transitions, Epitaxial Growth of Elastic Films. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 2002, Vol. 163, pp. 171–208. DOI: 10.1007/s002050200193.
5. Shibkov A.A., Zheltov M.A., Zolotov A.E. Morphological Selection of Euclidean and Fractal Patterns of Nonequilibrium Growth of Ice in Supercooled Water. *Crystallogr. Rep.*, 2011, Vol. 56, pp. 335–338. DOI: 10.1134/S1063774510061161
6. Glicksman M.E. Capillary-Mediated Interface Perturbations: Deterministic Pattern Formation. *J. of Crystal Growth*, 2016, Vol. 450, pp. 119–139. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2016.03.031
7. Herlach D.M., Galenko P., Holland-Moritz D. *Metastable Solids from Undercooled Melts*. Oxford: Pergamon, 2007, 448 p. DOI: 10.1016/S1470-1804(07)80023-X
8. Drozin A.D., Dudorov M.V., Roshchin V.E., Gamov P.A., Meniches L.D. Mathematical Model of the Formation of Crystalline Nuclei in a Supercooled Melt of a Eutectic Alloy. *Bulletin of SUSU. The series «Mathematics. Mechanics. Physics»*. 2012, no. 11(270), Iss.6, pp. 66–77. (in Russ.)

9. Jou D., Casas-Vazquez J., Lebon G. *Extended Irreversible Thermodynamics*. N.Y.: Springer Science+Business Media Publ., 2001, 463 p. (Russ. ed.: Jou, D., Casas-Vazquez, J., Lebon, G. Rasshirenaya neobratimaya termodinamika. Moscow-Izhevsk: Institute for Computer Science; Regular and Chaotic Dynamics Center Publ., 2006. 528 p.).

10. Sedov L.I. *Mekhanika sploshnoy sredy. T. 1.* (Continuum Mechanics. Vol. 1). Moscow, Nauka Publ., 1973. 492 p. (in Russ.).

11. Shablovsky O.N. Morphological Properties of the Growth Line of a Two-Dimensional Dendrite in a Supercooled Melt. *Prikladnaya fizika* (Applied Physics). 2012. no. 4. pp. 40–46. (in Russ.).

12. Shablovsky O.N., Kroll D.G. Dynamics of Instable Wave Perturbations and Lateral Dendrite Branching in an Undercooled Melt. *Advances in Applied Physics*, 2022, no. 2. pp. 189–202. (in Russ.). DOI: 10.51368/2307-4469-2022-10-2-189-202

13. Rozhdestvensky B.L., Yanenko N.N. *Sistemy kvazilineynykh uravneniy i ikh prilozheniya k gazovoy dinamike* (Systems of Quasilinear Equations and Their Applications to Gas Dynamics). Moscow, Nauka Publ., 1968, 592 p. (in Russ.).

14. Whitham G.B. *Linear and Nonlinear Waves*. John Wiley & Sons, London, 1974, 636 p.

15. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. *Spravochnik po nelineynym uravneniyam matematicheskoy fiziki: tochnye resheniya* (Handbook of Nonlinear Equations of Mathematical Physics: Exact Solutions). Moscow, Fizmatlit Publ., 2002, 431 p. (in Russ.).

*Received April 17, 2024*

#### **Information about the author**

Shablovskii Oleg Nikiforovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Pavel Sukhoi State Technical University of Gomel, Republic of Belarus, e-mail: shablovsky-on@yandex.by.

## ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ИМПУЛЬСОВ НА ШЕРОХОВАТОСТЬ ПОВЕРХНОСТИ И ФЛУКТУАЦИИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЁНОК

**А.А. Шульгинов, Н.С. Забейворота**

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

E-mail: shulginovaa@susu.ru; zabeivorotans@susu.ru

**Аннотация.** Воздействие импульсных электромагнитных полей на металлические плёнки, которые являются основой современной микро- и наноэлектроники, может приводить к изменению их характеристик проводимости и свойств поверхности. В данной работе поставлена цель изучить влияние электромагнитных импульсов на состояние поверхности тонких металлических плёнок Вi, Cr и Fe и исследовать влияние электромагнитных импульсов на проводимость и флуктуации проводимости этих плёнок. Исследуемые образцы были подвергнуты воздействию наносекундными электромагнитными импульсами без несущей частоты в течение 30 мин. Обнаружено, что такое воздействие сильнее всего изменило шероховатость поверхности плёнки хрома, в меньшей степени – плёнки висмута, а у плёнки железа воздействие не вызвало существенных изменений поверхности. Железная плёнка оказалась наиболее устойчивой к воздействию также и при исследовании проводимости. Её сопротивление и уровень флуктуаций не изменились. Воздействие на плёнку висмута привело к уменьшению среднего количества скачков и всплесков электропроводности в 2–3 раза. Воздействие на плёнку хрома привело к подобному же эффекту и к двукратному уменьшению уровня мелкомасштабных флуктуаций электропроводности.

*Ключевые слова:* металлическая плёнка; электропроводность; шероховатость поверхности; электромагнитные импульсы.

### Введение

Металлические плёнки являются основой микро- и наноэлектроники, и воздействие импульсных электромагнитных полей может приводить к разрушению плёночных резисторов и других элементов наноэлектроники. Такое воздействие может приводить также к изменению структуры плёнки без заметных видимых изменений, что проявляется, например, в появлении нестационарного шума электропроводности. Причинами этого явления могут быть как внутренние явления (старение плёнок, рост дефектов), так и внешние воздействия, например, электромагнитные поля, радиация. Наши исследования направлены на изучение влияния импульсных электромагнитных полей на металлические плёнки. Воздействие наносекундными электромагнитными импульсами (НЭМИ) без несущей частоты на расплавленные металлы в процессе их кристаллизации приводит к снижению пористости, увеличению плотности, прочности, пластичности при одновременном уменьшении удельного сопротивления [1–3]. Цель нашей работы состояла в том, чтобы исследовать изменения в результате облучения НЭМИ без несущей частоты состояния поверхности плёнки и количественных характеристик флуктуаций проводимости металлических плёнок в низкочастотной области.

### Эксперимент

В качестве объектов исследования были выбраны металлические плёнки Вi, Cr, Fe, причём плёнки висмута и хрома были нанесены термовакuumным методом на подложки из поликора, а плёнка железа – ионно-плазменным методом на подложку из ситалла. Размеры подложек – 48×60 мм. Вначале были определены параметры поверхности и проводимости плёнок.

Для исследования проводимости была собрана установка, включающая в себя контейнер с исследуемыми плёнками, помещённый в термостат, и компьютер, оснащённый платой сбора данных (ПСД). Температура поддерживалась в течение всего времени измерения  $15,0 \pm 0,5$  °С.

Установка с плёнками была изолирована от электромагнитных помех. На контакты 1 и 2 подавалось напряжение 1–2 В (рис. 1). На противоположные стороны плёнок были наложены электроды в виде узких полосок во всю ширину (48 мм). Флуктуации проводимости плёнки определялись по флуктуациям потенциалов двух платиновых электродов А и В, поставленных на плёнку, относительно соответствующих точек С и D полумостов. Эта разность потенциалов усиливалась с помощью операционных усилителей (ОУ) AD623 с низким уровнем собственных шумов. Сигналы с ОУ подавались на предусилитель ПСД L1450. Общее сопротивление плёнок определялось до начала измерений флуктуаций. Перед началом экспериментов по измерению флуктуаций проводимости плёнок были измерены собственные шумы мостов и усилительных трактов. Для этого вместо металлических плёнок использовались прецизионные непроволочные сопротивления С2-29 номиналом 100 Ом («модельные плёнки» – 3 штуки). После этого в контейнер были установлены по одной плёнке Vi, Cr и Fe. Регистрация флуктуаций проводимости проводилась в круглосуточном режиме с частотой 1,73 Гц со всех трёх плёнок по 2 канала с каждой. Установка позволяла регистрировать минимальные относительные флуктуации проводимости плёнки  $\sim 10^{-7}$ .

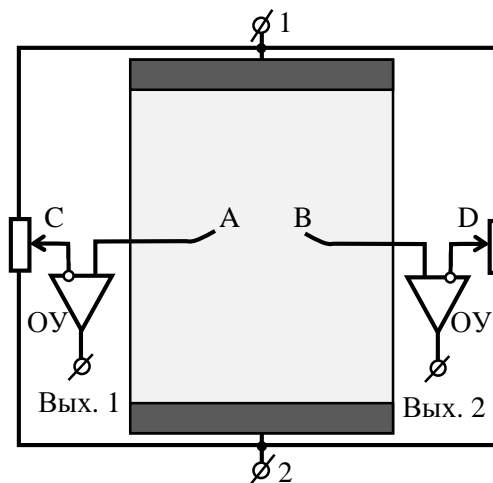


Рис. 1. Схема регистрации флуктуаций проводимости плёнки

После многодневных измерений флуктуаций проводимости эти плёнки были подвергнуты воздействию НЭМИ без несущей частоты в течение 30 мин. Частота электромагнитных импульсов длительностью 0,5 нс составляла 1000 Гц. Мощность одного импульса составляла  $\sim 1$  МВт, а амплитуда напряжённости электрического поля, согласно расчётам, составляла около  $\sim 10$  МВ/м. После этого воздействия проводилась повторная регистрация флуктуаций проводимости плёнок Vi, Cr, Fe, которая продолжалась 2 месяца.

Компьютерная обработка флуктуаций проводимости производилась с использованием вейвлет-анализа с целью выделения явлений разной природы: мелкомасштабные флуктуации, связанные с тепловым и фликкер-шумом проводимости, а также кратковременные резкие изменения (скачки и всплески). Мелкомасштабные флуктуации характеризуются средним относительным уровнем  $\sigma\Delta/\sigma$ , где  $\sigma\Delta$  – стандартное отклонение удельной проводимости плёнки от среднего значения  $\sigma$ . Основные статистические характеристики отражены в табл. 1 для мелкомасштабных флуктуаций, скачков и всплесков проводимости.

Таблица 1

Характеристики проводимости плёнок

Плёнка	№	Общее сопротивление плёнки, Ом	Средний уровень мелкомасштабных флуктуаций $\sigma\Delta/\sigma$ , $10^{-6}$	Среднее число всплесков за 100 ч	Среднее число скачков за 100 ч	Длительность записи, ч
Модельная			1,6	0,2	0,2	607
Vi	1	6,65	14,1	<b>9,4</b>	<b>8,9</b>	837
	2	7,45	14,8	<b>4,2</b>	<b>3,4</b>	2177
Cr	1	189,3	<b>44,1</b>	<b>48,1</b>	<b>31,1</b>	837
	2	172,9	<b>24,9</b>	<b>22,1</b>	<b>8,5</b>	2082
Fe	1	1,64	144	<b>1,0</b>	0,1	978
	2	1,63	130	<b>4,7</b>	0,2	2177

Прим.: 1 – до облучения; 2 – после облучения

Для анализа выбирались не все скачки и всплески, а только те, которые превышали 10-кратный порог по отношению к уровню мелкомасштабных флуктуаций. Как следует из этих данных, уровень мелкомасштабных флуктуаций с любой металлической плёнкой был как минимум на порядок выше, чем с «модельной плёнки», т. е. шумы усилительного тракта существенно не

влияти на исследуемые флуктуации. Полужирным шрифтом выделены значения величин, которые существенно изменились после облучения.

Измерения шероховатости поверхности проводились с использованием зондового сканирующего микроскопа SOLVER PRO. Основными параметрами, по которым производилась оценка состояния поверхностей плёнок, были выбраны –  $Ra$  (среднее арифметическое профиля шероховатости),  $Rq$  (среднее квадратичное отклонение высоты профиля от средней линии),  $Rm$  (средний размах высот) [4]. Эти параметры определялись в пределах выбранной базовой длины ~8 мкм. Для минимизации случайной погрешности, измерения параметров шероховатости производились в разных местах плёнки как на краях, так и в середине. Количество измерений – не менее 5. Для выбранных параметров поверхности ( $Ra$ ,  $Rq$ ,  $Rm$ ) определялось математическое ожидание и стандартное отклонение. Затем был применён z-критерий для проверки гипотезы о равенстве средних величин до и после облучения [5, с. 389]. Результаты этих исследований показаны на рис. 2 и табл. 2–4. Если параметр, согласно этому статистическому критерию, показывает различие среднего значения с вероятностью более 90 %, то эти значения в таблицах выделялись полужирным шрифтом.

Плётка Bi

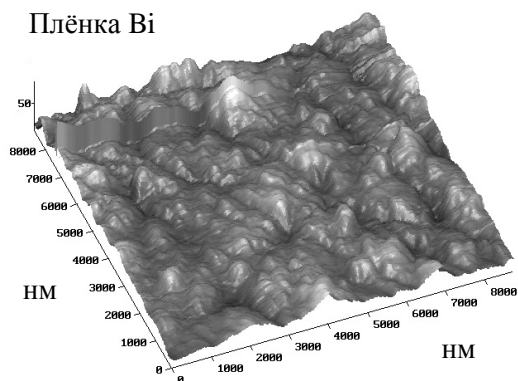


Таблица 2

Bi	$Ra$ , нм	$Rq$ , нм	$Rm$ , нм
1	10,9±6,6	16,6±10,8	<b>56,4±41,3</b>
2	13,9±8,3	20,5±12,6	<b>91,1±55,5</b>
z	0,97	0,80	<b>1,76</b>

Плётка Cr

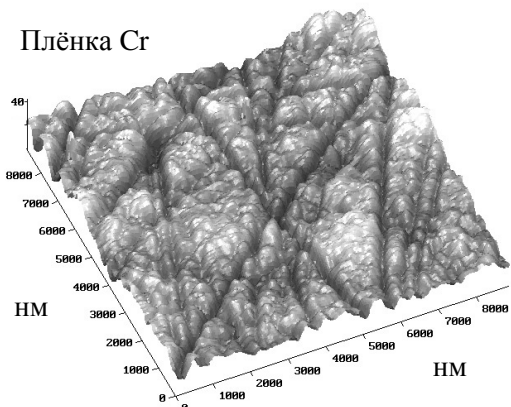


Таблица 3

Cr	$Ra$ , нм	$Rq$ , нм	$Rm$ , нм
1	3,0±0,5	3,7±0,7	<b>15,7±4,3</b>
2	4,7±1,3	6,3±2,0	<b>45,4±29,9</b>
z	2,58	2,47	<b>1,97</b>

Плётка Fe

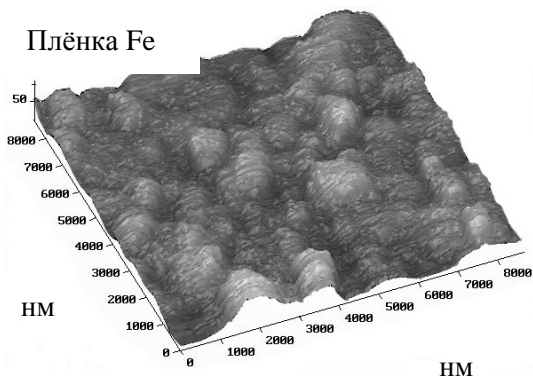


Таблица 4

Fe	$Ra$ , нм	$Rq$ , нм	$Rm$ , нм
1	11,5±1,9	15,2±4,5	<b>97,6±52,6</b>
2	10,4±2,3	13,7±3,2	<b>81,4±62,1</b>
z	0,87	0,63	<b>0,47</b>

Рис. 2. Изображения металлических плёнок.

В табл. 2–4: 1 – до облучения, 2 – после облучения НЭМИ, z-критерий различия средних величин [5]

### Основные результаты

Шероховатость поверхности плёнок под воздействие НЭМИ без несущей частоты сильнее всего изменилась у плёнки хрома (см. табл. 3), а также заметны изменения у плёнки висмута (см. табл. 2). У плёнки железа воздействие НЭМИ не вызвало существенных изменений (табл. 4).

Исследования проводимости плёнок до и после воздействия выявило, что железо оказалось наиболее стойким к этому воздействию (см. табл. 1). Его проводимость не изменилась, а проводимость висмута и хрома изменилась примерно на 10 %.

Анализ флуктуаций проводимости плёнок показал:

1. Для плёнки Вi – примерно в 2 раза сократилось количество всплесков и скачков проводимости, что указывает на уплотнение плёнки.

2. Для плёнки Сг – эффект воздействия НЭМИ оказался ещё сильнее: сократилось количество всплесков и скачков проводимости, а также значительно уменьшился уровень мелкомасштабных флуктуаций.

3. Для плёнки Fe – после облучения несколько увеличилось количество всплесков в единицу времени, что указывает на образование внутренних дефектов.

Таким образом, воздействие НЭМИ на металлические плёнки может приводить к появлению поверхностных и объёмных дефектов, что сказывается на шероховатости поверхности и уровне флуктуаций электропроводности.

### Литература

1. Влияние наносекундных однополярных электроимпульсных воздействий на свойства сплава Cu-1%Сг. Связь свойств сплава с длительностью обработки расплава / Э.Ю. Гойда, И.Э. Игнатъев, П.В. Котенков и др. // Бутлеровские сообщения. – 2018. – Т. 53, № 2. – С. 145–152.

2. Krymsky, V. Applying of Pulsed Electromagnetic Processing of Melts in Laboratory and Industrial Conditions / V. Krymsky, N. Shaburova // Materials. – 2018. – Vol. 11, Iss. 6. – P. 954.

3. Krymsky, V. Analysis of the Results of Pulsed Processing of Melts / V. Krymsky, E. Litvinova, N. Shaburova // Metals. – 2020. – Vol. 10, Iss. 2. – P. 205.

4. ГОСТ Р ИСО 4287-2014. Геометрические характеристики изделий (GPS). Структура поверхности. Профильный метод. Термины, определения и параметры структуры поверхности. – М.: Стандартинформ, 2019. – 18 с.

5. Кобзарь, А.И. Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников / А.И. Кобзарь. – М.: Физматлит, 2006. – 813 с.

*Поступила в редакцию 18 ноября 2024 г.*

### Сведения об авторах

Шульгинов Александр Анатольевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-0085-0550>, e-mail: [shulginovaa@susu.ru](mailto:shulginovaa@susu.ru).

Забейворота Николай Семёнович – кандидат технических наук, доцент, кафедра физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-6210-3732>, e-mail: [zabeivorotans@susu.ru](mailto:zabeivorotans@susu.ru).

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2025, vol. 17, no. 1, pp. 76–80*

---

DOI: 10.14529/mmp250109

## THE EFFECT OF ELECTROMAGNETIC PULSES ON SURFACE ROUGHNESS AND FLUCTUATIONS IN ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF METAL FILMS

**A.A. Shulginov, N.S. Zabeyvorota**

*South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation*

*E-mail: [shulginovaa@susu.ru](mailto:shulginovaa@susu.ru); [zabeivorotans@susu.ru](mailto:zabeivorotans@susu.ru)*

Abstract. The effect of pulsed electromagnetic fields on metal films, which are the basis of modern micro- and nanoelectronics, can lead to changes in their conductivity characteristics and surface properties. The paper aims to study the effect of electromagnetic pulses on the surface condition of thin metal-

lic films of Bi, Cr and Fe and to investigate the effect of electromagnetic pulses on their conductivity and conductivity variations of the films. Surface roughness measurements were performed using a SOLVER PRO probe scanning microscope. In order to study the fluctuations of the film conductivity, a setup was set up that allowed measurements to be made around the clock for several months. The samples were exposed to nanosecond electromagnetic pulses without carrier frequency for 30 minutes. It was found that such exposure most strongly changed the surface roughness of chromium film, to a lesser extent - bismuth film, and for iron film exposure did not cause significant changes in the surface. The iron film also proved to be the most resistant to exposure in the conductivity study. Its resistivity and variation remained virtually unchanged. Exposure of the film to bismuth resulted in a 2–3 times decrease in the average number of conductivity jumps and bursts. Exposure to chromium film resulted in a similar effect and a twofold decrease in the level of small-scale fluctuations of electrical conductivity.

*Keywords: metal film; electrical conductivity; surface roughness; electromagnetic pulses..*

### References

1. Goyda E.Yu., Ignat'ev I.E., Kotenkov P.V., Dolmatov A.V., Balakirev V.F., Ignat'eva E.V., Krymskiy V.V. Vliyaniye nanosekundnykh odnopolyarnykh elektroimpul'snykh vozdeystviy na svoystva splava Si-1%Sr. Svyaz' svoystv splava s dlitel'nost'yu obrabotki rasplava (The Effect of Nanosecond Unipolar Electric Pulse Effects on the Properties of the Si-1%Si Alloy. The Relationship of Alloy Properties with the Duration of Melt Treatment). *Butlerovskie soobshcheniya* (Butler's messages), 2018, Vol. 53, no. 2, p. 145–152. (in Russ.).
2. Krymskiy V., Shaburova N. Applying of Pulsed Electromagnetic Processing of Melts in Laboratory and Industrial Conditions. *Materials*, 2018, Vol. 11, Iss. 6, p. 954. DOI: 10.3390/ma11060954.
3. Krymskiy V., Litvinova E., Shaburova N. Analysis of the Results of Pulsed Processing of Melts. *Metals*, 2020, Vol. 10, Iss. 2, p. 205. DOI: 10.3390/met10020205.
4. GOST R ISO 4287-2014. *Geometricheskie harakteristiki izdelii (GPS). Struktura poverhnosti. Profil'nyi metod. Terminy, opredeleniya i parametry struktury poverhnosti.* (Geometric Characteristics of the Products (GPS). The Structure of the Surface. The Profile Method. Terms, Definitions and Parameters of the Surface Structure). Moscow, Standartinform Publ., 2019, 18 p. (in Russ.).
5. Kobzar' A.I. *Prikladnaya matematicheskaya statistika. Dlya inzhenerov i nauchnykh rabotnikov* (Applied Mathematical Statistics for Engineers and Scientists). Moscow, Fizmatlit Publ., 2006, 813 p. (in Russ.).

*Received November 18, 2024*

### Information about the authors

Shulginov Alexandr Anatolyevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: shulginovaa@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-0085-0550>.

Zbeyvorota Nikolay Semyonovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: zabeivorotans@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-6210-3732>.



## Персоналии



Редакционный совет научного журнала «Вестник ЮУрГУ» и члены редакционного совета серии «Математика. Механика. Физика» от всей души поздравляют дважды лауреата премии Правительства РФ в области науки и техники заместителя председателя экспертного совета Высшей аттестационной комиссии при Минобрнауки России по управлению, компьютерным и информационным наукам доктора технических наук, профессора *Каперко Алексея Фёдоровича* с 70-летним юбилеем и желают ему счастья, благополучия, новых ярких творческих успехов и достижений!



Коллектив редакции журнала «Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика» сердечно поздравляет с 80-летним юбилеем доктора технических наук, профессора, заслуженного работника высшей школы

Гуревича Сергея Юрьевича!

Уважаемый и любимый коллегами и студентами педагог, крупный ученый, внесший большой вклад в фундаментальную теорию взаимодействия импульсных лазерных, электромагнитных и акустических полей в ферромагнитных металлах, находящихся при температуре магнитного фазового перехода, и в создание физических основ высокотемпературных и высокоскоростных методов и средств бесконтактного акустического контроля качества металлоизделий, он пользуется заслуженным авторитетом в научной среде не только в нашей стране, но и за рубежом.

Поздравляем Сергея Юрьевича с этой знаменательной датой, желаем ему здоровья и долголетия, творческого вдохновения, успехов и новых достижений на благо науки и образования.

## ТРЕБОВАНИЯ К ПУБЛИКАЦИИ СТАТЬИ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

11. Плата с аспирантов за публикацию не взимается.

## СВЕДЕНИЯ О ЖУРНАЛЕ

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

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

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

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук» по следующим научным специальностям и соответствующим им отраслям науки: 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 ВИНИТИ. 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 17, № 1  
2025

16+

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

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 20.01.2025. Дата выхода в свет 27.01.2025.

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

Тираж 500 экз. Заказ 3/3. Цена свободная.

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