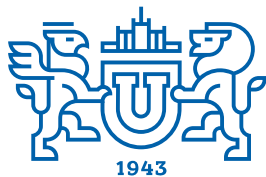


ВЕСТНИК



ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА

2025
Т. 17, № 3

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

СЕРИЯ

«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»

Решением ВАК России включен в Перечень рецензируемых научных изданий

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

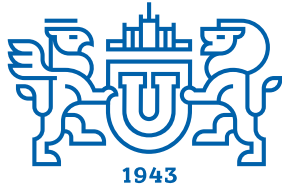
Основной целью серии «Математика. Механика. Физика» является публикация и распространение оригинальных результатов научных исследований в области математики, механики и физики, а также их приложений в естественных, технических и экономических науках.

Редакционная коллегия

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

Редакционный совет

д.т.н., профессор **Богомолов А.В.** (Государственный научный центр Российской Федерации – Федеральный медицинский биофизический центр имени А.И. Бурназяна, г. Москва)
д.ф.-м.н., профессор **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** (ИННА-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

2025

Vol. 17, no. 3

SERIES

“MATHEMATICS.
MECHANICS. PHYSICS”

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

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

South Ural State University

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

Editorial Board

S.A. Zagrebina, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E.V. Golubev, Candidate of Physics and Mathematics, Associated Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

V.P. Beskachko, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

V.I. Zalyapin, Candidate of Physics and Mathematics, Associated Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

Yu.M. Kovalev, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

Editorial Council

A.V. Bogomolov, Doctor of Engineering, Professor, State Scientific Center of the Russian Federation – A.I. Burnazyan Federal Medical Biophysical Center, the Russian Federal Medical-Biological Agency, Moscow, Russian Federation

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

ГОНЧАРОВ Н.С., КИТАЕВА О.Г., СВИРИДЮК Г.А. Стабилизация решений для стохастической динамической системы Вентцеля в круге и на его границе	5
EVSEEV F.A. Generalized Solvability of Initial-Boundary Value Problems for Quasihydrodynamic System of Equations in Weighted Sobolev Spaces	13
КОРЖОВ А.В., СУРИН В.А., ЛОНЗИНГЕР П.В., САФОНОВ В.И., БУШМЕЛЕВ Я.В., БЕЛОВ К.Н. Подготовка изображений прозрачных объектов сложной формы при обнаружении дефектов системой технического зрения.....	28
КУЗНЕЦОВ А.А. Алгоритм анализа зашумленных видеоданных для навигации автономных роботов.....	38

Физика

ZAGREBIN M.A., MARKOVICH I.A., KUZNETSOV A.S., MATYUNINA M.V., BUTAKOV A.V. Computer Modeling of Magnetic Properties of Disordered BCC Phase of $Fe_{100-x}Me_x$ Alloys ($Me = Al, Ga, Ge$).....	47
КУЦ Д.А., ПОДОШВЕДОВ М.С., ВОРОНЦОВ А.Г., КУЛИК С.П., ПОДОШВЕДОВ С.А. О выборе оптимальных параметров для измерения времени задержки на основе эффекта Хонга–О–Мандела	55
ПОДГОРНОВ Ф.В., ГАВРИЛЯК А.М., ГАВРИЛЯК М.В. Роль примесных ионов в формировании нелинейного диэлектрического отклика нематической жидкокристаллической ячейки	61
РАЕВ А.А., ЕРАГЕР К.Р., СОКОЛОВСКИЙ В.В., БУЧЕЛЬНИКОВ В.Д. Особенности фазовой стабильности и электронной структуры сплавов Гейслера Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$)	71

Персоналии

Василий Дмитриевич Бучельников. К 70-летию со дня рождения.....	79
---	----

CONTENTS

Mathematics

- GONCHAROV N.S., KITAEVA O.G., SVIRIDYUK G.A. Stabilization of Solutions for the Wentzell Stochastic Dynamical System in a Circle and on Its Boundary 5
- EVSEEV F.A. Generalized Solvability of Initial-Boundary Value Problems for Quasihydrodynamic System of Equations in Weighted Sobolev Spaces 13
- KORZHOV A.V., SURIN V.A., LONZINGER P.V., SAFONOV V.I., BUSHMELEV Ya.V., BELOV K.N. Preparing the Images of Complex Shape Transparent Objects to Detect Defects by the Computer Vision System 28
- KUZNETSOV A.A. Algorithm for Analyzing Noisy Video Data for Autonomous Robots Navigation 38

Physics

- ZAGREBIN M.A., MARKOVICH I.A., KUZNETSOV A.S., MATYUNINA M.V., BUTAKOV A.V. Computer Modeling of Magnetic Properties of Disordered BCC Phase of $Fe_{100-x}Me_x$ Alloys (Me = Al, Ga, Ge) 47
- KUTS D.A., PODOSHVEDOV M.S., VORONTSOV A.G., KULIK S.P., PODOSHVEDOV S.A. On Selecting Optimal Parameters for Delay Time Measurement Using the Hong–Ou–Mandel Effect 55
- PODGORNOV F.V., GAVRILYAK A.M., GAVRILYAK M.V. The Role of Impurity Ions in Nonlinear Dielectric Response Formation of Nematic Liquid Crystal Cell 61
- RAEV A.A., ERAGER K.R., SOKOLOVSKY V.V., BUCHELNIKOV V.D. Phase Stability and Electronic Structure of Heusler Alloys Ti_2VZ (Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn)..... 71

Personalia

- To the 70th Anniversary of Vasilij Buchel'nikov 79

СТАБИЛИЗАЦИЯ РЕШЕНИЙ ДЛЯ СТОХАСТИЧЕСКОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ВЕНТЦЕЛЯ В КРУГЕ И НА ЕГО ГРАНИЦЕ

Н.С. Гончаров, О.Г. Китаева, Г.А. Свиридюк

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

E-mail: goncharovns@susu.ru

Аннотация. Рассматривается решение задачи стабилизации решений детерминированной и стохастической системы уравнений Вентцеля, описывающих фильтрацию жидкости в круге и на границе. Сначала решается вопрос об экспоненциальной устойчивости и неустойчивости решений детерминированной системы уравнений Вентцеля при различных знаках параметров, описывающих среду и свойства жидкости. В случае неустойчивости решений решается задача стабилизации на основе контура обратной связи. Затем полученные результаты распространяются на стохастическую систему уравнений Вентцеля. Здесь в качестве производной рассматривается производная Нельсона–Гликлиха, а решением является стохастический процесс.

Ключевые слова: стохастическая динамическая система уравнений Вентцеля; уравнение Баренблатта–Желтова–Кочиной; производная Нельсона–Гликлиха; неустойчивое решение, стабилизация решения.

Введение

Пусть $\Omega = \{(r, \theta) : r \in [0, R), \theta \in [0, 2\pi)\}$ – круг в \mathbb{R}^2 с границей $\Gamma = \{(\theta) : \theta \in [0, 2\pi)\}$. На компакте $\Omega \cup \Gamma$ рассмотрим систему из двух уравнений, описывающих процесс фильтрации влаги [1]

$$(\lambda - \Delta_{r, \theta, \varphi})u_t = \alpha \Delta_{r, \theta, \varphi} u + \beta u, u = (t, r, \theta), (t, r, \theta) \in \mathbb{R} \times \Omega, \quad (1)$$

$$(\lambda - \Delta_{\theta, \varphi})v_t = \gamma \Delta_{\theta, \varphi} v + \partial_R u + \delta v, v = (t, \theta), (t, \theta) \in \mathbb{R} \times \Gamma, \quad (2)$$

где

$$\Delta_{r, \theta} = (r - R) \frac{\partial}{\partial r} \left((R - r) \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}, \Delta_{\theta} = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}, \partial_R = \frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=R}. \quad (3)$$

К данной системе присовокупим условие согласования, что гарантирует единственность полученного решения:

$$\text{tr } u = v \text{ на } \mathbb{R} \times \Gamma, \quad (4)$$

и снабдим ее начальными условиями

$$(0, r, \theta) = u_0(r, \theta), v(0, \theta) = v_0(\theta). \quad (5)$$

Назовем решение задачи (1)–(5) *детерминированным решением* динамической системы Вентцеля. Если мы заменим u и v , заданные на Ω и Γ соответственно, на стохастические процессы $\xi = \xi(t)$ и $\chi = \chi(t)$, определенные на интервале $(0, \tau)$, получим стохастическую динамическую систему Вентцеля, где производная от стохастических процессов $\dot{\xi}(t)$, $\dot{\chi}(t)$ понимается как производная Нельсона–Гликлиха [2] от стохастического процесса $\xi = \xi(t)$ и $\chi = \chi(t)$ соответственно.

Поскольку собственные векторы оператора Лапласа в полярной системе координат содержат специальные функции, здесь символом $\Delta_{r, \theta}$ в (3) обозначен модифицированный оператор Лапласа в Ω , а в (3) символом Δ_{θ} обозначен модифицированный оператор Лапласа–Бельтрами на Γ . Символом ∂_R обозначена внешняя по отношению к Ω нормаль. Параметры $\alpha, \gamma, \lambda, \beta, \delta \in \mathbb{R}$ характеризуют среду.

В работе [3] исследуется разрешимость стохастического линейного уравнения соболевского типа

$$L\dot{\eta} = M\eta$$

при условии, что оператор M является (L, p) -ограниченным, где p может быть нулем или натуральным числом. Впоследствии в работах [4, 5] это уравнение было изучено для случаев, когда оператор M обладает свойствами (L, p) -секториальности и (L, p) -радиальности. Во всех этих исследованиях [3–5] рассматривались как классическая задача Коши, так и задача Шоултера–Сидорова. Стоит отметить работу [6], в которой рассматриваются более общие начально-конечные условия для стохастических уравнений соболевского типа. В [6] задачи Коши и Шоултера–Сидорова формулируются и исследуются для уравнений соболевского типа более высокого порядка. В [3] полученные теоретические результаты применяются к изучению разрешимости задач Коши и Шоултера–Сидорова для стохастического уравнения Баренблатта–Желтова–Кочиной. В [7] решается задача стабилизации для этого же уравнения. В [8] исследуется система Вентцеля для стохастического уравнения Баренблатта–Желтова–Кочиной в круге и на его границе и доказывается существование решений. Настоящая работа посвящена изучению устойчивости решений стохастической динамической системы уравнений Вентцеля в круге и на его границе, а также решению задачи стабилизации для неустойчивых решений этой системы.

Работа помимо введения и списка литературы состоит из четырех частей. В первой части рассматривается существование и единственность детерминированной динамической системы Вентцеля в круге и на ее границе. Вторая часть содержит устойчивость полученного решения для детерминированной динамической системы Вентцеля. Третья часть содержит стабилизацию решения для детерминированной динамической системы Вентцеля. Четвертая часть содержит стабилизацию решения для стохастической динамической системы Вентцеля.

Аналитическое решение детерминированной системы Вентцеля

Для получения аналитического решения детерминированной динамической системы Вентцеля (1)–(5) рассмотрим следующий ряд:

$$u = \sum_{k=2}^{\infty} \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) \frac{(R-r)^k}{2R^k} (a_k \cos k\theta + b_k \sin k\theta) + \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) (c_k \cos k\theta + d_k \sin k\theta), \quad (6)$$

где

$$a_k = \int_0^R \int_0^{2\pi} u_0(r, \theta) \frac{(R-r)^k}{2R^k} \cos k\theta \, d\theta \, r \, dr, \quad b_k = \int_0^R \int_0^{2\pi} u_0(r, \theta) \frac{(R-r)^k}{2R^k} \sin k\theta \, d\theta \, r \, dr$$

$$c_k = \int_0^{2\pi} v_0(\theta) \cos k\theta \, d\theta, \quad d_k = \int_0^{2\pi} v_0(\theta) \sin k\theta \, d\theta.$$

Нетрудно заметить, что построенный выше ряд является формальным решением уравнения (1). Причем если ряды в (6) равномерно сходятся, то перед нами решение задачи (1), (5), где $\partial_R u = 0$. Учитывая это, можно построить решение задачи (2), (5)

$$v = \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(t \frac{\delta - \gamma k^2}{\lambda + k^2}\right) (c_k \cos k\theta + d_k \sin k\theta), \quad (7)$$

где в случае $\alpha = \gamma$, $\beta = \delta$ решения задачи (1)–(5) будут удовлетворять условию согласования (4).

Замыкание $\text{span}\{(R^k)^{-1}(R-r)^k \cos k\theta, (R^k)^{-1}(R-r)^k \sin k\theta : k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}, r \in (0, R), \theta \in [0, 2\pi)\}$, порожденное скалярным произведением

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

обозначим символом $A(\Omega)$. Далее замыкание $\text{span}\{\cos k\theta, \sin k\theta, \theta \in [0, 2\pi)\}$ по норме, порожденной скалярным произведением

$$\langle \varphi, \psi \rangle_{A(\Gamma)} = \int_0^{2\pi} \varphi(\theta) \psi(\theta) d\theta,$$

обозначим символом $A(\Gamma)$. Таким образом, доказана следующая теорема.

Теорема 1. Для любых $u_0 \in A(\Omega)$ и $v_0 \in A(\Gamma)$, таких, что выполнено условие согласования, и для коэффициентов $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda \in \mathbb{R}$, таких, что выполнено следующее условие $\alpha = \gamma$, $\beta = \delta$, а $\frac{\beta}{\alpha} \neq k^2, \lambda \neq k^2$, где $k \in \mathbb{N}$, существует единственное решение $(u, v) \in C^\infty(\mathbb{R}; A(\Omega) \oplus A(\Gamma))$ динамической системы Вентцеля, состоящей из уравнений Баренблатта–Желтова–Кочиной (1)–(2).

Устойчивость решений детерминированной системы Вентцеля

Пусть $U = A(\Omega) \oplus A(\Gamma)$. Норма $\|\cdot\|_U = \|\cdot\|_{A(\Omega)} + \|\cdot\|_{A(\Gamma)}$, где $\|\cdot\|_{A(\Omega)}$ и $\|\cdot\|_{A(\Gamma)}$ порождаются скалярными произведениями в $A(\Omega)$ и $A(\Gamma)$.

Определение 1. Решение $u = u(t)$ системы (1)–(5) экспоненциально устойчиво, если существуют такие константы $N > 0$ и $\nu > 0$, что при всех $t \in \mathbb{R}_+$ и любых $u_0 \in A(\Omega)$, $v_0 \in A(\Gamma)$ решение $u = u(t)$ системы (1)–(5) удовлетворяет экспоненциальной оценке

$$\|u(t)\|_U \leq N e^{-\nu t} (\|u_0\|_{A(\Omega)} + \|v_0\|_{A(\Gamma)}).$$

Определение 2. Решение $u = u(t)$ системы (1)–(5) называется неустойчивым, если существует $\varepsilon > 0$ при некоторых $u_0 \in A(\Omega)$, $v_0 \in A(\Gamma)$ и $t > 0$ выполнено

$$\|u(t) - u_0\|_{A(\Omega)} + \|u(t) - v_0\|_{A(\Gamma)} \geq \varepsilon.$$

Теорема 2. Пусть $\alpha = \gamma$, $\beta = \delta$, $-\lambda \neq k^2$, $\frac{\beta}{\alpha} \neq k^2$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$. Если $\alpha > \beta$, $\lambda > -1$, тогда при любых $u_0 \in A(\Omega)$, $v_0 \in A(\Gamma)$ решение системы (1)–(5) экспоненциально устойчиво.

Действительно, $\frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2} < 0$ при $\alpha > \beta$, $\lambda > -1$. Обозначим $-\nu_1 = \max \left\{ \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}, k \in \mathbb{N} \right\}$. Тогда

справедлива оценка $\exp\left(\frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2} t\right) \leq e^{-\nu_1 t}$, $\nu_1 > 0$. Для решения $u = u(t)$ системы (1)–(5) выполнено

$$u = \left\| \sum_{k=2}^{\infty} \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) \frac{(R-r)^k}{2R^k} (a_k \cos k\theta + b_k \sin k\theta) \right\|_{A(\Omega)} + \left\| \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) (c_k \cos k\theta + d_k \sin k\theta) \right\|_{A(\Gamma)} \leq C_1 e^{-\nu_1 t} \|u_0\|_{A(\Omega)} + C_2 e^{-\nu_1 t} \|v_0\|_{A(\Gamma)}.$$

Теорема 3. Пусть $\alpha = \gamma$, $\beta = \delta$, $-\lambda \neq k^2$, $\frac{\beta}{\alpha} \neq k^2$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$. Если $\alpha > \beta$, $\lambda < -1$, тогда при любых $u_0 \in A(\Omega)$, $v_0 \in A(\Gamma)$ решение системы (1)–(5) неустойчиво.

Пусть $\alpha > \beta$, $\lambda < -1$. Тогда $\frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2} < 0$ при $\lambda > -k^2$ и $\frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2} > 0$ при $\lambda < -k^2$. Обозначим

$$-\nu_1 = \max \left\{ \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}, \lambda > -k^2 \right\}, \nu_2 = \min \left\{ \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}, \lambda < -k^2 \right\}, \nu_1, \nu_2 > 0, \text{ и } m = \max \{k : \lambda < -k^2\}.$$

Тогда решение $u = u(t)$ системы (1)–(5) можно представить в виде $u = u_1 + u_2$, где

$$u_1(t) = \sum_{k=m+1}^{\infty} \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) \frac{(R-r)^k}{2R^k} (a_k \cos k\theta + b_k \sin k\theta) + \sum_{k=m}^{\infty} \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) (c_k \cos k\theta + d_k \sin k\theta), \quad (9)$$

$$u_2(t) = \sum_{k=2}^m \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) \frac{(R-r)^k}{2R^k} (a_k \cos k\theta + b_k \sin k\theta) + \sum_{k=1}^{m-1} \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) (c_k \cos k\theta + d_k \sin k\theta), \quad (10)$$

Справедливы следующие оценки:

$$\|u_1(t)\|_U \leq C_3 e^{-\nu_1 t} \|u_0\|_{A(\Omega)} + C_4 e^{-\nu_1 t} \|v_0\|_{A(\Gamma)}, \quad (11)$$

$$\|u_2(t)\|_U \leq C_5 e^{-\nu_2 t} \|u_0\|_{A(\Omega)} + C_6 e^{-\nu_2 t} \|v_0\|_{A(\Gamma)}, \quad (12)$$

Очевидно, решение $u = u(t)$ системы (1)–(5) неустойчиво.

Стабилизация решений детерминированной системы Вентцеля

Пусть коэффициенты $\alpha = \gamma$, $\beta = \delta$, $-\lambda \neq k^2$, $\frac{\beta}{\alpha} \neq k^2$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$, $\alpha > \beta$, $\lambda < -1$. Тогда в силу теоремы 3 решение $u = u(t)$ системы (1)–(5) неустойчиво. Поставим следующую задачу стабилизации. Требуется найти такое управление в области f_u и на границе области f_v , что решения системы

$$(\lambda - \Delta_{r,\theta})u_t = \alpha \Delta_{r,\theta} u + \beta u + f_u, u = u(t, r, \theta), (t, r, \theta) \in \mathbb{R} \times \Omega, \quad (13)$$

$$(\lambda - \Delta_\theta)v_t = \gamma \Delta_\theta v + \partial_R u + \delta v + f_v, v = v(t, \theta), (t, \theta) \in \mathbb{R} \times \Gamma, \quad (14)$$

$$\text{tr } u = v \text{ на } \mathbb{R} \times \Gamma, \quad (15)$$

будут экспоненциально устойчивы. Управление f_u и f_v будем искать с помощью контура обратной связи

$$f_u = Bu, f_v = Bv, \quad (16)$$

где B – линейный оператор.

Обозначим через n номер максимального значения

$$\left\{ \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}, \lambda < -k^2 \right\}.$$

Оператор B можно представить в виде

$$B = \begin{cases} \mathbb{O}, \lambda > -k^2; \\ (\varepsilon - \beta + \alpha n)\mathbb{I}, \lambda < -k^2. \end{cases} \quad (17)$$

Тогда решение системы (1)–(5), замкнутой контуром обратной связи (17), имеет вид

$$u(t) = u_1(t) + \sum_{k=2}^m \exp\left(t \frac{\varepsilon + \alpha n - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) \frac{(R-r)^k}{2R^k} (a_k \cos k\theta + b_k \sin k\theta) + \sum_{k=1}^{m-1} \exp\left(t \frac{\varepsilon + \alpha n - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) (c_k \cos k\theta + d_k \sin k\theta) \quad (18)$$

и в силу (11) экспоненциально устойчиво. Справедлива

Теорема 4. Пусть $\alpha = \gamma$, $\beta = \delta$, $-\lambda \neq k^2$, $\frac{\beta}{\alpha} \neq k^2$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$. Если $\alpha > \beta$, $\lambda < -1$, тогда при любых $u_0 \in A(\Omega)$, $v_0 \in A(\Gamma)$ решение системы (13)–(15), замкнутое обратной связью (16), где оператор B имеет вид (17), экспоненциально устойчиво.

Стабилизация решений стохастической системы Вентцеля

Пусть $U = \{u \in W_2^2(\Omega) \oplus W_2^2(\Gamma) : \partial_R u = 0\}$, $F = L_2(\Omega) \oplus L_2(\Gamma)$. Следуя [9] построим пространства случайных K -величин. Случайные K -величины ξ , $\chi \in U_K L_2$ имеют вид

$$\xi = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \xi_k \varphi_k, \chi = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \chi_k \psi_k, \quad (19)$$

где $\{\varphi_k\}$ – семейство собственных функций модифицированного оператора Лапласа–Бельтрами $\Delta_{r,\theta} \in \mathcal{L}(U; F)$ ортонормированных в смысле скалярного произведения $\langle \cdot, \cdot \rangle$ из $L_2(\Omega)$; $\{\psi_k\}$ – семейство собственных функций модифицированного оператора Лапласа – Бельтрами $\Delta_\theta \in \mathcal{L}(U; F)$ ортонормированных в смысле скалярного произведения $\langle \cdot, \cdot \rangle$ из $L_2(\Gamma)$. Норму в $U_K L_2$ зададим формулой

$$\|\xi\|_{U_K L_2} + \|\chi\|_{U_K L_2} = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 D \xi_k + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 D \chi_k.$$

Рассмотрим стохастическую систему Вентцеля:

$$(\lambda - \Delta_{r,\theta}) \overset{\circ}{\xi}(t) = \alpha \Delta_{r,\theta} \xi(t) + \beta \xi(t), t \in (0, \tau), \xi \in \Omega, \quad (20)$$

$$(\lambda - \Delta_\theta) \overset{\circ}{\chi}(t) = \gamma \Delta_\theta \chi(t) + \delta \chi(t), t \in (0, \tau), \chi \in \Gamma. \quad (21)$$

К данной системе присовокупим условие согласования, что гарантирует единственность полученного решения

$$\text{tr } \xi(t) = \chi(t), \quad (22)$$

и снабдим ее начальными условиями

$$\xi(0) = \xi_0, \chi(0) = \chi_0. \quad (23)$$

Рассмотрим следующий ряд:

$$\xi(t) = \sum_{k=2}^{\infty} \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) \frac{(R-r)^k}{2R^k} (a_k \cos k\theta + b_k \sin k\theta) + \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(t \frac{\beta - \alpha k^2}{\lambda + k^2}\right) (c_k \cos k\theta + d_k \sin k\theta), \quad (24)$$

где

$$a_k = \int_0^R \int_0^{2\pi} \xi_0 \frac{(R-r)^k}{2R^k} \cos k\varphi d\theta dr, \quad b_k = \int_0^R \int_0^{2\pi} \xi_0 \frac{(R-r)^k}{2R^k} \sin k\varphi d\theta dr$$

$$c_k = \int_0^{2\pi} \chi_0 \cos k\varphi d\theta, \quad d_k = \int_0^{2\pi} \chi_0 \sin k\varphi d\theta.$$

Нетрудно заметить, что построенный выше ряд является формальным решением уравнения (20). Причем если ряды в (24) равномерно сходятся, то перед нами решение задачи (20), (23), где $\partial_R u = 0$. Учитывая это, можно построить решение задачи (21), (23)

$$\chi(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(t \frac{\delta - \gamma k^2}{\lambda + k^2}\right) (c_k \cos k\theta + d_k \sin k\theta), \quad (25)$$

где в случае $\alpha = \gamma, \beta = \delta$ решения задачи (20)–(23) будут удовлетворять условию согласования (22).

Теорема 5. Для любых $\xi_0 \in U_K L_2(\Omega)$ и $\chi_0 \in U_K L_2(\Gamma)$ и коэффициентов $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda \in \mathbb{R}$, таких, что $\alpha = \gamma, \beta = \delta$, а $\lambda \neq k^2, \frac{\beta}{\alpha} \neq k^2$, где $k \in \mathbb{N}$, существует единственное решение $\xi \in C^\infty(\mathbb{R}_+; U_K L_2)$ стохастической системы Вентцеля (20)–(23).

Определение 3. Решение $\xi = \xi(t)$ системы (20)–(23) экспоненциально устойчиво, если существуют такие константы $N > 0$ и $\nu > 0$, что при всех $t \in \mathbb{R}_+$ и любых $\xi_0 \in U_K L_2(\Omega)$ и $\chi_0 \in U_K L_2(\Gamma)$ решение $\xi = \xi(t)$ системы (20)–(23) удовлетворяет экспоненциальной оценке

$$\|\xi(t)\|_{U_K L_2} \leq N e^{-\nu t} (\|\xi_0\|_{U_K L_2} + \|\chi_0\|_{U_K L_2}). \quad (26)$$

Определение 4. Решение $\xi = \xi(t)$ системы (20)–(23) называется неустойчивым, если существует $\varepsilon > 0$ при некоторых $\xi_0 \in U_K L_2(\Omega)$ и $\chi_0 \in U_K L_2(\Gamma)$ и $t > 0$ выполнено

$$\|\xi(t) - \xi_0\|_{U_K L_2} + \|\chi(t) - \chi_0\|_{U_K L_2} \geq \varepsilon.$$

Теорема 6. Пусть $\alpha = \gamma$, $\beta = \delta$, $-\lambda \neq k^2$, $\frac{\beta}{\alpha} \neq k^2$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$. Если $\alpha > \beta$, $\lambda > -1$, тогда при любых $\xi_0 \in U_K L_2(\Omega)$ и $\chi_0 \in U_K L_2(\Gamma)$ решение системы (20)–(23) экспоненциально устойчиво.

Теорема 7. Пусть $\alpha = \gamma$, $\beta = \delta$, $-\lambda \neq k^2$, $\frac{\beta}{\alpha} \neq k^2$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$. Если $\alpha > \beta$, $\lambda < -1$, тогда при любых $\xi_0 \in U_K L_2(\Omega)$ и $\chi_0 \in U_K L_2(\Gamma)$ решение системы (20)–(23) неустойчиво.

Пусть коэффициенты $\alpha = \gamma$, $\beta = \delta$, $-\lambda \neq k^2$, $\frac{\beta}{\alpha} \neq k^2$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$, $\alpha > \beta$, $\lambda < -1$. Тогда в силу теоремы 3 решение $u = u(t)$ системы (20)–(23) неустойчиво. Поставим следующую задачу стабилизации. Требуется найти такое управление в области η_ξ и на границе области η_χ , что решения системы

$$(\lambda - \Delta_{r,\theta}) \overset{\circ}{\xi}(t) = \alpha \Delta_{r,\theta} \xi(t) + \beta \xi(t) + \eta_\xi, t \in (0, \tau), \xi \in \Omega, \quad (27)$$

$$(\lambda - \Delta_{r,\theta}) \overset{\circ}{\xi}(t) = \alpha \Delta_{r,\theta} \xi(t) + \beta \xi(t) + \eta_\xi, t \in (0, \tau), \xi \in \Omega, \quad (28)$$

$$\text{tr } \xi(t) = \chi(t) \quad (29)$$

будут экспоненциально устойчивы. Управление η_ξ и η_χ будем искать с помощью контура обратной связи

$$\eta_\xi = B \overset{\circ}{\xi}, \eta_\chi = B \chi, \quad (30)$$

где B – линейный оператор.

Теорема 8. Пусть $\alpha = \gamma$, $\beta = \delta$, $-\lambda \neq k^2$, $\beta/\alpha \neq k^2$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$. Если $\alpha k^2 > \beta$, $\lambda < -1$, тогда при любых $\xi_0 \in U_K L_2(\Omega)$ и $\chi_0 \in U_K L_2(\Gamma)$ решение системы (27)–(29), замкнутое обратной связью (30), где оператор B имеет вид (17), экспоненциально устойчиво.

Все рассуждения и оценки при доказательстве теорем 5–8 аналогичны детерминированному случаю и поэтому не приводятся.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда 25-21-20017, <https://rscf.ru/project/25-21-20017/>.

Литература

1. Баренблатт, Г.И. Об основных представлениях теории фильтрации в трещиноватых средах / Г.И. Баренблатт, Ю.П. Желтов, И.Н. Кочина // Приклад. математика и механика. – 1960. – Т. 24, № 5. – С. 852–864.
2. Gliklikh, Yu.E. Global and Stochastic Analysis with Applications to Mathematical Physics / Yu.E. Gliklikh. – Springer, London, Dordrecht, Heidelberg, N.-Y. – 2011. – 436 p.
3. Свиридюк, Г.А. Динамические модели соболевского типа с условием Шоуолтера–Сидорова аддитивными шумами / Г.А. Свиридюк, Н.А. Манакова // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2014. – Т. 7, № 1. – С. 90–103.
4. Favini, A. Linear Sobolev Type Equations with Relatively p -Sectorial Operators in Space of “Noises” / A. Favini, G.A. Sviridyuk, N.A. Manakova // Abstract and Applied Analysis. – 2015. – Vol. 2015. – Article ID 697410. – 8 p.
5. Favini, A. Multipoint Initial-Final Value Problems for Dynamical Sobolev-type Equations in the Space of Noises / A. Favini, S.A. Zagrebina, G.A. Sviridyuk // Electronic Journal of Differential Equations. – 2018. – Vol. 2018, no. 128. – P. 1–10.
6. Favini, A. One Class of Sobolev Type Equations of Higher Order with Additive “White Noise” / A. Favini, G.A. Sviridyuk, A.A. Zamyshlyayeva // Communications on Pure and Applied Analysis. – Springer, 2016. – Vol. 15, no. 1. – P. 185–196.

7. Kitaeva, O.G. Stabilization of the Stochastic Barenblatt–Zhel'tov–Kochina Equation / O.G. Kitaeva // *Journal of Computational and Engineering Mathematics*. – 2023. – Vol. 10, no. 1. – P. 21–29.

8. Goncharov, N.S. Analysis of the Stochastic Wentzell System of Fluid Filtration Equations in a Circle and on its Boundary / N.S. Goncharov G.A. Sviridyuk // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика»*. – 2023. – Т. 15, № 3. – С. 15–22.

Поступила в редакцию 8 июля 2025 г.

Сведения об авторах

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

Китаева Ольга Геннадьевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры уравнений математической физики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: kitaevaog@susu.ru.

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

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2025, vol. 17, no. 3, pp. 5–12

DOI: 10.14529/mmp250301

STABILIZATION OF SOLUTIONS FOR THE WENTZELL STOCHASTIC DYNAMICAL SYSTEM IN A CIRCLE AND ON ITS BOUNDARY

N.S. Goncharov, O.G. Kitaeva, G.A. Sviridyuk

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: goncharovns@susu.ru

Abstract. The paper considers the problem of stabilizing the solutions of the deterministic and stochastic Wenzel equations, which describe the filtration of a liquid in a circle and on its boundary. The authors address the issue of exponential stability and instability of the deterministic Wentzell equations solutions. They consider different signs of the parameters that describe the medium and the properties of the liquid. The instability gives rise to solving the problem of stabilization using a feedback loop. The obtained results are used in the stochastic Wentzell equations. The Nelson–Gleich derivative is considered, and a stochastic process is a solution.

Keywords: *stochastic dynamic system of Wentzell equations; the Barenblatt–Zhel'tov–Kochina equation; the Nelson–Gleich derivative; instable solution; solution stabilization.*

References

1. Barenblatt G.I., Zhel'tov Iu.P., Kochina I.N. Basic Concepts in the Theory of Seepage of Homogeneous Liquids in Fissured Rocks [Strata]. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 1960, Vol. 24, Iss. 5, pp. 1286–1303. DOI: 10.1016/0021-8928(60)90107-6

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

3. Sviridyuk G.A., Manakova N.A. The Dynamical Models of Sobolev Type with Showalter–Sidorov Condition and Additive “Noise”. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2014, Vol. 7, no. 1. pp. 90–103. (in Russ.). DOI: 10.14529/mmp140108

4. Favini A., Sviridiuk G.A., Manakova N.A. Linear Sobolev Type Equations with Relatively p-Sectorial Operators in Space of “Noises”. *Abstract and Applied Analysis*, 2015, Vol. 2015, Article ID 697410, 8 p. DOI: 10.1155/2015/697410

5. Favini A., Zagrebina S.A., Sviridiuk G.A. Multipoint Initial-Final Value Problems for Dynamical Sobolev-Type Equations in the Space of Noises. *Electronic Journal of Differential Equations*, 2018, Vol. 2018, no. 128, pp. 1–10.

6. Favini A., Sviridyuk G. A., Zamyshlyayeva A.A. One Class of Sobolev Type Equations of Higher Order with Additive “White Noise”. *Communications on Pure and Applied Analysis*, 2016, Vol. 15, Iss. 1, pp. 185–196. DOI: 10.3934/cpaa.2016.15.185

7. Kitaeva O.G. Stabilization of the Stochastic Barenblatt–Zhel'tov–Kochina Equation. *Journal of Computational and Engineering Mathematics*, 2023, Vol. 10, no. 1, pp. 21– 29. DOI: 10.14529/jcem230103

8. Goncharov N.S., Sviridiuk G.A. Analysis of the Stochastic Wentzell System of Fluid Filtration Equations in a Circle and on its Boundary. *Bulletin of the South Ural State University. Series: “Mathematics. Mechanics. Physics”*, 2023, Vol. 15, Iss. 3, pp. 15–22. DOI: 10.14529/mmph230302

Received July 8, 2025

Information about the authors

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

Kitaeva Olga Gennadevna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Mathematical Physics Equations, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: kitaevaog@susu.ru.

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

GENERALIZED SOLVABILITY OF INITIAL-BOUNDARY VALUE PROBLEMS FOR QUASIHYDRODYNAMIC SYSTEM OF EQUATIONS IN WEIGHTED SOBOLEV SPACES

F.A. Evseev^{1,2}

¹ Yugra State University, Khanty-Mansiysk, Russian Federation

² V.I. Shpilman Research and Analytical Center for the Rational Use of the Subsoil, Khanty-Mansiysk, Russian Federation

E-mail: fedor_evseev@rambler.ru

Abstract. The paper considers the analog of the first initial boundary value problem for a quasihydrodynamic system of equations in the case of a weakly compressible fluid in weighted Sobolev spaces. The system is an elliptic-parabolic system: its first part is an elliptic equation for the pressure gradient, and its second part is a parabolic system for the velocity vector. The unknown variables of the pressure gradient and velocity vector belong to the principal parts of the elliptic equation and the parabolic system. The fixed part of the system is not uniformly elliptic, thus complicating the study of the problem. T.G. Elizarova and B.N. Chetverushkin introduce the system by averaging the known kinetic model. The first versions of the system are the system of quasi-gasodynamic equations. Later, Y.V. Sheretov, based on a more general equation of state, obtains another model, which is called quasihydrodynamic system of equations, and thoroughly analyses its properties. However, the issues of generalized solvability of initial boundary value problems for such systems have not been studied in detail yet. There are only some partial results. The paper aims to fill this gap. We prove generalized solvability of the system in some weight classes characterizing the behavior of solutions at $t \rightarrow \infty$ according to the Galerkin method and the obtained prior estimates. The decreasing (growing) behavior of the solution depends on the decreasing (growing) right-hand side of the system. The decrease (growth) at $t \rightarrow \infty$ of the used weight functions can be both exponential and power.

Keywords: Initial-boundary value problem; quasihydrodynamic system; prior estimates; weight functions; existence theorem.

Introduction. We consider a quasihydrodynamic system of equations in the case of a weakly compressible fluid:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \bar{u} &= \operatorname{div} \bar{w}, \quad \bar{w} = \tau \left((\bar{u}, \nabla) \bar{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \bar{f} \right), \quad (t, x) \in Q = (0, \infty) \times G, \quad G \subset \mathbb{R}^3, \\ \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} - \bar{w}, \nabla) \bar{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p &= \bar{f} + \mu \Delta \bar{u} + \mu \nabla (\bar{u}) + (\bar{u}, \nabla) \bar{w} + \bar{w} \operatorname{div} \bar{u}, \quad \mu = \eta / \rho. \end{aligned} \quad (1)$$

where G is bounded domain with boundary $\Gamma \in C^2$, $\mu = \eta / \rho$ is kinematic viscosity coefficient. Density ρ , dynamic viscosity μ and characteristic relaxation time τ are positive constants. Vector field $\bar{f} = \bar{f}(x, t)$ determines the mass density of external forces. The system (1) is closed with respect to the unknown functions, i. e. the velocity vector $\bar{u} = \bar{u}(x, t)$ and the pressure $p = p(x, t)$. Symbols div and ∇ denote the divergence and gradient, respectively.

We look for a solution to the system (1) satisfying the following initial and boundary conditions and the normalization condition:

$$\bar{u}|_{\Gamma} = 0, \quad \bar{w} \cdot \nu|_{\Gamma} = 0, \quad \bar{u}|_{t=0} = \bar{u}_0(x), \quad \int_G p(t, x) dx = 0, \quad (2)$$

where ν is the unit vector of the outward normal to Γ .

The system (1) in a more general form was derived in [1, 2] by averaging the known kinetic model. The first variants of the system are called the system of quasigasodynamic equations. The derivation of the system and some results can be found in the monographs [3, 4]. Later, using a more general equation

of state, another model known as quasihydrodynamic system of equations was developed in [5, 6]. In particular, a detailed analysis of the properties of this model is presented in the monograph [7]. Here, for a quasihydrodynamic system of equations in the case of a weakly compressible fluid (i.e., for system (1)), dissipative properties are investigated and a theorem of uniqueness of the classical solution to the main initial-boundary value problem is proven. Zlotnik A.A. in [8] constructed a system with a general regularizing velocity on the basis of a linearized (on a constant solution) quasihydrodynamic system of equations and established the degeneration of the parabolicity property of the original system. Later, for the first time, he constructed a quasigasodynamic type regularization of the heterogeneous model (in the quasihomogeneous form), for which the difference scheme an explicit two-layer in time and symmetric three-point in space in the 1D case was constructed [9]. In [10], a model based on quasigasodynamic and quasihydrodynamic equations in multiscale media is investigated, which can be used in applications to porous media theory. A computational multiscale method based on the idea of bond energy minimization was proposed to solve quasigasodynamics problems and improve the accuracy of simulations. Recently, regularized hydrodynamic equations of quasihydrodynamic type have been used in the numerical solution of a number of practical problems. Relevant results are exposed in [11–14]. Note that the system (1) is an elliptic-parabolic system and both equations, elliptic and parabolic, contain the senior derivatives of the unknown pressures p and the velocity vector \vec{u} . Such systems often arise in applications. In [15], to solve the problem of two-phase non-isothermal filtration, the authors consider a system consisting of one elliptic and two parabolic equations with known boundary conditions. The authors in [16], using the technique of Fourier multipliers, proved an a priori estimate for strong solutions to elliptic-parabolic equations of mixed type in Sobolev space. In [17], a family of models for the flow and transport of multiscale single-phase fluid in inhomogeneous porous media based on an elliptic-parabolic system consisting of an elliptic equation for steady-state flow and a parabolic equation for transient advection-diffusion is described. The existence and uniqueness theorems of generalized and regular solutions of an analog of the first initial boundary value problem for the system (1) are presented in [18, 19], respectively. The proof of the existence of generalized solution in [18] is based on the Galerkin method and a priori estimates. In [19], under certain conditions on the data, it is shown that there exists a unique regular solution of the initial-boundary value problem locally in time. The existence and uniqueness theorems for generalized and regular solutions to an initial-boundary value problems for a quasihydrodynamic system in the linearized case are presented in [20]. In the case of a regular solution, there are some restrictions on the norms of the data. The obtained results provide appropriate stability estimates for solutions to the original nonlinear problem.

In this paper we study the solvability of initial-boundary value problems for the system (1) in some weight classes characterizing the behavior of generalized solutions as $t \rightarrow \infty$.

Preliminaries

Let \vec{u}, p be a sufficiently smooth solution to the problem (1), (2). We say that $\vec{u} \in L_{2,loc}(0, \infty; E)$ (E is a Banach space), if $\vec{u} \in L_2(0, T; E)$ for any $T < \infty$. Let $\psi(t)$ be a non-negative function such that $\mu(\{t : \psi(t) = 0\}) = 0$. Here μ is the Lebesgue measure. By $L_{2,\psi}(0, \infty; E)$, we mean the space of measurable functions $\vec{u}(t)$ such that $\psi \vec{u} \in L_2(0, \infty; E)$. Let us multiply the first and second equation of the system by the functions φ and $\vec{\psi}$ respectively such that $\varphi \in L_2(0, \infty; W_2^1(G))$, $\int_G \varphi(x) dx = 0$, $\vec{\psi} \in L_2(0, \infty; W_2^1(G))$, $\vec{\psi}|_S = 0$, φ and $\vec{\psi}$ have bounded supports. Integrating the results over G , we arrive at the equalities:

$$\begin{aligned} \int_G \vec{u} \cdot \nabla \varphi dx &= \int_G \vec{w} \cdot \nabla \varphi dx = \tau((\vec{u}, \nabla) \vec{u}, \nabla \varphi) + \frac{\tau}{\rho}(\nabla p, \nabla \varphi) - \tau(\vec{f}, \nabla \varphi), \\ \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t}, \vec{\psi} \right) &+ \left(((\vec{u} - \vec{w}), \nabla) \vec{u}, \vec{\psi} \right) + \frac{1}{\rho}(\nabla p, \vec{\psi}) = (\vec{f}, \vec{\psi}) - \mu(\nabla \vec{u}, \nabla \vec{\psi}) - \\ &\mu(\vec{u}, \operatorname{div} \vec{\psi}) + ((\vec{u}, \nabla) \vec{w}, \vec{\psi}) + (\vec{w} \operatorname{div} \vec{u}, \vec{\psi}), \end{aligned} \quad (3)$$

where the point \cdot means the scalar product in R^3 and $(u, v) = \int_G uv dx$ for scalar functions and

$(\vec{u}, \vec{v}) = \int_G \vec{u} \cdot \vec{v} dx$ for vector functions. Integrating by parts, we have

$$((\vec{u}, \nabla) \vec{w}, \vec{\psi}) = \int_G ((\vec{u}, \nabla) \vec{w}) \cdot \vec{\psi} dG = - \int_G \operatorname{div} \vec{u} \vec{w} \cdot \vec{\psi} dG - \int_G ((\vec{u}, \nabla) \vec{\psi}) \cdot \vec{w} dG. \tag{4}$$

Using this equality in (3), we obtain the equations

$$(\vec{u}, \nabla \varphi) = (\vec{w}, \nabla \varphi), \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t}, \vec{\psi} \right) - ((\vec{u} - \vec{w}, \nabla) \vec{\psi}, \vec{u}) + \frac{1}{\rho} (\nabla p, \vec{\psi}) + \mu (\nabla \vec{u}, \nabla \vec{\psi}) + \mu (\operatorname{div} \vec{u}, \operatorname{div} \vec{\psi}) + ((\vec{u}, \nabla) \vec{\psi}, \vec{w}) = (\vec{f}, \vec{\psi}), \tag{5}$$

valid for almost all t . Equalities (5) can serve as a basis for defining a generalized solution to the problem. Let $p_0 \in [1, 3/2]$, $q_0 = 2p_0 / (4p_0 - 3)$, $p_1 = 5/4$. Then $q_0 \in [1, 2]$. Functions $\vec{u} \in L_{2,loc}(0, \infty; W_2^1(G)) \cap L_{\infty,loc}(0, \infty; L_2(G))$, $u_t \in L_{p_1,loc}(0, \infty; W_{p_1}^{-1}(G))$, $p \in L_{p_1}(0, \infty; W_{p_1}^1(G))$ such that $\frac{\nabla p}{\rho} + (\vec{u}, \nabla) \vec{u} \in L_{2,loc}(0, \infty; L_2(G))$, satisfying (2) are called generalized solutions of the problem (1), (2) if

$$\int_0^\infty ((\vec{u}, \nabla \varphi) dt = \int_0^\infty (\vec{w}, \nabla \varphi) dt, \int_0^\infty \left[\left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t}, \vec{\psi} \right) - ((\vec{u} - \vec{w}, \nabla) \vec{\psi}, \vec{u}) + \frac{1}{\rho} (\nabla p, \vec{\psi}) + \mu (\nabla \vec{u}, \nabla \vec{\psi}) + \mu (\operatorname{div} \vec{u}, \operatorname{div} \vec{\psi}) + ((\vec{u}, \nabla) \vec{\psi}, \vec{w}) \right] dt = \int_0^\infty (\vec{f}, \vec{\psi}) dt,$$

for all functions $\varphi \in L_2(0, \infty; W_2^1(G))$ with $\int_G \varphi(t, x) dx = 0$, $\vec{\psi} \in L_5(0, \infty; W_5^1(G))$ and $\vec{\psi}|_S = 0$, having a bounded support in t . Let

$$a(\vec{u}, \vec{\psi}) = \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t}, \vec{\psi} \right) - ((\vec{u} - \vec{w}, \nabla) \vec{\psi}, \vec{u}) + \frac{1}{\rho} (\nabla p, \vec{\psi}) + \mu (\nabla \vec{u}, \nabla \vec{\psi}) + \mu (\vec{u}, \operatorname{div} \vec{\psi}) + ((\vec{u}, \nabla) \vec{\psi}, \vec{w}).$$

The main results

Let's introduce an auxiliary weight function. We consider several different cases. In the former case $\beta(t) = e^{\gamma t}$ ($\gamma \neq 0, \gamma < \mu / 2\delta_0$), where δ_0 is the constant δ_0 from Poincaré's inequality

$$\int_G |\vec{u}|^2 dx \leq \delta_0 \int_G |\nabla \vec{u}|^2 dx,$$

valid for all $\vec{u} \in W_2^1(G)$, such that $\vec{u}|_\Gamma = 0$. In the second case $\beta(t) = (M + t)^\gamma$ ($\gamma \neq 0$), where $M > 0$ is some constant, which will be chosen below.

Theorem. Let $f \sqrt{\beta} \in L_2(Q)$, $u_0 \in L_2(G)$. Then there exists a generalized solution of the problem (1), (2) such that $\sqrt{\beta} u \in L_2(0, \infty; W_2^1(G))$, $\sqrt{\beta} u \in L_\infty(0, \infty; L_2(G))$, $\beta(u, \nabla) u \in L_2(Q)$,

$$\sqrt{\beta} \left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\vec{u}, \nabla) \vec{u} \right) \in L_2(Q), \quad \beta(u, \nabla) u \in L_{q_0}(0, \infty; L_{p_0}(G)) \quad \text{for any } p_0 \in [1, 3/2],$$

$\nabla p \beta^\alpha \in L_{q_0}(0, \infty; L_{p_0}(G))$, $\vec{u}_t \beta^\alpha \in L_{q_0}(0, \infty; W_{p_0}^{-1}(G))$ for any $p_0 \in [1, 3/2]$ and for all α such that

$\alpha < 1/2$ if $\beta = e^{\gamma t}$ ($\gamma > 0$) and $\alpha < \frac{1}{2} - \frac{2 - q_0}{2|\beta|q_0}$ if $\beta = (t + M)^{-\gamma}, \beta < 0$; the case of $\alpha = \frac{1}{2}$ is possible

when $q_0 = 2$; $\alpha > \frac{1}{2} + \frac{2 - q_0}{2|\beta|q_0}$ and $\alpha \geq 1$ if $\beta = (t + M)^{-\gamma}, \beta > 0$; $\alpha \geq 1$ if $\beta = e^{\gamma t}$ ($\gamma < 0$).

Proof. First, we derive the first a priori estimate with weight β for smooth solutions to the problem. Take $\varphi = p\beta$, $\bar{\psi} = \beta\bar{u}$ in the definition of a generalized solution. We obtain the equalities

$$\begin{aligned} & \tau((\bar{u}, \nabla)\bar{u}, \beta\nabla p) + \frac{\tau}{\rho}(\nabla p, \beta\nabla p) - \tau(\bar{f}, \beta\nabla p) - (\bar{u}, \beta\nabla p) = 0, \\ & \left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial t}, \bar{u}\beta\right) - \left((\bar{u} - \bar{w}, \nabla)\bar{u}, \bar{u}\beta\right) + \frac{1}{\rho}(\nabla p, \bar{u}\beta) + \mu(\nabla\bar{u}, \nabla\bar{u}\beta) + \mu(\operatorname{div}\bar{u}, \operatorname{div}\bar{u}\beta) + \\ & \left((\bar{u}, \nabla)\bar{u}\beta, \left(\tau(\bar{u}, \nabla)\bar{u} + \frac{\tau}{\rho}\nabla p - \tau\bar{f}\right)\right) = (\bar{f}, \bar{u}\beta). \end{aligned} \tag{6}$$

Dividing the first equality in (6) by ρ and adding it to the second equality and using the equality $((\bar{u} - \bar{w}, \nabla)\bar{u}, \bar{u}) = 0$, we obtain that

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_G \frac{|\bar{u}|^2 \beta}{2} dx - \int_G \frac{|\bar{u}|^2 \beta_t}{2} dx + \mu(\nabla\bar{u}, \nabla\bar{u}\beta) + \mu(\operatorname{div}\bar{u}, \operatorname{div}\bar{u}\beta) + \frac{\tau}{\rho^2}(\nabla p, \beta\nabla p) + \\ & \frac{\tau}{\rho}((\bar{u}, \nabla)\bar{u}, \beta\nabla p) - \frac{\tau}{\rho}(\bar{f}, \beta\nabla p) - \frac{1}{\rho}(\bar{u}, \beta\nabla p) + \frac{1}{\rho}(\nabla p, \bar{u}\beta) + \tau((\bar{u}, \nabla)\bar{u}, (\bar{u}, \nabla)\bar{u}\beta) + \\ & \frac{\tau}{\rho}(\nabla p, (\bar{u}, \nabla)\bar{u}\beta) - \tau((\bar{u}, \nabla)\bar{u}, \bar{f}\beta) = (\bar{f}, \bar{u}\beta). \end{aligned} \tag{7}$$

Transforming this equality, we conclude that

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_G \frac{(|\bar{u}|^2 \beta)}{2} dx - \int_G \frac{(|\bar{u}|^2 \beta_t)}{2} dx + \mu(\nabla\bar{u}, \nabla\bar{u}\beta) + \mu(\operatorname{div}\bar{u}, \operatorname{div}\bar{u}\beta) + \\ & \frac{\tau}{\rho^2}(\nabla p, \nabla p, \beta) + \tau((\bar{u}, \nabla)\bar{u}, (\bar{u}, \nabla)\bar{u}\beta) + \frac{2\tau}{\rho}((\bar{u}, \nabla)\bar{u}, \nabla p, \beta) - \\ & \frac{\tau}{\rho}(\bar{f}, \nabla p, \beta) - \tau((\bar{u}, \nabla)\bar{u}, \bar{f}, \beta) = (\bar{f}, \bar{u}\beta), \\ & \frac{\partial}{\partial t} \int_G \frac{|\bar{u}|^2 \beta}{2} dx - \int_G \frac{|\bar{u}|^2 \beta_t}{2} dx + \mu(\nabla\bar{u}, \nabla\bar{u}\beta) + \mu(\operatorname{div}\bar{u}, \operatorname{div}\bar{u}\beta) + \\ & \tau\left(\beta\left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla)\bar{u}\right), \left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla)\bar{u}\right)\right) = \tau\left(\bar{f}, \frac{\nabla p}{\rho}\beta + (\bar{u}, \nabla)\bar{u}\beta\right) + (\bar{f}, \bar{u}\beta). \end{aligned} \tag{8}$$

Estimate the right-hand side using the Cauchy inequality

$$|ab| \leq \frac{\varepsilon}{2}a^2 + \frac{1}{2\varepsilon}b^2, (\varepsilon > 0). \tag{10}$$

We have that

$$\tau\left|\bar{f}, \frac{\nabla p}{\rho}\beta + (\bar{u}, \nabla)\bar{u}\beta\right| \leq \tau \int_G \frac{|\bar{f}|^2 \beta}{2} dx + \frac{\tau}{2} \int_G \left|\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla)\bar{u}\right|^2 \beta dx \tag{11}$$

$$|(\bar{f}, \bar{u}\beta)| \leq \frac{\varepsilon}{2} \int_G |\bar{u}|^2 \beta dx + \int_G |\bar{f}|^2 \beta dx \frac{1}{2\varepsilon}. \tag{12}$$

Using these inequalities in (9), we obtain

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_G \frac{|\bar{u}|^2 \beta}{2} dx - \int_G \frac{|\bar{u}|^2 \beta_t}{2} dx + \mu(\nabla\bar{u}, \nabla\bar{u}\beta) + \mu(\operatorname{div}\bar{u}, \operatorname{div}\bar{u}\beta) + \\ & \frac{\tau}{2}\left(\beta\left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla)\bar{u}\right), \left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla)\bar{u}\right)\right) \leq \frac{\tau}{2} \int_G |\bar{f}|^2 \beta dx + \frac{1}{2\varepsilon} \int_G |\bar{f}|^2 \beta dx + \frac{\varepsilon\delta_0}{2} \int_G |\nabla\bar{u}|^2 \beta dx. \end{aligned} \tag{13}$$

Let's take $\varepsilon = \mu/\delta_0$. We conclude that

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_G \frac{|\bar{u}|^2}{2} \beta dx - \int_G \frac{|\bar{u}|^2}{2} \beta_t dx + \frac{\mu}{2} (\nabla \bar{u}, \nabla \bar{u} \beta) + \mu (\operatorname{div} \bar{u}, \operatorname{div} \bar{u} \beta) + \frac{\tau}{2} \left(\beta \left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla) \bar{u} \right), \left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla) \bar{u} \right) \right) \leq \int_G |\bar{f}|^2 \beta dx \left(\frac{\tau}{2} + \frac{\delta_0}{2\mu} \right). \tag{14}$$

Consider the following two cases: a) $\beta_t < 0$, b) $\beta_t > 0$. Let $J = \frac{\mu}{4} (\nabla \bar{u}, \nabla \bar{u} \beta) + \mu (\operatorname{div} \bar{u}, \operatorname{div} \bar{u} \beta) + \frac{\tau}{2} \left(\beta \left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla) \bar{u} \right), \left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla) \bar{u} \right) \right)$. Integrating (14) from 0 to t , in case a) we obtain

$$\int_G \frac{|\bar{u}|^2}{2} \beta(t) dx + \int_0^t \int_G J dx dt \leq C_1 \int_0^t \int_G |\bar{f}|^2 \beta dx dt + \int_G \frac{u_0^2}{2} \beta(0) dx = M. \tag{15}$$

In the case b), we can rewrite the inequality (14) in the form

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_G \frac{|\bar{u}|^2}{2} \beta(t) dx + \int_G |\bar{u}|^2 \left(\frac{\mu \beta}{4\delta_0} - \frac{\beta_t}{2} \right) + J dx \leq \int_G |\bar{f}|^2 \beta dx \left(\frac{\tau}{2} + \frac{\delta_0}{2\mu} \right). \tag{16}$$

Let $\beta(t) = e^{\gamma t}$ ($\gamma > 0$). Since $\gamma \leq \mu / 2\delta_0$, (16) implies that the inequality (15) holds. Let $\beta = (t + M)^{-\gamma}$ ($\gamma < 0$). In this case, choosing a sufficiently large number of M ($\frac{\mu}{2\delta_0} + \frac{\gamma}{M} > 0$), we obtain the inequality $\frac{\mu \beta}{4\delta_0} - \frac{\beta_t}{2} \geq 0$ which validates the inequality (15). The inequality (15) yields

$$\max_t \int_G |\bar{u}|^2 \beta dx \leq M, \int_G |\bar{u}|^2(t, x) dx \leq \frac{M}{\beta(t)}, \tag{17}$$

$$\int_Q \frac{\mu}{4} (\nabla \bar{u}, \nabla \bar{u} \beta) + \mu (\operatorname{div} \bar{u})^2 \beta + \frac{\tau}{2} \left(\beta \left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla) \bar{u} \right), \left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla) \bar{u} \right) \right) \leq M. \tag{18}$$

As a consequence, we obtain the following a priori estimates for solutions:

$$\left\| \bar{u} \sqrt{\beta} \right\|_{L_2(0, \infty; W_2^1(G))} + \left\| \operatorname{div} \bar{u} \sqrt{\beta} \right\|_{L_2(Q)} + \left\| \frac{\nabla p}{\rho} \sqrt{\beta} + (\bar{u}, \nabla) \bar{u} \sqrt{\beta} \right\|_{L_2(Q)} \leq C_1(M), \tag{19}$$

where $C_1(M)$ is some constant depending on M, μ, τ ,

$$\left\| \bar{u} \sqrt{\beta} \right\|_{L_\infty(0, \infty; L_2(G))} \leq C_1(M). \tag{20}$$

Next, we evaluate all summands included in the definition of a generalized solution. Demonstrate that

$$\left\| \beta (\bar{u}, \nabla) \bar{u} \right\|_{L_{q_0}(0, \infty; L_{p_0}(G))} \leq C, p_0 \in [1, 3/2], \tag{21}$$

where the constant C has the same properties as the constant C_1 . The Hölder inequality yields

$$\left\| \beta (\bar{u}, \nabla) \bar{u} \right\|_{L_{p_0}(G)} \leq C \left\| \nabla \bar{u} \beta^{1/2} \right\|_{L_2(G)} \cdot \left\| \bar{u} \beta^{1/2} \right\|_{L_{p_0 q}(G)}, \tag{22}$$

where $q = \frac{2}{2 - p_0}$. Next, we use the embedding $W_2^s(G) \subset L_{q_0 p}(G)$ for $p_0 q = r = \frac{6}{3 - 2s}$, in this case

$$\frac{p_0}{2 - p_0} = \frac{3}{3 - 2s} = s = \frac{3(p_0 - 1)}{p_0}.$$

The necessary inequality $s \leq 1$ is equivalent to the inequality $p_0 \leq 3/2$. From (22) it follows that

$$\left\| \beta (\bar{u}, \nabla) \bar{u} \right\|_{L_{p_0}(G)} \leq C_1 \left\| \nabla \bar{u} \beta^{1/2} \right\|_{L_2(G)} \cdot \left\| \bar{u} \beta^{1/2} \right\|_{W_2^s(G)}. \tag{23}$$

We estimate the last multiplier using the interpolation inequality [21]

$$\|\bar{u}\sqrt{\beta}\|_{W_2^s(G)} \leq C \|\bar{u}\sqrt{\beta}\|_{W_2^1(G)}^\theta \|\bar{u}\sqrt{\beta}\|_{L_2(G)}^{1-\theta}, \tag{24}$$

where $s = \theta$. From (23) we obtain the estimate

$$\|\beta(\bar{u}, \nabla)\bar{u}\|_{L_{p_0}(G)} \leq C \|\sqrt{\beta\bar{u}}\|_{W_2^1(G)}^{1+s} \cdot \|\sqrt{\beta\bar{u}}\|_{L_2(G)}^{1-s}. \tag{25}$$

Using (20), we obtain

$$\|\beta(\bar{u}, \nabla)\bar{u}\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq C_1(M) \left(\int_0^\infty \|\beta\bar{u}\|_{W_2^1(G)}^{q_0(1+s)} dt\right)^{1/q_0} \leq C_2(M), \tag{26}$$

where we choose

$$q_0(1+s) = 2, \text{ i.e. } q_0 = 2p_0 / (4p_0 - 3). \tag{27}$$

By definition, $q_0 \geq 1$. The estimate (19) yields

$$\left\| \frac{\nabla p}{\rho} \sqrt{\beta} + \sqrt{\beta}(\bar{u}, \nabla)\bar{u} \right\|_{L_2(Q)} \leq C(M). \tag{28}$$

Let $g = (\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla)\bar{u})$. Next, we infer

$$\left\| \beta^\alpha \frac{\nabla p}{\rho} \right\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq \left\| \beta^\alpha g \right\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} + \left\| \beta^\alpha (\bar{u}, \nabla)\bar{u} \right\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))}. \tag{29}$$

Let $\beta_t > 0$ and let $\alpha \leq 1$. In this case

$$\left\| \beta^\alpha (\bar{u}, \nabla)\bar{u} \right\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq \left\| \beta (\bar{u}, \nabla)\bar{u} \right\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq C(M). \tag{30}$$

If $\beta_t < 0$ and $\alpha \geq 1$ then similarly we have that

$$\left\| \beta^\alpha (\bar{u}, \nabla)\bar{u} \right\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq \left\| \beta (\bar{u}, \nabla)\bar{u} \right\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq C(M). \tag{31}$$

Next, we derive that

$$\left\| \beta^\alpha g \right\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq \left(\int_0^\infty \left(\int_G |g|^{p_0} dx \right)^{q_0/p_0} \beta^{\alpha q_0} dt \right)^{1/q_0}, \tag{32}$$

where

$$\left(\int_G |g|^{p_0} dx \right)^{q_0/p_0} \leq \left(\int_G |g|^2 dx \right)^{q_0/2} c_0, \quad c_0 = \mu(G)^{q_0(1/p_0 - 1/2)}, \tag{33}$$

with μ is the Lebesgue measure. In this case, we infer

$$\left\| \beta^\alpha g \right\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq c_1 \left(\int_0^\infty \left(\int_G |g|^2 dx \right)^{\frac{q_0}{2}} \beta^{\alpha q_0 - \frac{q_0}{2}} dt \right)^{\frac{1}{q_0}} \leq c_1 \left(\int_0^\infty \beta \int_G |g|^2 dx dt \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^\infty \beta^{2-q_0} dt \right)^{\frac{2-q_0}{2q_0}}, \tag{34}$$

Let $\beta = e^{\gamma t}, \gamma > 0$. In this case, for convergence of the last integral, it is necessary that $\alpha < 1/2$. If $\beta = (t+M)^{-\gamma}, \gamma < 0$, then it is necessary that

$$\alpha < \frac{1}{2} - \frac{(2-q_0)}{2|\gamma|q_0}. \tag{35}$$

Note that the inequality $\alpha \geq 0$ is satisfied under the condition that $2/(1+|\gamma|) \leq q_0 \leq 2$. Let $\beta = e^{\gamma t}, \gamma < 0$. For convergence of the integral, it is necessary that $\alpha > 1/2$. If $\beta = (t+M)^{-\gamma}, \gamma > 0$, it is necessary that

$$\alpha > \frac{(2-q_0)}{2|\gamma|q_0} + \frac{1}{2}. \tag{36}$$

Note that the inequality $\frac{(2-q_0)}{2|\gamma|q_0} + \frac{1}{2} \geq 1$ is fulfilled whenever if $\frac{2}{1+|\gamma|} \geq q_0$. If $\beta_t > 0$, then the inequalities (29), (30) imply the estimate

$$\|p\beta^\alpha\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq C(M), \tag{37}$$

where $\alpha < 1/2$ if $\beta = e^{\gamma t}$ ($\gamma > 0$) and $\alpha < \frac{1}{2} - \frac{2-q_0}{2|\gamma|q_0}$ if $\beta = (t+M)^{-\gamma}$, $\gamma > 0$. The case $\alpha = \frac{1}{2}$ is possible when $q_0 = 2$. If $\beta_t < 0$, the inequalities (29), (31) yield

$$\|p\beta^\alpha\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq C(M), \tag{38}$$

where $\alpha > \frac{1}{2} + \frac{2-q_0}{2|\gamma|q_0}$ and $\alpha \geq 1$. If $\frac{2}{1+|\gamma|} \geq q_0$ then the inequality $\frac{1}{2} + \frac{2-q_0}{2|\gamma|q_0} \geq 1$ holds.

We have obtained the estimate

$$\|\beta^\alpha \nabla p\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} + \|\beta(\bar{u}, \nabla)\bar{u}\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq C_4(M), \tag{39}$$

As a consequence, if $p_0 = p_1 = 5/4$ ($p_0 = q_0$ in this case) then we conclude that

$$\|\beta^\alpha \nabla p\|_{L_{p_1}(Q)} + \|\beta(\bar{u}, \nabla)\bar{u}\|_{L_{p_1}(Q)} \leq C_4(M). \tag{40}$$

Since

$$\bar{w} = \tau \left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla)\bar{u} - \bar{f} \right), \tag{41}$$

we have the following inequality for the norm of \bar{w} :

$$\|\sqrt{\beta}\bar{w}\|_{L_2(Q)} \leq \left\| \sqrt{\beta} \left(\frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla)\bar{u} \right) \right\|_{L_2(Q)} + \|\sqrt{\beta}\bar{f}\|_{L_2(Q)} \leq C_5(M). \tag{42}$$

Let us estimate the summands from the definition of a generalized solution. We have that

$$((\bar{u} - \bar{w}, \nabla)\bar{\psi}, \bar{u}) = \int_G \sum_{i,j} (u_i - w_i) \psi_{jx_i} u_j dx. \tag{43}$$

Consider the functional $I(\bar{\psi})$. The Hölder inequality yields

$$I = \int_G w_i \psi_{jx_i} u_j dx, |I| \leq \|w_i u_j\|_{L_{p_0}(G)} \cdot \|\psi_{jx_i}\|_{L_{p'_0}(G)}, 1/p_0 + 1/p'_0 = 1. \tag{44}$$

Further, we obtain (see (20)) that

$$\begin{aligned} \left[\int_G |w_i|^{p_0} (u_j)^{p_0} dx \right]^{1/p_0} &\leq \|w_i\|_{L_2(G)} \cdot \|u_j\|_{L_{\frac{2p_0}{2-p_0}}(0,\infty,L_{q_0}(G))} \leq \\ &C_6 \|w_i\|_{L_2(G)} \cdot \|u_j\|_{W_2^s(G)} \leq \|w_i\|_{L_2(G)} \cdot \|u_j\|_{W_2^1(G)}^s \cdot \|u_j\|_{L_2(G)}^{1-s} = I_1, \end{aligned} \tag{45}$$

where $s = 3(p_0 - 1)/p_0$. We can conclude that

$$\|I_1 \beta\|_{L_{q_0}(0,\infty)}^{q_0} \leq \int_0^\infty \beta^{q_0} \|w_i\|_{L_2(G)}^{q_0} \|u_j\|_{W_2^1(G)}^{sq_0} \|u_j\|_{L_2(G)}^{(1-s)q_0} dt \leq C \int_0^\infty \sqrt{\beta} w_i \|u_j\|_{L_2(G)}^{q_0} \|\sqrt{\beta} u_j\|_{W_2^1(G)}^{sq_0} dt, \tag{46}$$

where $C = \|\sqrt{\beta} u_j\|_{L_\infty(0,\infty;L_2(G))}$. Applying the Hölder inequality with $q = \frac{2}{q_0}$, we infer

$$\|\beta I_1\|_{L_{q_0}(0,\infty)} \leq \|w_i \sqrt{\beta}\|_{L_2(Q)}^{q_0} \cdot \left[\int_0^\infty \|u_j \sqrt{\beta}\|_{W_2^1(G)}^{sq_0 \frac{2}{2-q_0}} dt \right]^{\frac{2-q_0}{2q_0}}. \tag{47}$$

Note that $\frac{2sq_0}{2-q_0} = 2$. In this case the previous inequality can be rewritten as

$$\|\beta I_1\|_{L_{q_0}(0,\infty)} \leq C_8(M). \tag{48}$$

The expression

$$l(\vec{\psi}) = \sum_{i,j} \int_G w_i \psi_{jx_i} u_j dx = ((\vec{w}, \nabla) \vec{\psi}, \vec{u}) \tag{49}$$

is a linear continuous functional over $\overset{\circ}{W}^1_{p'_0}(G)$. It follows from (44), (47) that

$$\|l(\vec{\psi})\|_{W^{-1}_{p'_0}(G)} = \sup_{\vec{\psi} \in \overset{\circ}{W}^1_{p'_0}(G)} \frac{|l(\vec{\psi})|}{\|\vec{\psi}\|_{\overset{\circ}{W}^1_{p'_0}(G)}} \leq C_9 \|w_i\|_{L_2(G)} \cdot \|u_j\|_{W^1_2(G)}^S \cdot \|u_j\|_{L_2(G)}^{1-S} \tag{50}$$

where $p'_0 = p_0 / (p_0 - 1)$. Using (48), we obtain that

$$\|l(\vec{\psi})\beta\|_{L_{q_0}(0,\infty;W^{-1}_{p'_0}(G))} \leq C_{10}(M). \tag{51}$$

Denote

$$(\nabla p, \vec{\psi}) = l_1(\vec{\psi}), \nabla p \in L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G)). \tag{52}$$

This expression has a sense for functions $\vec{\psi} \in L_{q'_0}(0,\infty;L_{p'_0}(G))$ with a bounded support. Then we have

$$l_1(\vec{\psi}) \leq \|\nabla p\|_{L_{p_0}(G)} \cdot \|\vec{\psi}\|_{L_{p'_0}(G)}. \tag{53}$$

In view of the estimates (37), (38), we derive

$$\|l_1(\vec{\psi})\beta^\alpha\|_{L_{q_0}(0,\infty;W^{-1}_{p_0}(G))} \leq \|\beta^\alpha \nabla p\|_{L_{q_0}(0,\infty;L_{p_0}(G))} \leq C_{11}(M). \tag{54}$$

For integrals of the form

$$l_2(\vec{\psi}) = ((\vec{u}, \nabla) \vec{\psi}, \vec{u}) = \sum_{i,j} \int_G \vec{u}_i \vec{\psi}_{jx_i} \vec{u}_j dx dt, l_3(\vec{\psi}) = ((\vec{u}, \nabla) \vec{\psi}, \vec{w}),$$

we have the estimates (as in the proof of the estimate (53))

$$\|l_i(\vec{\psi})\beta\|_{L_{q_0}(0,\infty;W^{-1}_{p_0}(G))} \leq C_{12}(M), i = 2, 3. \tag{55}$$

Let $\{\varphi_i\}$ – be a basis for the subspace of the space $W^1_2(G)$, consisting of functions φ , satisfying the condition $\int_G \varphi dx = 0$. As vector functions $\{\vec{\psi}_i\}$, we choose the eigenfunctions of the problem

$$-\Delta \vec{\psi} = \lambda \vec{\psi}, \vec{\psi}|_\Gamma = 0, \vec{\psi} = (\psi_1, \psi_2, \psi_3) \in W^2_2(G) \cap \overset{\circ}{W}^1_2(G). \tag{56}$$

They form an orthonormalized basis for $L_2(G)$ (after normalization) and an orthogonal basis for the space $V = W^2_2(G) \cap \overset{\circ}{W}^1_2(G)$ if we take the expression $\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle_V = (\Delta \vec{u}, \Delta \vec{v})$ as a new inner product. Let P_N is orthoprojection in $L_2(G)$ on the subspace $V_N = \text{Lin}\{\vec{\psi}_1, \vec{\psi}_2, \dots, \vec{\psi}_N\}$. It's obvious that $P_N \in L(V, V)$ and, in view of duality and selfadjointness, it allows an extension to a bounded operator of the class $L(V', V')$, where V' – dual space constructed by $L_2(G)$ and V as a completion of $L_2(G)$ with respect to the norm $\|u\|_{V'} = \sup_{v \in V} |\langle u, v \rangle_V| / \|v\|_V$. In particular, we have that $(u, P_N v) = (P_N u, v)$ for all $v \in V, u \in V'$. Note that $W^2_2(G) \cap \overset{\circ}{W}^1_2(G) \subset \overset{\circ}{W}^1_5(G)$ and the embedding is dense. This is a consequence of the embedding theorems. Since $V \subset \overset{\circ}{W}^1_5(G)$, we have that $W^{-1}_{5/4}(G) \subset V'$. Let λ_i be the corresponding eigenvalues.

We look for an approximate solution to the problem in the form

$$u_N = \sum_{i=1}^N c_i(t) \vec{\psi}_i(x), p_N = \sum_{i=1}^N \alpha_i(t) \varphi_i(x).$$

where $c_i(t)$ and $\alpha_i(t)$ are solutions to the system:

$$(\bar{u}_N - \bar{w}_N, \nabla \varphi_j) = 0, a(\bar{u}_N, \bar{\psi}_j) = (\bar{f}, \bar{\psi}_j), c_i(0) = (\bar{u}_0, \bar{\psi}_i), j = 1, \dots, N. \tag{57}$$

The first equation of the system can be rewritten as

$$\left(\bar{u}_N - \frac{\tau \nabla p_N}{\rho} - \tau (\bar{u}_N \nabla) \bar{u}_N + f \tau, \nabla \varphi_i \right) = 0. \tag{58}$$

We have that

$$\left(\frac{\tau \nabla p_N}{\rho}, \nabla \varphi_i \right) = \frac{\tau}{\rho} \sum_{j=1}^N \alpha_j(t) (\nabla \varphi_j, \nabla \varphi_i), \det(\nabla \varphi_j, \nabla \varphi_i) \neq 0. \tag{59}$$

The last determinant is the Gram determinant and it does not vanish. Indeed, the following estimate holds:

$$\|\nabla p\|_{L_2(G)} \geq c_0 \|p\|_{L_2(G)} \quad \forall p \in W_2^1(G) : \int_G p dx = 0.$$

This inequality guarantees that an equivalent inner product $\langle u, v \rangle = (\nabla u, \nabla v)$ can be introduced in the required subspace of functions φ , which guarantees the claim. Let A be a matrix with elements $a_{ij} = (\nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j)$. In this case the system (58) is rewritten in the form

$$\bar{\alpha} = \frac{\rho}{\tau} A^{-1} \begin{pmatrix} (\bar{u}_N - \tau (\bar{u}_N, \nabla) \bar{u}_N + \tau f, \varphi_1) \\ (\bar{u}_N - \tau (\bar{u}_N, \nabla) \bar{u}_N + \tau f, \varphi_N) \end{pmatrix}. \tag{60}$$

Substituting $\bar{\alpha}$ into the second system, we obtain a nonlinear system of ordinary differential equations for functions $c_i(t)$. The a priori estimate below guarantees that the Cauchy problem for this system has a solution on the entire interval $(0, \infty)$.

Further, we obtain a priori estimates for approximate solutions. Multiply the first and the second equation of the system (57) by α_i and c_i , respectively, and summarize the equalities over i . Then we obtain that

$$(\bar{u}_N - \bar{w}_N, \nabla p_N) = 0, a(\bar{u}_N, \bar{u}_N) = (f, \bar{u}_N). \tag{61}$$

We have the above-proven estimates (19), (20) and, thus,

$$\|\bar{u}_N \sqrt{\beta}\|_{L_2(0, \infty; W_2^1(G))} + \|\operatorname{div} \bar{u}_N \sqrt{\beta}\|_{L_2(Q)} + \left\| \left(\frac{\nabla p_N}{\rho} + (\bar{u}_N, \nabla) \bar{u}_N \right) \sqrt{\beta} \right\|_{L_2(Q)} \leq C_1(M). \tag{62}$$

where $C_1(M)$ is some constant depending on M, μ, τ ,

$$\|\bar{u}_N \sqrt{\beta}\|_{L_\infty(0, \infty; L_2(G))} \leq C_1(M). \tag{63}$$

The estimate has the same form because $\|P_N f\|_{L_2(G)} \leq \|f\|_{L_2(G)}$, $\|P_N u_0\|_{L_2(G)} \leq \|u_0\|_{L_2(G)}$, $u_N(0, x) = P_N u_0$. Take $p_0 = q_0 = 5/4$ and fix the parameter $\alpha = \alpha_0$, satisfying the conditions from the statement of the theorem. As a consequence of (26), (28), (40), (42), we infer

$$\|w_N \sqrt{\beta}\|_{L_2(Q)} + \|\nabla p_N \beta^{\alpha_0}\|_{L_{5/4}(Q)} + \|(\bar{u}_N, \nabla) \bar{u}_N \beta\|_{L_{5/4}(Q)} \leq C_4(M). \tag{64}$$

Obtain an estimate for the derivative with respect to time of a solution. To this end, we rewrite the second equation of the system in the form

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \bar{u}_N}{\partial t}, \bar{\psi} \right) &= ((\bar{u}_N - \bar{w}_N, \nabla) \bar{\psi}, \bar{u}_N) - \frac{1}{\rho} (\nabla p_N, \bar{\psi}) + \\ &\mu (\nabla \bar{u}_N, \nabla \bar{\psi}) - \mu (\operatorname{div} \bar{u}_N, \operatorname{div} \bar{\psi}) - ((\bar{u}_N, \nabla) \bar{\psi}, \bar{w}_N) + (\bar{f}, \bar{\psi}) = L_0(\bar{\psi}), \end{aligned} \tag{65}$$

where $\bar{\psi} \in V_N$. It is easy to see that the expression $L_0(\bar{\psi})$ is a linear continuous functional over the space $\overset{\circ}{W}_5^1(G)$ in view of the estimates (53), (54), (55) (where the \bar{u} is used instead of \bar{u}_N) and thereby

also over the space V . Hence, there is $g_N(t) \in V'$ such that $L_0(\vec{\psi}) = (g_N, \vec{\psi})$ for all $\psi \in V$. The estimates (34), (53), (54), (55), (61)–(64) ensure that

$$\|g_N \beta^{\alpha_0}\|_{L_{5/4}(0, \infty; V')} \leq \|g_N \beta^{\alpha_0}\|_{L_{5/4}(0, \infty; W_{5/4}^{-1}(G))} \leq C_{12}(M), \tag{66}$$

where C_{12} – some constant depending on M and independent of N . The equality (65) can be rewritten in the form

$$\vec{u}_{Nt} = P_N g_N.$$

The previous estimates and boundedness of the operator P_N in V' imply that

$$\|\vec{u}_{Nt} \beta^{\alpha_0}\|_{L_{5/4}(0, \infty; V')} \leq C_{12}(M), \tag{67}$$

The sequence \vec{u}_N is bounded in space endowed with the norm

$$\|\vec{u}\| = \|\vec{u} \beta^{\alpha_0}\|_{L_2(0, \infty; \overset{\circ}{W}_{2}(G))} + \|\vec{u}_t \beta^{\alpha_0}\|_{L_{5/4}(0, \infty; V')} \tag{68}$$

and the estimates (62)–(64) are valid. Hence, there exists a subsequence \vec{u}_{N_k} and function $\vec{u} \in L_{2, \sqrt{\beta}}(0, \infty; W_2^1(G))$ such that $\vec{u}_{N_k} \sqrt{\beta} \rightarrow \vec{u} \sqrt{\beta}$ in $L_2(0, \infty; W_2^1(G))$ weakly, $\vec{u}_{N_k} x_i \sqrt{\beta} \rightarrow \vec{u}_{x_i} \sqrt{\beta}$ weakly in $L_2(Q)$, $\vec{u}_{N_k} t \rightarrow \vec{u}_t$ weakly in $L_{5/4}(0, \infty; V')$, $\text{div} \vec{u}_{N_k} \sqrt{\beta} \rightarrow \text{div} \vec{u} \sqrt{\beta}$ weakly in $L_2(Q)$, $\vec{w}_{N_k} \sqrt{\beta} \rightarrow \vec{u} \sqrt{\beta}$ weakly in $L_2(Q)$, $p_{N_k} \beta^{\alpha_0} \rightarrow p \beta^{\alpha_0}$ weakly in $L_{5/4}(Q)$, $\beta^{\alpha_0} \nabla p_{N_k} \rightarrow \beta^{\alpha_0} \nabla p$ and $\beta(\vec{u}_{N_k}, \nabla) \vec{u}_{N_k} \rightarrow \beta \vec{u}_1$ weakly in $L_{5/4}(Q)$, $\sqrt{\beta} \vec{u}_{N_k} \rightarrow \sqrt{\beta} \vec{u}$ weakly in $L_{\infty}(0, \infty; L_2(G))$. Demonstrate that

$$\vec{w} = \frac{\nabla p}{\rho} + (\vec{u}, \nabla) \vec{u} - \vec{f}, \quad \vec{u}_1 = (\vec{u}, \nabla) \vec{u}, \tag{69}$$

Construct an increasing sequence $T_k \rightarrow \infty$ at $k \rightarrow \infty$. In view of the estimate (68), the subsequence \vec{u}_{N_k} is bounded in the space endowed with the norm

$$\|\vec{u}\|_n = \|\vec{u}\|_{L_2(0, T_n; \overset{\circ}{W}_{2}(G))} + \|\vec{u}_t \beta^{\alpha_0}\|_{L_{5/4}(0, T_n; V')}. \tag{70}$$

Next, we will use the compactness theorem (Theorem 5.1 of Chap. 1 in [22]). Note that the embedding $\overset{\circ}{W}_{2}^1(G) \subset L_2(G)$ is compact. By the compactness theorem, there exists a sequence $\vec{u}_{N_k}^1$ such that $\vec{u}_{N_k}^1 \rightarrow \vec{u}$ strongly in $L_2(Q_{T_1})$, $Q_{T_1} = (0, T_1) \times G$ and almost everywhere in Q_{T_1} . Again using the compactness theorem, from the subsequence $\vec{u}_{N_k}^1$ we can select a subsequence $\vec{u}_{N_k}^2 \rightarrow \vec{u}$ strongly $L_2(Q_{T_2})$ and almost everywhere in Q_{T_2} . Repeating the arguments, we construct the family of subsequences $\vec{u}_{N_k}^i$ such that $\vec{u}_{N_k}^i \rightarrow \vec{u}$ strongly $L_2(Q_{T_i})$ and almost everywhere in Q_{T_i} . Now, define the subsequence $\vec{v}_k = \vec{u}_{N_k}^k$, which converges in $L_2(Q_{T_i})$ to \vec{u} for all i and almost everywhere in Q . Fix i and take the function $\vec{\psi} \in L_{\infty}(Q)$ such that $\text{supp} \vec{\psi} \subset Q_{T_i}$. We have

$$\int_Q \beta \left((\vec{v}_k, \nabla) \vec{v}_{N_k} - (\vec{u}, \nabla) \vec{u} \right) \cdot \vec{\psi} dQ = \int_Q \beta \left(((\vec{v}_k - \vec{u}), \nabla) \vec{v}_k + (\vec{u}, \nabla) (\vec{u} - \vec{v}_k) \right) \cdot \vec{\psi} dQ.$$

The first integral is estimated as follows:

$$\left| \int_Q \beta \left((\vec{v}_k - \vec{u}), \nabla \right) \vec{v}_k \cdot \vec{\psi} dQ \right| \leq c_{13} \|\vec{v}_k - \vec{u}\|_{L_2(Q_{T_i})} \|\sqrt{\beta} \nabla \vec{v}_k\|_{L_2(Q_{T_i})} \rightarrow 0 \text{ at } k \rightarrow \infty.$$

Moreover, we have that

$$\int_Q (\bar{u}, \nabla)(\bar{u} - \bar{v}_k) \cdot \bar{\psi} dQ \rightarrow 0 \text{ at } k \rightarrow \infty,$$

due to weak convergence of $\beta \nabla \bar{v}_k$ to $\beta \nabla \bar{u}$ in $L_2(Q)$. Since the convergence takes place for all i and the set of functions with a bounded support of the class $L_\infty(Q)$ is dense in $L_{2,\beta}(0, \infty; L_2(G))$, we can conclude that $u_1 = (\bar{u}, \nabla)\bar{u}$ and thereby $\bar{w} = \frac{\nabla p}{\rho} + (\bar{u}, \nabla)\bar{u} - \bar{f}$. A subsequence \bar{v}_k coincides with some subsequence u_{N_k} for a suitable choice of the sequence N_k . Fix $T > 0$ and take the set of functions $\alpha_i(t), c_i(t) \in C([0, \infty))$, such that $\sup \alpha_i, \sup c_i \subset [0, T]$, multiply the corresponding equalities (57) with $N = N_k$ by these functions, sum the result on i from 1 to n ($n \leq N_k$) and integrate the obtained equations on t . As a result, we have

$$\int_0^\infty (\bar{u}_{N_k} - \bar{w}_{N_k}, \nabla \varphi) dt = 0, \int_0^\infty a(\bar{u}_{N_k}, \bar{\psi}) dt = \int_0^\infty (\bar{f}, \bar{\psi}) dt, \tag{71}$$

where $\bar{\psi} = \sum_{i=1}^n c_i \psi_i$ and $\varphi = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i$. Let us consider successively all summands. First, we can pass to the limit in the first equality and obtain that

$$\int_0^\infty (\bar{u} - \bar{w}, \nabla \varphi) dt = 0, \bar{w} = \tau \left((\bar{u}, \nabla)\bar{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \bar{f} \right). \tag{72}$$

In the second equality, we consider only the nonlinear summands, since in the linear part the passage to the limit is realized due to the weak convergence. Consider the summand

$$J_{N_k} = \int_0^\infty ((\bar{u}_{N_k} - \bar{w}_{N_k}, \nabla) \bar{\psi}, \bar{u}_{N_k}) dt.$$

Demonstrate that $J_{N_k} \rightarrow J = \int_0^\infty ((\bar{u} - \bar{w}, \nabla) \bar{\psi}, \bar{u}) dt$ as $k \rightarrow \infty$. Consider the difference

$$J_{N_k} - J = \int_0^\infty ((\bar{u}_{N_k} - \bar{w}_{N_k}, \nabla) \bar{\psi}, \bar{u}_{N_k} - \bar{u}) dt + \int_0^\infty ((\bar{u}_{N_k} - \bar{w}_{N_k}, \nabla) \bar{\psi}), \bar{u} dt.$$

The second integral tends to zero due to weak convergence, and the first integral is estimated as follows:

$$\left| \int_0^\infty ((\bar{u}_{N_k} - \bar{w}_{N_k}, \nabla) \bar{\psi}, \bar{u}_{N_k} - \bar{u}) dt \right| \leq c \|\bar{u}_{N_k} - \bar{u}\|_{L_2(Q_T)} \rightarrow 0 \text{ as } k \rightarrow \infty.$$

Similarly, we can show that $\int_0^\infty ((\bar{u}_{N_k}, \nabla) \bar{\psi}, \bar{w}_{N_k}) dt \rightarrow \int_0^\infty ((\bar{u}, \nabla) \bar{\psi}, \bar{w}) dt$ at $k \rightarrow \infty$. Passing the limit as $k \rightarrow \infty$, we can conclude that

$$\int_0^\infty \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial t}, \bar{\psi} \right) - ((\bar{u} - \bar{w}, \nabla) \bar{\psi}, \bar{u}) + \frac{1}{\rho} (\nabla p, \bar{\psi}) - \mu (\nabla \bar{u}, \nabla \bar{\psi}) + \mu (\operatorname{div} \bar{u}, \operatorname{div} \bar{\psi}) + ((\bar{u}, \nabla) \bar{\psi}, \bar{w}) dt = \int_0^\infty (\bar{f}, \bar{\psi}) dt.$$

In view of the choice the basis, we obtain that \bar{u} is a generalized solution to the problem. Proof of the last statement of the theorem, i.e., inclusions $\nabla p, (u, \nabla u) u \in L_{q_0}(0, \infty; L_{p_0}(G))$, $\bar{u}_t \beta^\alpha \in L_{q_0}(0, \infty; W_{p_0}^{-1}(G))$ for any $p_0 \in [1, 3/2]$ and the corresponding parameters α was carried out in the first half of the proof.

References

1. Elizarova T.G., Chetverushkin B.N. A Computational Algorithm for the Calculation of Gas-dynamic Flows. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 1984, Vol. 279, no. 1, pp. 80–83. (in Russ.).

2. Elizarova T.G., Chetverushkin B.N. Ispol'zovanie kineticheskikh modeley dlya rascheta gazodinamicheskikh techeniy (Use of Kinetic Models for Calculation of Gas-Dynamic Flows). *Mathematical modeling: processes in nonlinear media*, 1986, pp. 261–278 (in Russ.).
3. Elizarova T.G. *Quasi-Gas Dynamic Equations*. Springer Science & Business Media, Berlin, 2009, 286 p. DOI: 10.1007/978-3-642-00292-2
4. Chetverushkin B.N. *Kineticheski-soglasovannye skhemy v gazovoy dinamike* (Kinetically Matched Schemes in Gas Dynamics). Moscow, Izd-vo MGU Publ., 1999, 230 p. (in Russ.).
5. Sheretov Yu.V. Ob odnoy novoy matematicheskoy modeli v gidrodinamike (About One New Mathematical Model in Hydrodynamics). *Primenenie funktsional'nogo analiza v teorii priblizheniy* (Application of functional analysis in the theory of approximations), Tver': Tverskoy gosudarstvennyy universitet Publ., 1996, pp. 124–134. (in Russ.).
6. Sheretov Yu.V. Kvazigidrodinamicheskie uravneniya kak model' techeniy szhimaemoy vyazkoy teploprovodnoy sredy (Quasihydrodynamic Equations as a Model of Flows of Compressible Viscous Heat-Conducting Medium). *Primenenie funktsional'nogo analiza v teorii priblizheniy* (Application of functional analysis in approximation theory). Tver': Tverskoy gosudarstvennyy universitet Publ., 1997, pp. 127–155. (in Russ.).
7. Sheretov Yu.V. *Regulyarizovannye uravneniya gidrodinamiki* (Regularized Equations of Hydrodynamics). Tver': RIU Tverskogo gosudarstvennogo universiteta Publ., 2016, 222 p. (in Russ.).
8. Zlotnik A.A., Fedchenko A.S. On properties of Aggregated Regularized Systems of Equations for a Homogeneous Multicomponent Gas Mixture. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 2022, Vol. 45, no. 15, pp. 8906–8927. DOI: 10.1002/ma.8214
9. Zlotnik A.A., Lomonosov T.A. Regularized Equations for Dynamics of the Heterogeneous Binary Mixtures of the Noble-Abel Stiffened-Gases and Their Application. *Dokl. Math*, 2023, Vol. 108, pp. 443–449 (in Russ.). DOI: 10.1134/S1064562423701338
10. Chetverushkin B., Chung E., Efendiev Y., Pun S.-M., Zhang Z. Computational Multiscale Methods for Quasi-Gas Dynamic Equations. *Journal of Computational Physics*, 2021, Vol. 440, p. 110352. DOI 10.1016/j.jcp.2021.110352.
11. Balashov V.A., Savenkov E.B. A Regularized Phase Field Model for “Solid–Fluid” System Accounting for Chemical Reactions. *Keldysh Institute preprints*, 2021, no. 82, 20 pp. (in Russ.).
12. Kraposhin M.V., Ryazanov D.A., Elizarova T.G. Numerical Algorithm based on Regularized Equations for Incompressible Flow Modeling and Its Implementation in OpenFOAM. *Computer Physics Communications*, 2022, Vol. 271, no. 1, 108216 DOI: 10.1016/J.CPC.2021.108216
13. Chetverushkin B.N., Olkhovskaya O.G., Tsigvintsev I.P. Numerical Solution of High-Temperature Gas Dynamics Problems on High-Performance Computing Systems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2021, Vol. 390, 113374. DOI: 10.1016/j.cam.2020.113374
14. Elizarova T.G., Shil'nikov E.V. Numerical Modeling of Gas Mixtures within the Framework of Quasi-Gasodynamic Approach on the Example of Interaction of a Shock Wave with a Gas Bubble. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2021, Vol. 61, no 1, pp. 118–128. DOI: 10.1134/S0965542521010048
15. Plokhotnikov S.P., Bogomolova O.I., Bogomolov V.A., Klimova A.S., Belova E.N. Sravnitel'nyy analiz dvumernykh i trekhmernykh chislennykh resheniy dlya dvukhveroyatnostnykh zakonov pri dvukhfaznoy neizotermicheskoy fil'tratsii v sloistykh plastakh (Comparative Analysis of Two-Dimensional and Three-Dimensional Numerical Solutions for Two-Probability Laws for Two-Phase Non-Isothermal Filtration in Layered Formations). *Bulletin of Kazan Technological University*, 2015, Vol. 18, no. 20, pp. 210–214 (in Russ.).
16. Denk, R., Seger, T. L^p -Estimates for a Transmission Problem of Mixed Ellipticparabolic Type. *Bound. Value Probl.*, 2014, Article number: 22 (2014). DOI: 10.1186/1687-2770-2014-22
17. Peszynska M., Showalter R.E. Multiscale Elliptic-Parabolic Systems for Flow and Transport. *Electronic Journal of Differential Equations*, Vol. 2007 (2007), no. 147, pp. 1–30.
18. Evseev F.A. Solvability of Initial-Boundary Value Problems for Quasihydrodynamic System of Equations in the Case of Weakly Compressible Fluid. *Bulletin of Yugra State University*, 2024, Vol. 20, no. 2, pp. 97–106. (in Russ.). DOI: 10.18822/byusu20240297-106

19. Pyatkov S.P., Evseev F.A. Regular Solvability of the First Initial–Boundary Value Problem for the Quasihydrodynamic System of Equations in the Case of a Weakly Compressible Fluid. *J. Math. Sci.*, 2024, Vol. 281, pp. 909–924. DOI:10.1007/s10958-024-07159-0

20. Evseev F.A., Pyatkov S.P. On Some Properties of a Linearized Quasi-Hydrodynamical System of Equations. *Lobachevskii J. Math.*, 2023, Vol. 44, pp. 3266–3276. DOI:10.1134/S1995080223080139.

21. Triebel H. *Interpolation Theory, Function Spaces, Differential Operators*. Elsevier Science, 1978, 576 p.

22. Lions J.-L. *Some Methods of Solving Non-Linear Boundary Value Problems*. Paris, Dunod-Gauthier-Villars, 1969, 581 p.

Received April 11, 2025

Information about the author

Evseev Fedor Alexandrovich is Post-graduate Student, Head of the Tomographic and Electron Microscopic Research Laboratory, Yugra State University, Khanty-Mansiysk, Russian Federation; V.I. Shpilman Research and Analytical Center for the Rational Use of the Subsoil, Khanty-Mansiysk, Russian Federation, e-mail: fedor_evseev@rambler.ru.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2025, vol. 17, no. 3, pp. 13–27*

УДК 517.954

DOI: 10.14529/mmph250302

ОБОБЩЕННАЯ РАЗРЕШИМОСТЬ НАЧАЛЬНО-КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ КВАЗИГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ В ВЕСОВЫХ ПРОСТРАНСТВАХ СОБОЛЕВА

Ф.А. Евсеев^{1,2}

¹ Югорский государственный университет, г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация

² АУ «НАЦ РН им. В.И. Шпилемана», г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация

E-mail: fedor_evseev@rambler.ru

Аннотация. В работе рассматривается аналог первой начально-краевой задачи для квазигидродинамической системы уравнений в случае слабосжимаемой жидкости в весовых пространствах Соболева. Система является эллиптико-параболической системой: первая ее часть представляет собой эллиптическое уравнение относительно градиента давления, а вторая представляет собой параболическую систему относительно вектора скорости. Неизвестные градиент давления и вектор скорости входят в главные части эллиптического уравнения и параболической системы. Стационарная часть системы не является равномерно эллиптической, что создает дополнительные трудности при исследовании задачи. Система была выведена Т.Г. Елизаровой и Б.Н. Четверушкиным путем осреднения известной кинетической модели. Первые варианты системы называются системой квазигазодинамических уравнений. Позднее Ю.В. Шеретовым на основе более общего уравнения состояния была получена еще одна модель, которая получила название «квазигидродинамическая система уравнений». Им же был проведен детальный анализ свойств этой системы. Однако ранее даже в линейном случае подробно не исследовались вопросы обобщенной разрешимости начально-краевых задач для таких систем, имеются только некоторые частные результаты. В данной статье будет предпринята попытка восполнить этот пробел. Доказывается обобщенная разрешимость системы в некоторых весовых классах, характеризующих поведение решений при $t \rightarrow \infty$. Доказательство основано на методе Галеркина и получаемых априорных оценках. Описано убывание (рост) решения в зависимости от убывания (роста) правой части системы. Убывание (рост) при $t \rightarrow \infty$ используемых весовых функций может быть как экспоненциальным, так и степенным.

Ключевые слова: начально-краевая задача; квазигидродинамическая система; априорные оценки; весовые функции; теорема существования.

Литература

1. Елизарова, Т.Г. Об одном вычислительном алгоритме для расчета газодинамических течений / Т.Г. Елизарова, Б.Н. Четверушкин // Докл. АН СССР. – 1984. – Т. 279, № 1. – С. 80–83.
2. Елизарова, Т.Г. Использование кинетических моделей для расчета газодинамических течений / Т.Г. Елизарова, Б.Н. Четверушкин // Математическое моделирование: процессы в нелинейных средах. – 1986. – С. 261–278.
3. Elizarova, T.G. Quasi-Gas Dynamic Equations / T.G. Elizarova – Springer Science & Business Media, Berlin, 2009. – 286 с.
4. Четверушкин, Б.Н. Кинетически-согласованные схемы в газовой динамике / Б.Н. Четверушкин. – М.: Изд-во МГУ, 1999. – 230 с.
5. Шеретов, Ю.В. Об одной новой математической модели в гидродинамике / Ю.В. Шеретов // Применение функционального анализа в теории приближений – Тверь: Тверской государственный университет, – 1996. – С. 124–134.
6. Шеретов, Ю.В. Квазигидродинамические уравнения как модель течений сжимаемой вязкой теплопроводной среды / Ю.В. Шеретов // Применение функционального анализа в теории приближений / Тверь: Тверской государственный университет, 1997. – С. 127–155.
7. Шеретов, Ю.В. Регуляризованные уравнения гидродинамики / Ю.В. Шеретов. – Тверь: РИУ Тверского государственного университета, 2016. – 222 с.
8. Zlotnik, A.A. On Properties of Aggregated Regularized Systems of Equations for a Homogeneous Multicomponent Gas Mixture / A.A. Zlotnik, A.S. Fedchenko // Mathematical Methods in the Applied Sciences. – 2022. – Vol. 4, no. 15. – P. 8906–8927.
9. Zlotnik, A.A. Regularized Equations for Dynamics of the Heterogeneous Binary Mixtures of the Noble-Abel Stiffened-Gases and Their Application / A.A. Zlotnik, T.A. Lomonosov // Dokl. Math. – 2023. – Vol. 108. – P. 443–449.
10. Computational Multiscale Methods for Quasi-Gas Dynamic Equations / B. Chetverushkin, E. Chung, Y. Efendiev et al. // Journal of Computational Physics. – 2021. – Vol. 440. – P. 110352.
11. Балашов, В.А. Регуляризованная модель типа фазового поля для описания системы «жидкость–твердое тело» с учетом химических реакций / В.А. Балашов, Е.Б. Савенков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2021. – Препринт № 82. – С. 1–20.
12. Kraposhin, M.V. Numerical Algorithm based on Regularized Equations for Incompressible Flow Modeling and its Implementation in OpenFOAM / M.V. Kraposhin, D.A. Ryazanov, T.G. Elizarova // Computer Physics Communications. – 2022. – Vol. 271, no. 1. – 108216.
13. Chetverushkin, B.N. Numerical Solution of High-Temperature Gas Dynamics Problems on High-Performance Computing Systems / B.N. Chetverushkin, O.G. Olkhovskaya, I.P. Tsigvintsev // Journal of Computational and Applied Mathematics. – 2021. – Vol. 390. – p. 113374.
14. Елизарова, Т.Г. Численное моделирование газовых смесей в рамках квазигазодинамического подхода на примере взаимодействия ударной волны с пузырьком газа / Т.Г. Елизарова, Е.В. Шильников Е.В. // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2021. – Т. 61, № 1. – С. 124–135.
15. Плохотников, С.П. Сравнительный анализ двумерных и трехмерных численных решений для двухвероятностных законов при двухфазной неизотермической фильтрации в слоистых пластах / С.П. Плохотников, О.И. Богомолова, В.А. Богомолов и др. // Вестник Казанского технологического университета. – 2015 – Т. 18, № 20. – С. 210–214.
16. Denk, R. L^p -Estimates for a Transmission Problem of Mixed Ellipticparabolic Type / R. Denk, T. Seger // Boundary Value Problems. – 2014. – Article number: 22 (2014).
17. Peszynska, M. Multiscale Elliptic-Parabolic Systems for Flow and Transport / M. Peszynska, R.E. Showalter // Electronic Journal of Differential Equations. – Vol. 2007 (2007). – no. 147. – P. 1–30.
18. Евсеев, Ф.А. Разрешимость начально-краевых задач для квазигидродинамической системы уравнений в случае слабосжимаемой жидкости / Ф.А. Евсеев // Вестник Югорского государственного университета. – 2024. – Т. 20, № 2. – С. 97–106.
19. Pyatkov, S.P. Regular Solvability of the First Initial–Boundary Value Problem for the Quasihydrodynamic System of Equations in the Case of a Weakly Compressible Fluid / S.P. Pyatkov, F.A. Evseev // J. Math. Sci. – 2024. – Vol. 281. – P. 909–924.

20. Evseev, F.A. On Some Properties of a Linearized Quasi-Hydrodynamical System of Equations / F.A. Evseev, S.P. Pyatkov // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2023. – Vol. 44. – P. 3266–3276.

21. Трибель, Х. Теория интерполяции, функциональные пространства, дифференциальные операторы / Х. Трибель. – Москва: Мир, 1980. – 664 с.

22. Лионс, Ж.-Л. Некоторые методы решения нелинейных краевых задач / Ж.-Л. Лионс. – М.: Мир, 1972. – 588 с.

Поступила в редакцию 11 апреля 2025 г.

Сведения об авторе

Евсеев Федор Александрович – аспирант, заведующий лабораторией томографических и электронно-микроскопических исследований, Югорский государственный университет, г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация; АУ «НАЦ РН им. В.И. Шпильмана», г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация, e-mail: fedor_evseev@rambler.ru.

ПОДГОТОВКА ИЗОБРАЖЕНИЙ ПРОЗРАЧНЫХ ОБЪЕКТОВ СЛОЖНОЙ ФОРМЫ ПРИ ОБНАРУЖЕНИИ ДЕФЕКТОВ СИСТЕМОЙ ТЕХНИЧЕСКОГО ЗРЕНИЯ

**А.В. Коржов, В.А. Сурин, П.В. Лонзингер, В.И. Сафонов,
Я.В. Бушмелев, К.Н. Белов**

*Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация
E-mail: surinva@susu.ru*

Аннотация. Статья посвящена предварительной обработке изображений, используемых системой технического зрения для выявления возможных дефектов в прозрачных объектах сложной формы из аморфных материалов. Получение изображений высокого качества с большой контрастностью для таких объектов не всегда возможно из-за малой разности показателей преломления материалов изделия и дефекта. Исследование ранее разработанного метода обнаружения дефектов на основе современной архитектуры нейронной сети показало, что качество и контрастность изображения являются критическими показателями для эффективного выявления дефектов. Поэтому для увеличения контрастности дефектов на фоне была применена специальная методика частотной фильтрации изображения, оказавшаяся эффективнее существующих методов увеличения контрастности в изображениях. Методика основана на разделении изображения на узкие полосы, расположенные перпендикулярно градиенту интенсивности изображения элементов детали. Для каждой полосы применялось одномерное прямое преобразование Фурье, частотная фильтрация и обратное преобразование Фурье. Путем обработки реального изображения изолятора ПС-70Е показано, что применение такой частотной фильтрации позволяет уменьшить контрастность в области изображения элементов детали и увеличить контрастность в области изображения дефекта на контрастном фоне. Указанное свойство позволяет выявлять дефекты меньшего размера, что может быть полезным при использовании систем технического зрения в условиях реального производства.

Ключевые слова: техническое зрение; обработка изображений; повышение контрастности; частотная фильтрация; нейронные сети.

Введение

Исследования в области технического зрения [1, 2] позволили достичь в последние годы существенного прогресса в практическом применении его в медицине, промышленности, транспорте, сфере общественной безопасности и т. д. Классификация задач, решаемых техническим зрением, позволила выбирать оптимальные алгоритмы для каждой конкретной проблемы. Однако при практической реализации конкретных алгоритмов возникает вопрос о выборе оптимальных параметров алгоритмов и (или) о предварительной обработке изображений. Предварительная обработка изображений позволяет улучшить эффективность работы алгоритмов, но последовательность обработки существенно зависит от конкретной рассматриваемой задачи [3–6].

Работа с изображениями прозрачных объектов также имеет определенные особенности. Исследования по обнаружению дефектов в прозрачных телах показывают, что принципиальную роль играет расположение источников освещения при фиксации изображений [7]. На фотографии прозрачных тел могут присутствовать достаточно близкие изображения объектов, не являющихся дефектами. В работе [8] для того чтобы отличать изображения капель воды на поверхности стекла от дефектов на границе стекла, была применена нейронная сеть SqueezeNet. Для изображений прозрачных объектов сложной формы также выявление дефектов выполняется на фоне изображений конструктивных деталей исследуемого объекта. Из-за малой разности показателей преломления внутреннего дефекта и материала детали на изображении контрастность дефектов [9] мала, что дополнительно осложняет их обнаружение.

Существует ряд методов повышения контрастности растровых изображений [10]. Одним из наиболее часто используемых методов для усиления визуального восприятия резкости является

метод нерезкого маскирования (*unsharp mask*) [11]. Однако его нежелательно использовать в системах анализа данных из-за чрезмерного усиления шумов. Наиболее часто используемым методом повышения контрастности изображений в технических системах является адаптивный метод эквализации гистограммы CLAHE (*Contrast limited adaptive histogram equalization*) [12] и его различные модификации [13]. Метод заключается в выравнивании яркости по гистограмме не на всём изображении разом, а в рамках некоторого окна заданного размера. Это позволяет добиться восстановления контрастности даже мелких деталей на изображении.

Частотная фильтрация также позволяет увеличить контрастность. Однопиксельная визуализация (SPI) имеет преимущества широкой полосы пропускания и возможности отображать объекты за пределами поля зрения. Однако основной проблемой SPI является большое количество требуемых шаблонов освещения [14]. При двухмерном преобразовании Фурье вклад в каждую комплексную амплитуду пространственных гармоник определяется всеми пикселями исходного изображения, что усложняет поиск универсального варианта частотной фильтрации Фурье-образов. В [15, 16] для обнаружения дефектов в матрицах LCD/TFT дисплеев применено одномерное преобразование Фурье по одной из декартовых координат, вдоль которой располагались изображения элементов конструкции. В работе [16] показано, что частотная фильтрация одномерного преобразования Фурье позволяет убрать из изображения элементы фонового объекта и повысить контрастность дефектов.

Целью настоящей работы является исследование особенностей частотной фильтрации для изображений объектов сложной формы и выявление условий, в которых рассматриваемый метод имеет преимущества перед другими методами подготовки изображений для систем технического зрения.

Получение изображений

Экспериментальная установка включает в себя равномерный источник света, исследуемый прозрачный объект, камеру для регистрации прямого изображения и ЭВМ с программным обеспечением, позволяющим сохранять изображения. На рис. 1, а показана принципиальная схема установки, на рис. 1, б – фотография прототипа, используемого для апробации в условиях производства изоляторов ПС-70Е.

В качестве равномерного источника освещения использовался источник белого света (4000 К) размером 300×300 мм со световым потоком 2350 Лм, что позволило получить набор изображений стеклянных деталей изоляторов ПС-70Е с дефектами. Изображения объекта регистрировались на цифровую камеру (SUFICO SU100-HB), после чего передаются в компьютер.

Установка позволяет получить только одно изображение детали вместо набора фотографий с различных ракурсов. Принципиальная схема установки (см. рис. 1, а) выбрана максимально простой, что позволило использовать ее для прототипа системы машинного зрения на производстве (см. рис. 1, б). Набор изображений изоляторов ПС-70Е с дефектами был получен на экспериментальной установке (см. рис. 1) при апробации системы машинного зрения.

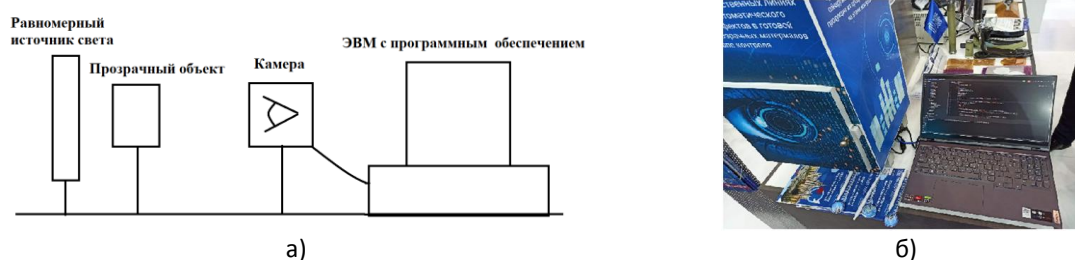


Рис. 1. Экспериментальная установка: а) принципиальная схема, б) фотография прототипа

Метод обработки изображений

Для анализа изображений объектов сложной формы разделим исходное изображение на набор линий, проведенных вдоль изображения элементов конструкции детали (перпендикулярно градиенту интенсивности изображения детали без дефекта). Эти линии замкнутые, и для набора пикселей, располагающихся вдоль линии, можно применить одномерное Фурье-преобразование. Поскольку линии располагаются вдоль изображения элемента конструкции, то интенсивность в пикселях будет отличаться незначительно на всех участках, кроме места пересечения с дефектами, что значительно облегчает фильтрацию изображения конструкции и выявления дефектов.

Для формирования одномерных функций можно применить следующий алгоритм. Для точки 1 изображения следующая точка 2 выбирается так, чтобы вектор перемещения был перпендикулярен градиенту интенсивности в точке 1. Если проекция шага на направление, перпендикулярное градиенту, будет менее одного пикселя, точка 2 принадлежит ранее выбранной кривой, из точки 2 процедура выбора повторяется и находится точка 3. Расстояние между точками 1 и 3 не должно превышать 1 пиксель. После замыкания кривой делается шаг на один пиксель в сторону внешней границы изображения и начинается аналогичное построение следующей кривой. Алгоритм начинается из центра изображения объекта и заканчивается на одном из его краев. В общем случае под центром объекта подразумевается точка пересечения двух перпендикуляров, каждый из которых пересекает все контуры на изображении.

Для изображения стеклянной детали изолятора ПС-70Е, обладающей осевой симметрией, применение описанного алгоритма позволило разделить изображение на концентрические окружности с центром в середине изображения. В силу дискретности изображения реальные кривые найдены как их приближения по алгоритму Бресенхэма [17]. Алгоритм Бресенхэма применен для увеличения производительности алгоритма при переходе с одного пикселя на другой в рамках одной замкнутой кривой.

Применим преобразование Фурье к каждой из полученных дискретных функций. В Фурье-образе преобладают низкие гармоники, соответствующие изображению элементов детали, и высокие гармоники, соответствующие дефекту. После частотной фильтрации верхних гармоник выполним обратное одномерное преобразование Фурье. На последнем шаге проведем сборку двумерного изображения объекта из набора одномерных изображений.

Результат обработки изображений

Проиллюстрируем применение описанного подхода на примере изображения стеклянной детали изолятора ПС-70Е в оттенках серого с разрешением 1024×1024 пикселей. Участок изображения с двумя дефектами (пузыри воздуха диаметром 1 мм) показан на рис. 2, а для расположения дефектов на монотонном и контрастном фоне. Результат применения описанного выше алгоритма показан на рис. 2, б. Расположение дефектов дополнительно помечено красной рамкой на каждом рисунке.

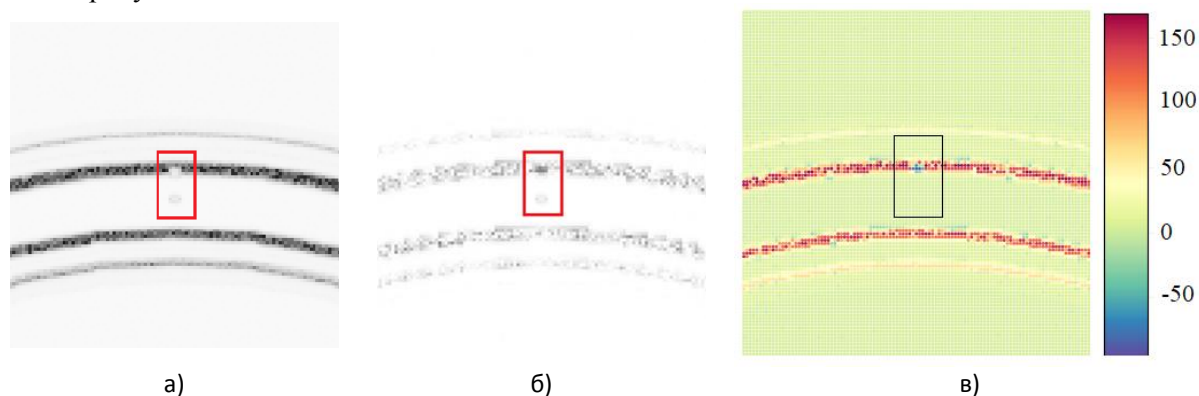


Рис. 2. Участок изображения стеклянной детали изолятора ПС-70Е с дефектом: а) исходное изображение, б) изображение после частотной фильтрации, в) попиксельная разность изображений

Для оценки эффективности метода на рис. 2, в построены значения разностей модулей для пикселей исходного изображения (см. рис. 2, а) и соответствующих пикселей изображения после частотной фильтрации (см. рис. 2, б) [5]. Положительные значения разностей соответствуют уменьшению контрастности по отношению к фону всего объекта, отрицательные – ее увеличению. Из представленных данных можно заключить, что изображения элементов объекта подверглись ощутимому уменьшению контрастности, в то время как контрастность дефектов увеличилась или не изменилась.

Из анализа рис. 2 можно сделать вывод, что визуально контрастность дефектов увеличилась, но шум после обратного преобразования Фурье сохранился (см. рис. 2, б). В результате не была достигнута полная фильтрация изображения дефекта. Поэтому также было проведено исследование применения алгоритма шумоподавления (медианный фильтр с ядром 3) [18] и детектор границ Canny [19] после преобразования Фурье. Результаты показаны на рис. 3 после последова-

тельного применения к исходному изображению (рис. 3, а) преобразования Фурье (рис. 3, б), шумоподавления (рис. 3в), обнаружения границ (рис. 3, г). Настраиваемые параметры детектора Саппу для дефекта на контрастном фоне: максимальный порог равен 250, минимальный – 200. Для дефекта на белом фоне соответствующие параметры равны 50 и 0.



Рис. 3. Участок изображения стеклянной детали изолятора ПС-70Е с дефектом: а) исходного, б) после частотной фильтрации, в) после шумоподавления, г) после обнаружения границ

Следует отметить, что, по сравнению с исходным изображением (см. рис. 3, а), для дефекта на контрастном фоне размер в пикселях на конечном изображении (см. рис. 3, г) несколько уменьшился, но на рис. 3, г все остальные элементы изолятора уже отсутствуют. Другой результат получился для объекта на монотонном фоне. Преобразование Фурье фактически не изменило контрастность дефекта по отношению к фону вблизи дефекта. Определение границ позволило выявить оба дефекта (см. рис. 3, г).

Для оценки эффективности каждого из этапов преобразования была оценена медианная освещенность (средняя освещенность, вычисленная как медиана всех яркостей изображения) участков изображения: для дефектов на контрастном (участок 1) и монотонном фоне (участок 2), для участка с деталью изолятора (участок 3), для участка вне детали изолятора (участок 4). Расположение анализируемых участков изображения (см. рис. 3, а) одинаково и на рис. 3, б-г. Эквивалентную контрастность оценивали как сумму модулей разности освещенностей участков 3 и 4 по отношению к участку 1 и для участка 2 по отношению к участку 4. Результаты представлены в табл. 1.

Таблица 1

Медианная освещенность и эквивалентная контрастность

Изображение	Рис. 3, а	Рис. 3, б	Рис. 3, в
Участок 1	210	163	163
Участок 2	233	240	242
Участок 3	146	238	226
Участок 4	249	255	255
Контрастность дефекта 1 на общем фоне (участок 4)	103	167	155
Контрастность дефекта 2 на фоне изображения детали объекта (участок 3)	16	15	13

Работа нейросетевого метода с изображениями различной контрастности

Для определения области применения рассмотренной выше методики обработки изображений было проведено исследование влияния контрастности изображения на эффективность обнаружения дефектов разработанным ранее нейросетевым методом, который использует CLANE для предобработки изображений [9]. Оценка степени влияния контрастности выполнена путем численных экспериментов над изображениями, полученными методом цифровой обработки исходного изображения [20]. За 100 % контрастности взято изображение с дефектами различного размера со стандартным уровнем шума. Новые изображения с ослабленной контрастностью генерируются на основе сужения гистограммы яркостей к значению 128 по всем трем каналам цвета [21]. Изображения имели уровень контрастности 80, 60, 40 и 20 процентов относительно исходного изображения (рис. 4).

Зависимости размера обнаруживаемого дефекта (мм) при различной контрастности изображения и различном качестве изображения показаны в табл. 2 для монотонного фона (рядом с

Математика

изображением дефекта нет изображений конструкции детали) и в табл. 3 – для контрастного фона (изображение дефекта на фоне элемента конструкции прозрачной детали, см. рис. 3).

Таблица 2

Медианная освещенность и эквивалентная контрастность					
Контрастность / Size	100 %	80 %	60 %	40 %	20 %
1024 (4 пикс/мм)	1	1	1,5	2	2,5
2048 (8 пикс/мм)	1	1	1	1,5	2
4096 (16 пикс/мм)	0,5	0,5	1	1	1,5

Таблица 3

Размер обнаруживаемого дефекта для контрастного фона					
Контрастность / Size	100 %	80 %	60 %	40 %	20 %
1024 (4 пикс/мм)	2	2	3,5	4,5	4,5
2048 (8 пикс/мм)	1,5	2,5	2,5	3,5	3,5
4096 (16 пикс/мм)	1,5	1,5	2	2,5	3

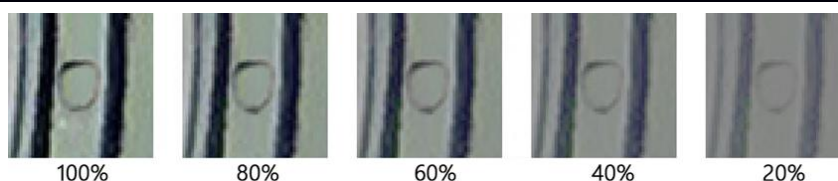


Рис. 4. Участок изображения с различным уровнем контрастности

Анализ данных в табл. 2 и 3 показывает, что для более контрастного изображения нейросетевой метод уверенно обнаруживает дефекты меньшего размера. Для всех рассмотренных разрешений (1024×1024, 2048×2048 и 4096×4096) повышение контрастности с 20 до 100 % позволяло выявлять дефект с размерами в 2–2,5 раза меньше. Улучшение качества изображения, естественно, позволяет выявлять дефекты меньшего размера. При неизменном размере дефекта, который должен быть выявлен системой технического зрения, уверенная работа нейросетевого метода достигается на менее качественных изображениях объектов.

Обсуждение результатов

Предварительная обработка изображений при использовании различных алгоритмов выявления дефектов может быть произведена различными способами. Нужно определить общий критерий целесообразности указанных преобразований.

Цифровое изображение объекта сложной формы можно представить в виде суммы подмножества пикселей D , соответствующих дефекту, и подмножества пикселей O , соответствующих элементам объекта. После проведения преобразований для повышения контрастности значения элементов соответствующих групп будут D' – для дефекта и O' – для объекта. Преобразование будет считаться эффективным, если выполняются следующие условия:

$$\begin{cases} O' - O < 0 \\ |D' - D| < |O' - O| \text{ если } D' - D \geq 0 \\ \text{round}(D') > m + 3 \cdot \sigma. \end{cases} \quad (1)$$

В (1) $\text{round}(D')$ – элементы матрицы, округленные до целых; m и σ – математическое ожидание и дисперсия матрицы преобразованного изображения. Преобразование эффективно, только если в алгоритме не использовалась априорная информации о типе, размерах и расположении дефекта.

Данные на рис. 2, в позволяют говорить о том, что при проведенном преобразовании соблюдаются первое и второе условия в (1), а именно контрастность дефекта ослабляется сильнее контрастности объекта на общем фоне.

В качестве примера для оценки соответствия третьему условию из изображения было выделено окно в виде квадрата 10×10 пикселей, в центре которого расположен центр тяжести дефекта на контрастном фоне. Для данного окна $m + 3 \cdot \sigma = 8,19 + 3 \cdot 19,67 = 67,21$. При этом диапазон значений пикселей дефекта лежит в пределах от 80 до 117,83, что позволяет выделять дефект на фо-

не шума. Таким образом, все три условия (1) выполнены, что говорит об эффективности проведенной частотной фильтрации для дефектов на контрастном фоне.

В результате рассмотренной в работе модификации на основе преобразования Фурье общая контрастность изображения дефекта на контрастном фоне стала выше по сравнению с элементом детали изолятора и с пространством между деталями (см. табл. 1). Основным эффектом заключается в том, что значения пикселей для дефекта стали отличаться от пикселей для остального изображения (см. рис. 3, в), что позволило создать алгоритм обнаружения границ и выделить только дефекты (см. рис. 3, з). Таким образом, последовательное применение алгоритмов позволило повысить вероятность выявления дефектов на контрастном фоне при помощи алгоритмов технического зрения. Следует отметить, что это было достигнуто подбором параметров алгоритмов фильтрации, например алгоритма определения границ. Если снизить порог, то на изображении появятся отдельные пиксели, не относящиеся к дефектам. Но даже в этом случае дефекты будут состоять из нескольких пикселей (8 пикселей на рис. 3, з) и могут быть выявлены по своему размеру.

Для дефекта на монотонном фоне значения пикселей практически не изменились. Также практически не изменилась и относительная контрастность изображения дефекта. Следовательно, обработка изображений должна отличаться для случая монотонного и контрастного фона. Например, параметры алгоритма выделения границ могут зависеть от средней интенсивности фона и могут определяться на основе априорной информации о прозрачном объекте.

Рассмотренный метод частотной фильтрации одномерных Фурье образов можно применить к другим объектам сложной формы, поскольку он не накладывает каких-либо ограничений на их геометрию, типы и форму дефектов. Для эффективного применения метода необходимо, чтобы размер дефекта на изображении составлял несколько пикселей, чтобы отличить дефект от шума. Допустимый уровень шума в исходном изображении для эффективного применения метода является предметом дальнейших исследований. Необходимо оценить изменение эффективности разработанного нейросетевого метода [9], когда в качестве входной информации поступают изображения, обработанные описанным методом.

Если изображение получено в свете, прошедшем через объект, то в результате обработки можно выявлять внутренние и поверхностные дефекты. Для изображений в отраженном свете метод позволяет выявлять только поверхностные дефекты. Также несложно обобщить указанный метод на цветные изображения и проводить анализ только для отдельного цветового диапазона.

Данные об эффективности работы нейросетевого метода с имитацией изменения контрастности изображения (см. табл. 2 и 3) показывают, что предложенный алгоритм обработки изображений будет иметь свою собственную область эффективного применения. Выигрыш может достигаться за счет выявления дефектов меньшего размера при обработке более качественного изображения. Выигрыш по используемым вычислительным ресурсам может достигаться за счет выявления дефектов необходимого размера по изображениям среднего или низкого качества. Какой критерий будет определяющим, зависит от конкретного использования системы машинного зрения. Согласно данным [22], полученным для изоляторов ПС-70Е, выявление дефектов размером менее 1 мм может оказаться необходимым, но разработанный нейросетевой метод не справляется с выявлением этого дефекта из-за малой контрастности и низкого разрешения изображения.

Выводы

Предложен алгоритм предварительной обработки изображений для выявления дефектов системами технического зрения, основанный на разбиении двумерного изображения на набор одномерных изображений. Особенность алгоритма в том, что частотная фильтрация применяется для каждого из одномерных изображений. Алгоритм может применяться для широкого класса изображений прозрачных объектов с дефектами, в которых конструктивные детали находятся в близости с изображением дефектов.

На примере изображения изолятора ПС-70Е продемонстрировано, что применение алгоритма позволяет увеличить контрастность изображения дефекта на фоне изображения конструктивных элементов изолятора, а также и на внешнем белом фоне.

Показано, что контрастность и разрешение изображения являются одними из определяющих факторов, влияющих на эффективность работы нейросетевого метода обнаружения дефектов.

Применение рассмотренного метода повышения контрастности позволит либо увеличить эффективность работы системы технического зрения, либо уменьшить требования к аппаратному обеспечению, необходимому для построения системы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание на выполнение фундаментальных научных исследований №FENU-2023-0025 (2023025Г3)).

Литература

1. Ma, B. Review of Research Progress in Computer Vision / B. Ma, F. Li, Y. Ren // 2024 International Conference on Computer Vision, Mechanical Automation and Remote Sensing Mapping CVMARS 2024). – 2024. – Vol. 11, no. 1. – P. 558–571.
2. Physics-Informed Computer Vision: A Review and Perspectives / C. Banerjee, K. Nguyen, C. Fookes, K. George // ACM Computing Surveys. – Vol. 57, Iss. 1. – Article no. 17, P. 1–38.
3. Теоретические основы цифровой обработки изображений в встраиваемых системах технического зрения / Ю.С. Бехтин, С.А. Клестов, М.С. Куцов и др. – Томск: Изд-во Томского университета. – 2016. – 396 с.
4. Садыков, С.С. Предварительная обработка изображений плоских объектов в системах технического зрения / С.С. Садыков, С.В. Савичева // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. – 2012. – Т. 55, № 2. – С. 19–23.
5. Емельянова, М.Г. Обнаружение поверхностных дефектов сварных соединений при визуальном контроле методами машинного зрения / М.Г. Емельянова, С.С. Смаилова, О.Е. Бакланова // Компьютерная оптика. – 2023. – Т. 47, Вып. 1. – С. 112–117.
6. Агеев, А.М. Обоснование выбора источников излучения для системы технического зрения в задаче автоматической посадки беспилотных летательных аппаратов / А.М. Агеев, В.Г. Бондарев, В.В. Проценко // Компьютерная оптика. – 2022. – Т. 46, Вып. 2. – С. 239–245.
7. Dual-Modal Illumination System for Defect Detection of Aircraft Glass Canopies / Z. Li, Y. Yao, R. Wen, Q. Liu // Sensors. – 2024. – Vol. 24, no. 20. – P. 6717.
8. Photovoltaic Glass Edge Defect Detection based on Improved SqueezeNet / J. Xiong, Z. He, Q. Zhou, R. Yang // Signal Image and Video Processing. – 2024. – Vol. 18. – P. 2841–2856.
9. Разработка алгоритма обнаружения дефектов в стеклянных изоляторах на основе компьютерного зрения с использованием нейросетевого подхода / А.В. Коржов, В.А. Сурин, М.А. Ческидова и др. // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2024. – Т. 16, № 4. – С. 35–42.
10. Сергеев, М.Б. Методы повышения контрастности растровых изображений для систем цифровой обработки видеoinформации / М.Б. Сергеев, Н.В. Соловьев, А.И. Стадник // Информационно-управляющие системы. – 2007. – № 1 (26). – С. 2–7.
11. Блюштейн, Е.А. Применение нерезкого маскирования для повышения резкости изображения в компьютерной томографии / Е.А. Блюштейн, А.О. Мантуров // Вестник Саратовского государственного технического университета. – 2012. – Т. 1, № 2с (64). – С. 313–318.
12. Zuiderveld, K. VIII.5. – Contrast Limited Adaptive Histogram Equalization / K. Zuiderveld // Graphics Gems. – 1994. – P. 474–485.
13. Коротков, В.А. Модификация метода CLAHE для компенсации влияния гидрометеоров / В.А. Коротков, К. В. Коротков, Е. П. Новичихин // Журнал радиоэлектроники. – 2017. – № 10. – С. 1–21.
14. Surface Defect Detection of Solar Cells Based on Fourier Single-Pixel Imaging for Removal of Substrates Interference / J. Ma, X. Gao, J. Wang et al. // Optics and Lasers in Engineering. – 2024. – Vol. 176. – P. 108073.
15. Pan, Y. FPGA-Accelerated Textured Surface Defect Segmentation Based on Complete Period Fourier Reconstruction / Y. Pan, R. Lu, T. Zhang // Journal of Real-Time Image Processing. – 2019. – Vol. 17. – P. 1659–1673.
16. Tsai, D-M. Automatic Defect Inspection of Patterned Thin Film Transistor-Liquid Crystal Display (TFT-LCD) Panels using One-Dimensional Fourier Reconstruction and Wavelet Decomposition / D-M. Tsai, C-Y. Hung // International Journal of Production Research. – 2005. – Vol. 43. – P. 4589–4607.

17. Fu, B.W. Integral Algorithm for Generating Anti-Aliasing Circle Based on Bresenham Algorithm / B.W. Fu, L.Q. Niu // *Advanced Materials Research*. – 2012. – Vols. 490–495. – P. 1202–1206.

18. OpenCV: Smoothing Images. URL: https://docs.opencv.org/4.x/d4/d13/tutorial_py_filtering.html.

19. OpenCV: Canny Edge Detection. – URL: https://docs.opencv.org/4.x/da/d22/tutorial_py_canny.html.

20. Коржов, А.В. Получение данных для обучения системы технического зрения по выявлению газовых включений в стеклянной детали изолятора ПС-70Е / А.В. Коржов, П.В. Лонзингер, В.И. Сафонов, В.А. Сурин, М.А. Ческидова, К.Н. Белов // *Вестник Южно-Уральского государственного университета*. Серия: Энергетика. – 2024. – Т. 24, № 2. – С. 27–36.

21. OpenCV: Histograms – 1: Find, Plot, Analyze. URL: https://docs.opencv.org/4.x/d1/db7/tutorial_py_histogram_begins.html.

22. Суррогатные модели электрофизических характеристик стеклянных деталей высоковольтных изоляторов / А.В. Коржов, П.В. Лонзингер, В.И. Сафонов и др. // *Вестник Южно-Уральского государственного университета*. Серия: Энергетика. – 2024. – Т. 24, № 4. – С. 13–22.

Поступила в редакцию 30 июня 2025 г.

Сведения об авторах

Коржов Антон Вениаминович – доктор технических наук, доцент, профессор кафедры электрических станций, сетей и систем электроснабжения, первый проректор – проректор по научной работе, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: korzhovav@susu.ru.

Сурин Владимир Анатольевич – кандидат технических наук, старший преподаватель кафедры прикладной математики и программирования, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: surinva@susu.ru.

Лонзингер Петр Владимирович – кандидат технических наук, доцент кафедры электрических станций, сетей и систем электроснабжения, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: lonzingerpv@susu.ru.

Сафонов Валерий Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра электрических станций, сетей и систем электроснабжения, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: safonovvi@susu.ru.

Бушмелев Ярослав Викторович – инженер, управление научной и инновационной деятельности, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: bushmeleviv@susu.ru.

Белов Кирилл Николаевич – аспирант, ассистент кафедры оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: belovkn@susu.ru.

PREPARING THE IMAGES OF COMPLEX SHAPE TRANSPARENT OBJECTS TO DETECT DEFECTS BY THE COMPUTER VISION SYSTEM

A.V. Korzhov, V.A. Surin, P.V. Lonzinger, V.I. Safonov, Ya.V. Bushmelev, K.N. Belov

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: surinva@susu.ru

Abstract. The article deals with the preprocessing of images by the computer vision system to find possible defects in transparent objects of complex shape made of amorphous materials. It is not always possible to obtain high-quality images with high contrast for such objects due to the small difference in the refractive indices of the product materials and the defect. The previously developed defect detection method is based on a modern neural network architecture and shows that image quality and contrast are critical indicators for effective defect detection. Therefore, the authors apply a special image frequency

filtering technique to increase the contrast. The technique is based on dividing the image into narrow bands located perpendicular to the intensity gradient of the detail components image. One-dimensional forward Fourier transform, frequency filtering, and inverse Fourier transform are used for each band. Processing of a real image of the PS-70E (U70) insulator shows that the use of such frequency filtering reduces the contrast in the area of the components image and increases the contrast in the area of the defect image against a contrasting background. This property enables either identifying smaller size defects, or using images with resolutions up to and including 1024x1024 pixels, which can be useful when implementing computer vision systems in real industrial conditions.

Keywords: computer vision; image processing; image contrast; frequency filtering; neural networks.

References

1. Ma B., Li F., Ren Y. Review of Research Progress in Computer Vision. *Proc. 2024 International Conference on Computer Vision, Mechanical Automation and Remote Sensing Mapping (CVMARS 2024)*, 2024, Vol. 11, no. 1, pp. 558–571. DOI: 10.56028/aetr.11.1.558.2024.
2. Banerjee C., Nguyen K., Fookes C., George K. Physics-Informed Computer Vision: A Review and Perspectives. *ACM Computing Surveys*, Vol. 57, Iss. 1, Article no. 17, pp. 1–38. DOI: 10.1145/3689037.
3. Bekhtin Yu.S., Klestov S.A., Kutsov M.S., Syryamkin V.I., Titov D.V. *Teoreticheskie osnovy tsifrovoy obrabotki izobrazheniy v vstraivaemykh sistemakh tekhnicheskogo zreniya* (Theoretical Foundations of Digital Image Processing in Embedded Vision Systems). Tomsk: Izdatel'stvo Tomskogo universiteta Publ., 2016, 396 p. (in Russ.).
4. Sadykov S.S., Savicheva S.V. Predvaritel'naya obrabotka izobrazheniy ploskikh ob"ektov v sistemakh tekhnicheskogo zreniya (Pre-Processing of Images of Flat Objects in Technical Vision Systems). *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Priborostroenie*, 2012, Vol. 55, no. 2, pp. 19–23. (in Russ.).
5. Yemelyanova M.G., Smailova S.S., Baklanova O.E. Detection of Surface Defects in Welded Joints during Visual Inspections using Machine Vision Methods. *Computer Optics*, 2023, Vol. 47, Iss. 1, pp. 112–117. (in Russ.). DOI: 10.18287/2412-6179-CO-1137.
6. Ageev A., Bondarev V.G., Protsenko V.V. Justification of the Choice of Radiation Sources for a Computer Vision System in the Problem of Automatic Landing of Unmanned Aerial Vehicles. *Computer Optics*, 2022, Vol. 46, Iss. 2, pp. 239–245. DOI: 10.18287/2412-6179-CO-875.
7. Li Z., Yao Y., Wen R., Liu Q. Dual-Modal Illumination System for Defect Detection of Aircraft Glass Canopies. *Sensors*, 2024, Vol. 24, no. 20, p. 6717. DOI: 10.3390/s24206717.
8. Xiong J., He Z., Zhou Q., Yang R. Photovoltaic Glass Edge Defect Detection based on Improved SqueezeNet. *Signal Image and Video Processing*, 2024, Vol. 18, pp. 2841–2856. DOI: 10.1007/s11760-023-02954-9.
9. Korzhov A.V., Surin V.A., Cheskidova M.A., Lonzing P.V., Safonov V.I., Belov K.N. Development of an Algorithm for Detecting Defects in Glass Insulators based on Computer Vision using a Neural Network Approach. *Bulletin of the South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*, 2024, Vol. 16, no. 4, pp. 35–42. (in Russ.). DOI: 10.14529/mmph240405
10. Sergeev M.B., Soloviev N.V., Stadnik A.I. Methods to Increase Raster Image Contrast for Systems of Digital Video Processing. *Information and Control Systems*, 2007, no. 1 (26), pp. 2–7. (in Russ.).
11. Blyushteyn E.A., Manturov A.O. Application of Unsharp Masking to Image Sharpness Increasing in Computerized Tomography. *Vestnik Saratovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*, 2012, Vol. 1, no. 2c (64), pp. 313–318. (in Russ.).
12. Zuiderveld K. VIII.5. – Contrast Limited Adaptive Histogram Equalization. *Graphics Gems.*, 1994, pp. 474–485. DOI: 10.1016/b978-0-12-336156-1.50061-6.
13. Korotkov V.A., Korotkov K.V., Novichikhin E.P. Modifikatsiya metoda CLAHE dlya kompensatsii vliyaniya gidrometeorov (Modification of the CLAHE Method to Compensate for the Influence of Hydrometeors). *Zhurnal radioelektroniki*, 2017, no. 10, pp. 1–21. (in Russ.).

14. Ma J., Gao X., Wang J., Guan Q., Deng H., Gong X., Ma M., Zhong X. Surface Defect Detection of Solar Cells Based on Fourier Single-Pixel Imaging for Removal of Substrates Interference. *Optics and Lasers in Engineering*, 2024, Vol. 176, P. 108073. DOI: 10.1016/j.optlaseng.2024.108073.

15. Pan Y., Lu R., Zhang T. FPGA-Accelerated Textured Surface Defect Segmentation Based on Complete Period Fourier Reconstruction. *Journal of Real-Time Image Processing*, 2019, Vol. 17, pp. 1659–1673. DOI: 10.1007/s11554-019-00927-1.

16. Tsai D-M., Hung C-Y. Automatic Defect Inspection of Patterned Thin Film Transistor-Liquid Crystal Display (TFT-LCD) Panels using One-Dimensional Fourier Reconstruction and Wavelet Decomposition. *International Journal of Production Research*, 2005, Vol. 43, pp. 4589–4607. DOI: 10.1080/00207540500140732.

17. Fu B.W., Niu L.Q. Integral Algorithm for Generating Anti-Aliasing Circle Based on Bresenham Algorithm. *Advanced Materials Research*, 2012, Vols. 490-495, P. 1202–1206. DOI: 10.4028/www.scientific.net/amr.490-495.1202.

18. OpenCV: Smoothing Images. URL: https://docs.opencv.org/4.x/d4/d13/tutorial_py_filtering.html.

19. OpenCV: Canny Edge Detection. URL: https://docs.opencv.org/4.x/da/d22/tutorial_py_canny.html.

20. Korzhov A., Lonzingер P.V., Safonov V.I., Surin V.A., Cheskidova M.A., Belov K.N. Obtaining Data for Training the Vision System to Detect Gas Inclusions in the Glass Part of the PS-70E Insulator. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Power Engineering"*, 2024, Vol. 24, no. 2, pp. 27–36. DOI: 10.14529/power240203.

21. OpenCV: Histograms – 1: Find, Plot, Analyze. URL: https://docs.opencv.org/4.x/d1/db7/tutorial_py_histogram_begins.html.

22. Korzhov A.V., Lonzingер P.V., Safonov V.I., Surin V.A., Cheskidova M.A., Belov K.N. Surrogate Models of Electrophysical Characteristics of Glass Parts of High-Voltage Insulators. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Power Engineering"*, 2024, Vol. 24, no. 4, pp. 13–22. DOI: 10.14529/power240402.

Received June 30, 2025

Information about the authors

Korzhov Anton Veniaminovich is Dr. Sc. (Engineering), Associate Professor, Professor of the Department of Power Plants, Networks and Power Supply Systems, Vice-Rector for Research, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: korzhovav@susu.ru.

Surin Vladimir Anatol'evich is Cand. Sc. (Engineering), Senior Lecturer, Department Mathematics and Programming, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: surinva@susu.ru.

Lonzingер Petr Vladimirovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, Department of Power Plants, Networks and Power Supply Systems, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: lonzingerpv@susu.ru.

Safonov Valeriy Ivanovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department Power Plants, Networks and Power Supply Systems, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: safonovvi@susu.ru.

Bushmelev Yaroslav Viktorovich is Engineer, Department of Scientific and Innovative Activities, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: bushmeleviv@susu.ru.

Belov Kirill Nikolaevich is Postgraduate Student, Assistant of the Department Optoinformatics, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: belovkn@susu.ru.

АЛГОРИТМ АНАЛИЗА ЗАШУМЛЕННЫХ ВИДЕОДАНЫХ ДЛЯ НАВИГАЦИИ АВТОНОМНЫХ РОБОТОВ

А.А. Кузнецов

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

E-mail: kuznetsova@susu.ru

Аннотация. Автономные роботы широко используются для различных целей, включая мониторинг, исследования, чрезвычайные ситуации и т. д. Главными преимуществами автономных роботов являются мобильность, простота развертывания и эффективность в реальных сценариях. Актуальной является задача навигации автономных роботов на основе данных, полученных из видеоканала. Целью исследования является реализация алгоритма анализа зашумленных видеоданных для детекции ключевых точек навигационных объектов. Традиционные подходы детекции ключевых точек навигационных объектов используют итерационные алгоритмы, без применения нейронных сетей. Предлагается использовать нейросетевую модель YOLOv11 для решения задачи. В качестве входных данных нейросети будут выступать RGB-изображения. Результатом работы будут координаты ключевых точек навигационных объектов. Приведены данные тестов алгоритма на данных датасета и данных, полученных с испытаний демонстратора двигательной установки с центральным телом. Используется метрика OKS (Object Keypoint Similarity). Результатом исследования является нейронная сеть, разработанная и обученная для детекции навигационных объектов и их ключевых точек. Определяя ключевые точки объектов, можно корректировать инерциальные навигационные системы. Полученная нейронная сеть устойчива к различным помехам и шумам, в том числе перекрытиям.

Ключевые слова: навигация; нейронные сети; YOLOv11; автономные роботы.

Введение

Навигация автономного робота может осуществляться через анализ видеоканала с использованием технологии компьютерного зрения. В [1] приводится обзор современных методов компьютерного зрения для автономных транспортных средств. Для обеспечения навигации с использованием компьютерного зрения основной задачей является обнаружение на изображении объектов [1], на основании положения и типа которых можно строить маршруты следования автономного робота. Используются такие методы, как классический конвейер обнаружения, так и использование глубокого обучения.

Тем не менее видеоканал может содержать различные шумы. Это могут быть цифровой шум, сниженный контраст, размытие, перекрытие объектов другими объектами и т. д.

Цифровой шум [2] – это нежелательные искажения или помехи в цифровом изображении или видео, которые возникают из-за различных факторов, таких как ограничения оборудования, условия съемки или обработка сигнала. Визуальными проявлениями такого шума является зернистость, цветовые артефакты, потеря деталей. Причинами могут быть высокое значение ISO, слабое освещение, ограничения сенсора, сжатие данных и т. д. Ухудшает качество изображения путем снижения резкости, ухудшения цветопередачи и потери деталей.

Сниженный контраст и размытие [3, 4] – это два распространенных дефекта изображения, которые могут возникать по разным причинам. Они ухудшают качество изображения, делая его менее четким и выразительным. Сниженный контраст характеризуется низкой разницей между светлыми и темными областями, потерей деталей в тенях и цветах. Причинами могут служить плохое освещение, атмосферные условия, ограничения динамического диапазона. Размытие характеризуется потерей резкости, смазыванием границ объектов. Причинами могут служить движение камеры или объекта, неправильная фокусировка, дифракция и т. д.

При перекрытии отслеживаемых объектов другими объектами может теряться информация, на основании которой автономному роботу нужно строить маршрут. Так, перекрытие навигационных объектов может вызвать ошибки в расчете положения автономного робота, что повлечет за собой некорректно рассчитанный маршрут. Навигационная система должна быть устойчива ко всем типам шумов в видеопотоке, чтобы объекты, по которым строится маршрут, всегда определялись. На сегодняшний день существуют различные навигационные системы для автономных роботов. В [5] описывается ORB-SLAM2. Это полная система SLAM (одновременная локализация и построение карты) для монокулярных, стерео- и RGB-D-камер. Система работает в режиме реального времени на стандартных процессорах в самых разных условиях: от небольших ручных последовательностей в помещениях до дронов, летающих в промышленных условиях, и автомобилей, едущих по городу. Из недостатков можно отметить высокие требования к вычислительным ресурсам бортового вычислителя, зависимость от зашумления и отсутствие семантической информации. ORB-SLAM2 работает только на уровне геометрических особенностей, не распознавая объекты. В [6] описывается фильтр Калмана с ограничением по нескольким состояниям. Фильтр Калмана с ограничением по нескольким состояниям – это расширенный вариант фильтра Калмана, разработанный специально для визуально-инерциальной навигации. Он эффективно комбинирует данные от камеры и инерциального измерительного блока, позволяя роботам и дронам оценивать свое положение без накопления ошибок (дрейфа). Поскольку фильтр Калмана с ограничением по нескольким состояниям не строит глобальную карту, со временем накапливается дрейф (особенно в монотонном окружении). Отсутствие распознавания объектов ограничивает использование метода.

Алгоритм анализа зашумленного видеопотока на основе нейронных сетей

Предлагаемый алгоритм анализа зашумленного видеопотока использует для обнаружения навигационных объектов и их ключевых точек нейронную сеть YOLOv11 [7]. Эта нейронная сеть использует однопроходный подход, использующий все изображения в качестве входных данных, для прогнозирования ограничивающих рамок и вероятностей классов. YOLOv11 оптимизирована для баланса между точностью (mAP) и скоростью (FPS). Данную нейронную сеть предполагается использовать на автономных роботах, следовательно, она должна показывать хорошую производительность на одноплатных компьютерах, например, на NVIDIA Jetson Orin NX или Orange Pi 5. В качестве навигационных объектов будут использоваться маркеры ArUco [8]. Они представляют собой черно-белые квадратные изображения с уникальным идентификатором и внутренним кодом, который легко распознается алгоритмами. На данный момент нейронная сеть обучалась обнаруживать три маркера ArUco (рис. 1).



Рис. 1. Маркеры ArUco

Получив ключевые точки маркера, можно решать задачу Perspective-n-Point (PnP) [9]. PnP – это классическая задача компьютерного зрения, которая заключается в определении положения и ориентации камеры (ее позы, т. е. 3D-положения и вращения) относительно сцены по n известным 3D-точкам и их 2D-проекциям на изображении. В данной работе задача (PnP) будет решаться методом Direct Least-Squares (DLS) [10].

Полученная информация о положении камеры в пространстве может использоваться для коррекции инерциальных датчиков, которые при двойном интегрировании могут накапливать значительные погрешности [11]. Так как в данной работе в качестве таких объектов используются маркеры ArUco, следовательно, навигационным объектом будет до трех заранее заданных

Математика

маркеров и углы маркера в качестве ключевых точек. На рис. 2 приведен пример такого маркера с выделенными ключевыми точками: ключевые точки выделены разными цветами, так как нейронная сеть должна также определять, какая конкретно ключевая точка находится в данных координатах.

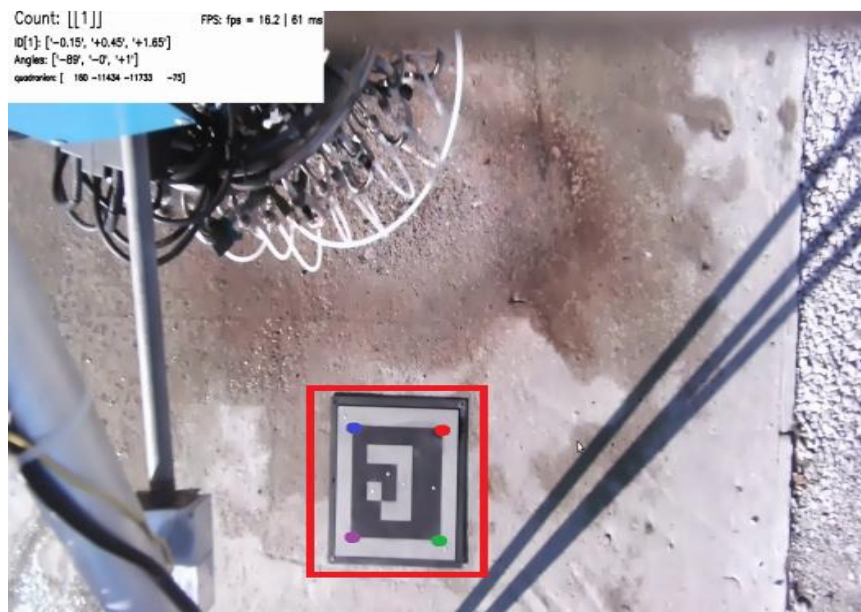


Рис. 2. Маркер на испытательной площадке

Создание обучающей выборки проходило в два шага. На первом шаге была реализована программа [12] на языке C++ для генерации синтетических данных. С помощью реализованной программы было сгенерировано 4 000 изображений. Пример такого синтетического изображения представлен на рис. 3. На втором шаге собирались реальные данные. Реальные данные получались путем записи видео в лаборатории. Полученное видео затем разбивалось на кадры (рис. 4). Полученные кадры затем размечались в формате, понятном для нейронной сети.



Рис. 3. Пример сгенерированного синтетического изображения



Рис. 4. Пример изображения, полученного в лаборатории

Численные эксперименты

Для примера работы нейронной сети можно использовать изображение без шумов и с большим маркером. Как изображено на рис. 5, стандартные алгоритмы и нейронная сеть справились с задачей. Тем не менее если на маркер начинает падать тень, как на рис. 6, стандартные алгоритмы не могут обнаружить маркер.

Для тестирования работы с зашумленными изображениями на незашумленное изображение будут накладываться различные шумы. На рис. 7 показано исходное изображение и его зашумленная версия. Для зашумления изображения применялся аддитивный гауссовский шум. К исходным пикселям изображения добавлялись независимые значения, каждое из которых является случайной величиной, имеющей нормальное распределение с нулевым средним и стандартным

отклонением 800. Этот шум – «белый» (некоррелированный во времени/пространстве) и одинаково воздействует на все изображения. Для тестов будет использоваться фрагмент видео размером в 240 кадров, полученного с испытаний.

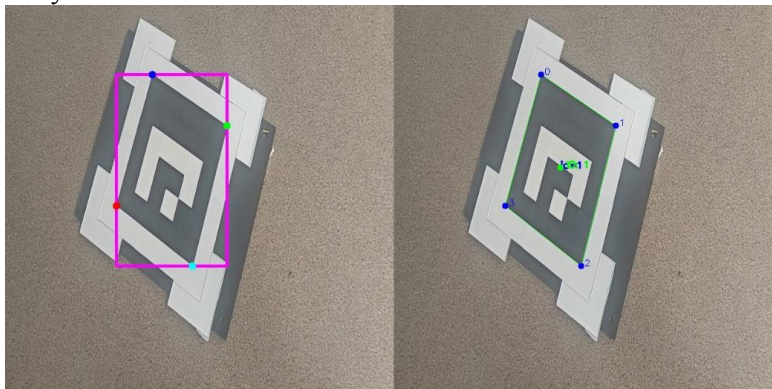


Рис. 5. Пример работы нейронной сети (слева) и алгоритмов, реализованных в OpenCV (справа)

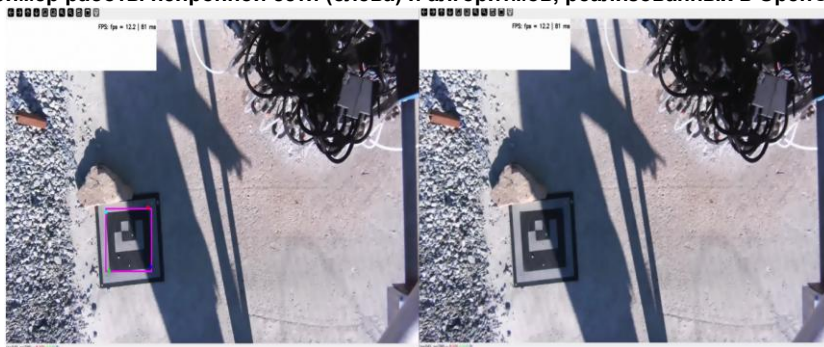


Рис. 6. Пример работы нейронной сети (слева) и алгоритмов, реализованных в OpenCV (справа), на изображении с зашумлением

В качестве метрики для ключевой точки i будет использоваться *Object Keypoint Similarity* (*OKS*)

$$OKS_i = \exp\left(-\frac{d_i^2}{2s^2k_i^2}\right), \quad (1)$$

где d_i – евклидово расстояние между предсказанной и настоящей ключевой точкой, s – площадь объекта, $k_i = 0,5$ для всех i . Метрика точности для всего объекта будет средним значением точности всех ключевых точек. *OKS* – это стандартная метрика для оценки качества моделей компьютерного зрения, работающих с ключевыми точками объектов (например, обнаружение позы человека, трекинг животных, анализ жестов). Она широко используется в таких наборах данных, как *COCO* (*Common Objects in Context*) и *МРП*. *OKS* измеряет сходство между предсказанными ключевыми точками и эталонными точками, учитывая масштаб объекта и сложность распознавания каждой точки. *OKS* обеспечивает сбалансированную оценку, учитывающую нюансы локализации ключевых точек, что делает её золотым стандартом в задачах обнаружения ключевых точек объекта.

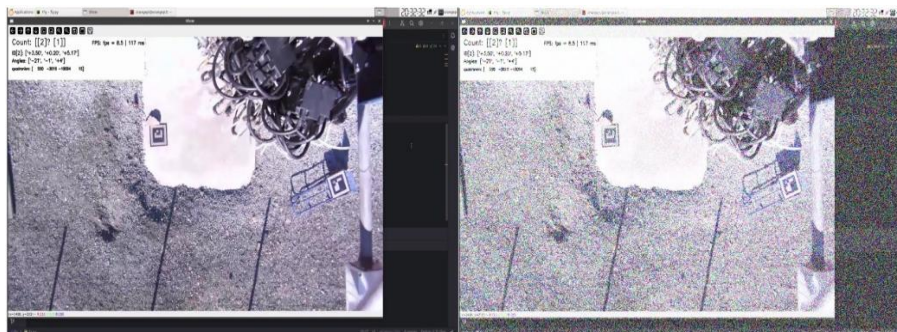


Рис. 7. Исходное изображение (слева) и зашумленное изображение (справа)

На рис. 8 (слева) показана точность определения ключевых точек при уровне шума 150. Показано, что классические методы справляются с задачей точнее в большинстве случаев. На рисунке 8 (справа) показана точность определения ключевых точек при уровне шума 800. Показано, что точность нейронной сети снизилась не более чем на 7 %. Классические методы не обнаружили маркер.

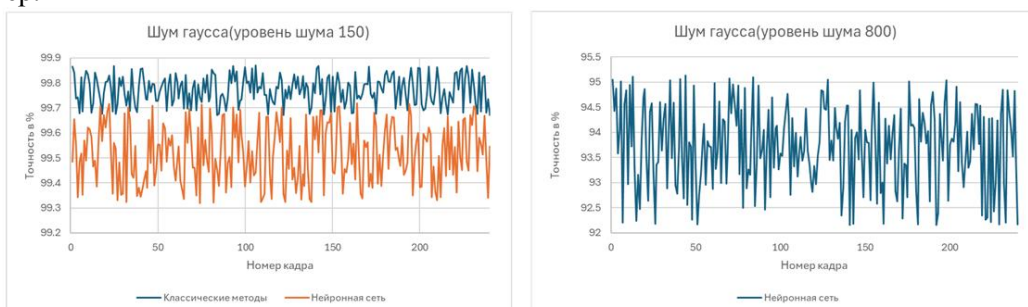


Рис. 8. Точность работы стандартных алгоритмов и нейронной сети в зависимости от уровня шума

В табл. 1 указано среднее значение точности обнаружения ключевых точек на видео для классических методов и нейронной сети.

Таблица 1

Средние значения точности для шума Гаусса для классических методов и нейронной сети

Классические методы (уровень шума 150)	Нейронная сеть (уровень шума 150)	Нейронная сеть (уровень шума 800)
99,77129962	99,51717543	93,73195243

На рис. 9 представлен пример незашумленного изображения и этого же изображения с наложенным медианным размытием с размером ядра 14. Для тестирования работы с медианным размытием на незашумленное изображение будет накладываться медианное размытие с различными ядрами (размерами от 1 до 14). Для тестов будет использоваться фрагмент видео размером в 240 кадров, полученный с испытаний. В качестве метрики будет использоваться OKS (1).

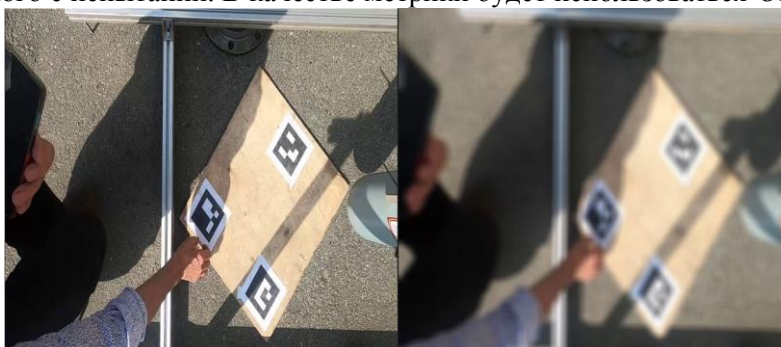


Рис. 9. Пример изображения без шума (слева) и с шумом в виде размытия (справа)

На рис. 10 (слева) показана точность работы определения ключевых точек классическими методами и нейронной сетью при размере ядра 3. Показано, что классические методы справляются с задачей точнее нейронной сети при малом размере ядра (в данном случае 3). На рис. 10 (справа) показано, что при высоких значениях ядра (в данном случае 14) нейронная сеть показывает снижение точности в среднем на 5 %. Классические методы не обнаруживают маркер.

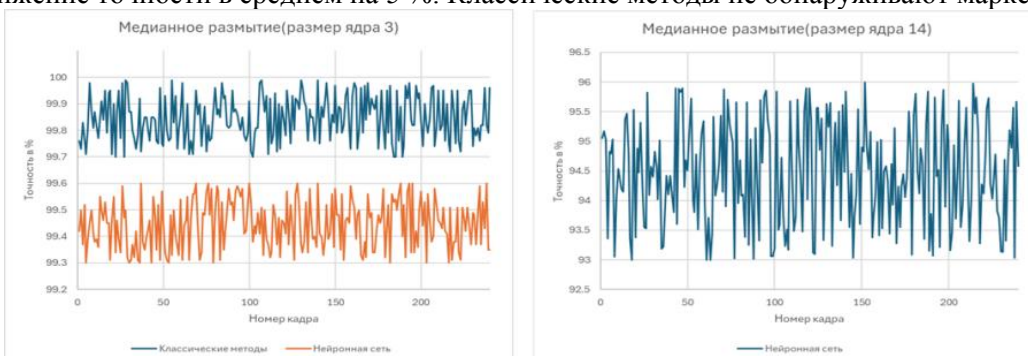


Рис. 10. Точность работы стандартных алгоритмов и нейросети в зависимости от уровня шума

Средние значения точности для медианного размытия для классических методов и нейронной сети		
Классические методы (размер ядра 3)	Нейронная сеть (размер ядра 3)	Нейронная сеть (размер ядра 14)
99,84641667	99,44591667	94,51533333

В табл. 2 указано среднее значение точности обнаружения ключевых точек на видео для классических методов и нейронной сети.

Навигационные объекты могут перекрываться другими объектами. Навигационная система даже в таких случаях должна уметь определять ключевые точки навигационного объекта. Так как в данной работе используются маркеры ArUco в качестве навигационных объектов, то в случае их перекрытия или перекрытия их ключевых точек (углов маркера) необходимо все равно определить их углы. На рис. 11 и 12 показаны изображения с перекрытым маркером. Нейронная сеть определяет углы маркера с точностью 90 % в среднем.

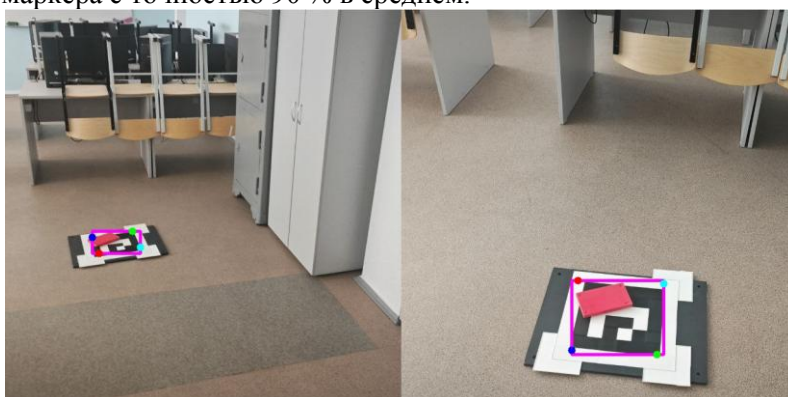


Рис. 11. Пример работы нейронной сети на изображениях с перекрытым маркером

На рис. 13 показано изображение с перекрытым маркером в ключевой точке. В данном случае, хоть нейронная сеть и определила корректно маркер и его ключевые точки, точность составила 80 % в среднем.



Рис. 12. Пример работы нейронной сети на изображениях с перекрытым маркером



Рис. 13. Пример работы нейронной сети на изображениях с перекрытым маркером

Математика

Нейронная сеть может работать и с другими навигационными объектами. Например, рассмотрим фидуциарные маркеры reacTIVision [13]. Так же, как и маркеры ArUco, данные маркеры можно использовать для определения положения автономного робота. Все что нужно сделать, это переобучить нейронную сеть для работы с этими маркерами. При обучении также можно использовать исходный датасет. На рис. 15 показан пример, где на место исходного маркера подставлен новый. Так как координаты исходных маркеров известны, то данный процесс можно автоматизировать.

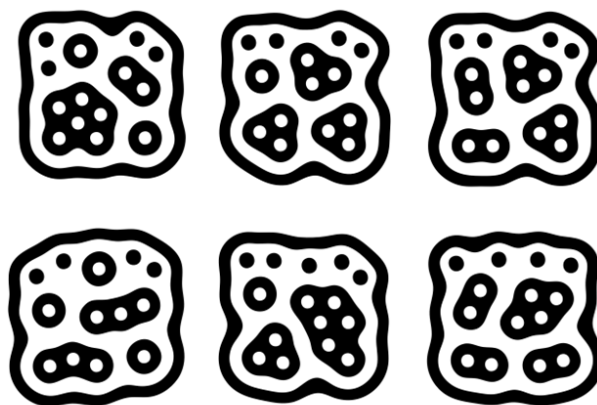


Рис. 14. Пример маркеров reacTIVision

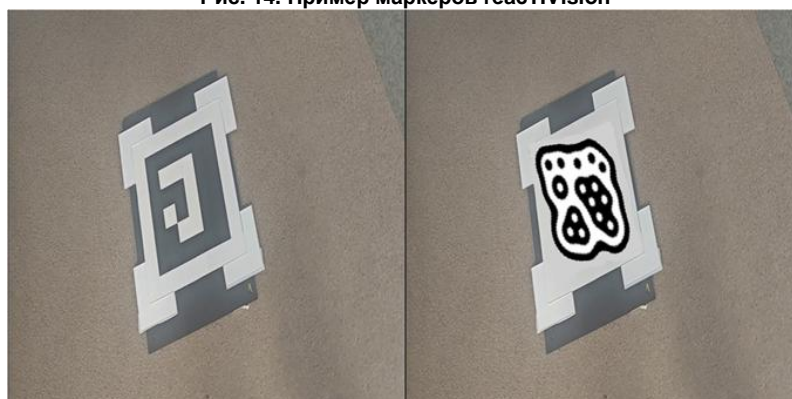


Рис. 15. Исходное изображение (слева) и изображение с наложенным новым маркером

Заключение

В рамках исследования было разработано и испытано программное обеспечение для обработки данных с бортовых камер на основе сверточных нейронных сетей, оптимизированное для выполнения на бортовых вычислителях. Разработанное программное обеспечение использует современную архитектуру нейронных сетей, что позволяет обеспечивать приемлемый уровень точности обнаружения и отслеживания объектов интереса на ограниченных ресурсах бортовых вычислителей, установленных на БЛА. Реализованные алгоритмы устойчивы к помехам на изображении, таким как цифровой шум, низкая контрастность изображения, перекрытие объектов интереса другими объектами. Детекция навигационных объектов позволяет выделять ключевые точки для коррекции систем навигации БЛА в отсутствие информации о местоположении с внешних источников, таких как спутниковая связь. Было показано, что при наложении шума на изображение, точность обнаружения объектов интереса и их ключевых точек падала не более чем на 7 %. При перекрытии объектов интереса точность составляла 80 %.

Литература

1. Computer Vision for Autonomous Vehicles: Problems, Datasets and State of the Art / J. Janai, F. Güney, A. Behl, A. Geiger // Foundations and Trends in Computer Graphics and Vision. – 2020. – Vol. 12, no. 1–3. – P. 1–308.
2. Boyat, A.K. Review Paper: Noise Models in Digital Image Processing / A.K. Boyat, B.K. Joshi // Signal & Image Processing: An International Journal (SIPIJ). – 2015. – Vol. 6, no. 2. – P. 63–75.

3. Sasi, N. Contrast Limited Adaptive Histogram Equalization for Qualitative Enhancement of Myocardial Perfusion Images / N. Sasi, V. Jayasree // *Engineering*. – 2013. – Vol. 5, no.10 B – P. 326–331.
4. Deep Image Deblurring: A Survey / K. Zhang, W. Ren, W. Luo *et al.* // arXiv P. 1–2 <https://arxiv.org/abs/2201.10700>
5. Mur-Artal, R. ORB-SLAM2: An Open-Source SLAM System for Monocular, Stereo, and RGB-D Cameras / R. Mur-Artal, J.D. Tardos // *IEEE Transactions on Robotics*. – 2017. – Vol. 33, no. 5. – P. 1255–1262.
6. MSCEqF: A Multi State Constraint Equivariant Filter for Vision-aided Inertial Navigation / A. Fornasier, P. van Goor, E. Allak *et al.* // *IEEE Robotics and Automation Letters*. – 2024. – Vol. 9, no. 1. – P. 731–738
7. Jocher G. Ultralytics YOLO11 [Электронный ресурс] / G. Jocher, J. Qiu. – Режим доступа: <https://github.com/ultralytics/ultralytics> [Дата обращения: 25 июня 2025]
8. Automatic generation and detection of highly reliable fiducial markers under occlusion / S. Garrido-Jurado, R. Muñoz-Salinas, F.J. Madrid-Cuevas, M.J. Marín-Jiménez // *Pattern Recognition*. – 2014. – Vol. 47, no. 6. – P. 2280–2292.
9. Fischler, M.A. Random Sample Consensus: a Paradigm for Model Fitting with Applications to Image Analysis and Automated Cartography / M.A. Fischler, R.C. Bolles // *Communications of the ACM*. – 1981. – Vol. 24, no. 6. – P. 381–395.
10. Hesch J. A Direct Least-Squares (dls) Method for PnP / J. Hesch, S. I. Roumeliotis // *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*. – 2011. – P. 383–390.
11. Vision-Aided Inertial Navigation for Spacecraft Entry, Descent, and Landing / A.I. Mourikis, N. Trawny, S.I. Roumeliotis *et al.* // *IEEE Transactions on Robotics*. – 2009. – Vol. 25, Iss. 2. – P. 264–280.
12. Свидетельство 2022667746 Российская Федерация. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Программа генерации обучающей выборки для нейронной сети, выполняющей функции локальной навигации летательного аппарата по маркерам на основе видеопотока с камеры / А.А. Кузнецов; заявитель и правообладатель А.А. Кузнецов. – № 2022667746; заявл. 26.08.2022; опубл. 26.08.2022 // *Реестр программ для ЭВМ*. – 2022. – 1 с.
13. Kaltenbrunner M., Bencina R. reacTIVision: A Computer-Vision Framework for Table-Based Tangible Interaction / M. Kaltenbrunner, R. Bencina // *Proc. 1st International Conference on Tangible and Embedded Interaction*. – 2007. – P. 69–74.

Поступила в редакцию 7 июля 2025 г.

Сведения об авторе

Кузнецов Антон Андреевич – аспирант, кафедра прикладной математики и программирования, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, email: kuznetsovaa@susu.ru.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2025, vol. 17, no. 3, pp. 38–46

DOI: 10.14529/mmph250304

ALGORITHM FOR ANALYZING NOISY VIDEO DATA FOR AUTONOMOUS ROBOTS NAVIGATION

A.A. Kuznetsov

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: kuznetsovaa@susu.ru

Abstract. Autonomous robots are widely used for various purposes, including monitoring, research, defense, emergency situations, etc. The main advantages of autonomous robots are mobility, ease of deployment and real efficiency. The problem of autonomous robot navigation based on data obtained from a video channel is relevant. The study aims to implement an algorithm for analyzing noisy video data to

detect key points of navigation objects. Traditional approaches to detecting key points of navigation objects apply iterative algorithms without the use of neural networks. YOLOv11 neural network model and RGB images as input data can solve the problem. The work results in finding the coordinates for the key points of navigation objects. The algorithm test data on the dataset and data obtained from testing the demonstrator of an engine with a central body are provided. The OKS (Object Keypoint Similarity) metric is used. The study results in developing a neural network, trained to detect navigation objects and their key points. Defining the key points of objects enables to correct inertial navigation systems. The obtained neural network is resistant to various noises, including overlaps.

Keywords: navigation; neural networks; YOLOv11; autonomous robots.

References

1. Janai J., Güney F., Behl A., Geiger A. Computer Vision for Autonomous Vehicles: Problems, Datasets and State of the Art. *Foundations and Trends in Computer Graphics and Vision*, 2020, Vol. 12, no. 1–3, pp. 1–308. DOI: 10.1561/06000000079
2. Boyat A.K., Joshi B.K. Review Paper: Noise Models in Digital Image Processing. *Signal & Image Processing: An International Journal (SIPIJ)*, 2015, Vol. 6, no. 2, pp. 63–75.
3. Sasi N., Jayasree V. Contrast Limited Adaptive Histogram Equalization for Qualitative Enhancement of Myocardial Perfusion Images. *Engineering*, 2013, Vol. 5, no.10 B, pp. 326–331. DOI: 10.4236/eng.2013.510B066
4. Zhang K., Ren W., Luo W., Lai W.-S., Stenger B., Yang M.-H., Li H. Deep Image Deblurring: A Survey. *arXiv*, pp. 1–2. <https://arxiv.org/abs/2201.10700>
5. Mur-Artal R., Tardós J.D. ORB-SLAM2: An Open-Source SLAM System for Monocular, Stereo, and RGB-D Cameras. *IEEE Transactions on Robotics*, 2017, Vol. 33, no. 5, pp. 1255–1262, DOI: 10.1109/TRO.2017.2705103
6. Fornasier A., van Goor P., Allak E., Mahony R., Weiss S. MSCEqF: A Multi State Constraint Equivariant Filter for Vision-Aided Inertial Navigation. *IEEE Robotics and Automation Letters*, 2024, Vol. 9, no. 1, pp. 731–738. DOI: 10.1109/LRA.2023.3335775
7. Jocher G., Qiu J. Ultralytics YOLO11. <https://github.com/ultralytics/ultralytics>
8. Garrido-Jurado S., Muñoz-Salinas R., Madrid-Cuevas F.J., Marín-Jiménez M.J. Automatic Generation and Detection of Highly Reliable Fiducial Markers under Occlusion. *Pattern Recognition*, 2014, Vol. 47, no. 6, pp. 2280–2292. DOI: DOI: 10.1016/j.patcog.2014.01.005
9. Fischler M.A., Bolles R.C. Random Sample Consensus: a Paradigm for Model Fitting with Applications to Image Analysis and Automated Cartography. *Communications of the ACM*, 1981, Vol. 24, Iss. 6, pp. 381–395. DOI: 10.1145/358669.358692
10. Hesch J., Roumeliotis S.I. A Direct Least-Squares (DLS) Method for PnP. *Proc. IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*, 2011, pp. 383–390.
11. Mourikis A.I., Trawny N., Roumeliotis I.S., Johnson E.A., Ansar A., Matthies L. Vision-Aided Inertial Navigation for Spacecraft Entry, Descent, and Landing. *IEEE Transactions on Robotics*, 2009, Vol. 25, no. 2, pp. 264–280.
12. Certificate 2022667746 Russian Federation. Certificate of State Registration of a Computer Program. *Program for Generating a Training Sample for a Neural Network Performing the Functions of Local Navigation of an Aircraft using Markers based on a Video Stream From a Camera*. Applicant and Copyright Holder A.A. Kuznetsov. – No. 2022667746; Declared 26.08.2022; Published 26.08.2022 // Register of Computer Programs. – 2022. – 1 p.
13. Kaltenbrunner M., Bencina R. reactIVision: a Computer-Vision Framework for Table-Based Tangible Interaction. *Proc. 1st International Conference on Tangible and Embedded Interaction*, 2007, pp. 69–74. DOI: 10.1145/1226969.1226983

Received July 7, 2025

Information about the author

Kuznetsov Anton Andreevich is Post-graduate Student, Department of Applied Mathematics and Programming, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: kuznetsovaa@susu.ru.

COMPUTER MODELING OF MAGNETIC PROPERTIES OF DISORDERED BCC PHASE OF $\text{Fe}_{100-x}\text{Me}_x$ ALLOYS ($\text{Me} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}$)

*M.A. Zagrebin*¹, *I.A. Markovich*², *A.S. Kuznetsov*¹, *M.V. Matyunina*¹, *A.V. Butakov*¹

¹ Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation

² South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: miczag@mail.ru

Abstract. In this paper, within the framework of density functional theory for the disordered phase A2 of Fe-Me alloys ($\text{Me} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}$) the magnetic exchange constants J_{ij} are calculated and the Curie temperatures T_C are estimated in dependence of the concentration of $\text{Me} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}$ (in the range of $0 \leq x \leq 14$ at. %) and the crystal lattice parameter (in the range of $2,7 \leq a \leq 3,0$ Å). The J_{ij} distribution obtained in the paper demonstrates non-linear behavior. The highest ferromagnetic interaction in the first coordination sphere is ≈ 23 meV. In the third coordination sphere, antiferromagnetic exchange interaction is observed, which reaches a value of $\approx -2,5$ meV. Magnetic transition temperatures calculated using the mean field approximation based on the experimental values and the a_0 parameters calculated within the density functional theory show the presence of a concentration range of $4 \leq x \leq 8$ at. % in which T_C increases. The cross-section of the calculated Curie temperature distribution shows that for all studied Fe-Me alloys with the lattice parameter $a_0 = 2,94$ Å, it is possible to construct a dependence $T_C(x)$ that is in quality agreement with the experimental one.

Keywords: Fe-based alloys; ab initio calculations; magnetic exchange interaction; Curie temperature.

Introduction

The scientific community's interest in the research and development of multifunctional iron-based materials is constantly growing. The demand for environmentally friendly materials makes these alloys especially attractive. The unique combination of mechanical, magnetic, and electrical characteristics of Fe-Me alloys ($\text{Me} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}$) with high magnetostriction values in low magnetic fields [1, 2] is of particular interest for researchers and makes such alloys promising for the creation of sensors and actuators and other magnetomechanical devices. The ability to convert magnetic energy into mechanical energy and vice versa allows these alloys to be used in industry, power engineering, automotive engineering, and other areas. Thus, studies of Fe-Me alloys ($\text{Me} = \text{Al}, \text{Ga},$ and Ge) remain relevant both from the point of view of fundamental science and practical application. This is confirmed by the constant growth in the number of publications in this field.

Experimental studies show that addition of nonmagnetic elements such as aluminum, gallium, or germanium into α -Fe with a body-centered cubic (*bcc*) lattice allows for a significant increase in the magnitude of tetragonal magnetostriction in the resulting alloys compared to pure iron [2]. The phase diagrams of the $\text{Fe}_{100-x}\text{Me}_x$ systems ($\text{Me} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}$) in the concentration range from 0 to 10 at. % reveal the presence of a disordered *bcc* structure A2 (symmetry group no. 229, *Im-3m*, with α -Fe as prototype). In this case, similar behavior of parameters such as tetragonal magnetostriction and the Curie temperature is observed. In the single-phase A2 region, a gradual decrease in Curie temperature T_C is observed, which becomes sharper during the formation of the $D0_3$ structure. This is accompanied by the appearance of a two-phase region, which affects the magnetic characteristics of the material [3].

The theoretical calculation of the transition temperature from ferromagnetic (FM) to paramagnetic (PM) state, presented in [4–7], showed an interesting feature of the obtained results. A complex approach using *ab initio* calculations and Monte Carlo modeling reveals a decreasing behavior of the $T_C(x)$

curve dependences in the $\text{Fe}_{100-x}\text{Al}_x$, $\text{Fe}_{100-x}\text{Ga}_x$, and $\text{Fe}_{100-x}\text{Ge}_x$ alloys only in the concentration range of $x > 12$ at. %. However, in the region of lower concentrations, the behavior of the curve cannot be reproduced, since studies show the opposite trend: the Curie temperature increases with a change in the concentration of $Me = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}$ from zero to 12 at. %. The authors explain this behavior by an increase in the exchange interaction J_{ij} between iron atoms, as well as an increase in the magnetic moment of Fe atoms μ_{Fe} . It is important to note the observed correlation between the values of J_{ij} and μ_{Fe} and the lattice parameter: the larger the lattice parameter, the stronger the exchange interaction and the greater the magnetic moment per iron atom [5, 6]. Thus, the obtained results indicate a complex relationship between the structure, composition, and magnetic properties of $\text{Fe}_{100-x}\text{Me}_x$ alloys ($Me = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}$), which opens up new prospects for basic research into the mechanisms of forming magnetic properties in these materials.

In this paper, we analyze the influence of the crystal lattice parameter and the concentration of nonmagnetic atoms of $Me = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}$ on the exchange interaction, as well as the Curie temperature of the A2 structure of $\text{Fe}_{100-x}\text{Me}_x$ alloys ($0 \leq x \leq 14$ at. %) using *ab initio* simulation.

1. Calculation details

To simulate the magnetic properties in the $\text{Fe}_{100-x}\text{Me}_x$ ($Me = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}, 0 \leq x \leq 14$ at. %) system, we used the Korringa–Kohn–Rostoker Green’s function method implemented in the SPRKKR software package (a Spin Polarized Relativistic Korringa–Kohn–Rostoker code) [8]. The fully disordered structure A2 was investigated in the work. For this phase, Fe and Me atoms are randomly distributed in the Wyckoff position $2a(0, 0, 0)$. To create non-stoichiometric compositions, we used the single-site coherent potential approximation (CPA). The use of CPA allows us to construct an averaged potential for a lattice site occupied by several types of atoms [8]. Note that this approximation successfully describes the properties of many compositionally disordered (non-stoichiometric) alloys. The crystal lattice parameter in the calculations was varied in the range of $2,7 \leq a \leq 3,0 \text{ \AA}$.

In the first stage, we performed calculations of the Heisenberg magnetic exchange constants J_{ij} in the formulation of A. Lichtenstein *et al.* [9]. The calculations included the use of the spin-polarized scalar-relativistic Dirac Hamiltonian with $l_{\text{max}} = 3$. To perform both self-consistent and J_{ij} calculations, 4 495 k -points were generated by a $57 \times 57 \times 57$ k -grid. For the exchange-correlation potential, the generalized gradient approximation in the Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) formulation was used [10]. Obtained exchange coupling constants were used to estimate the Curie temperature T_C in the mean field approximation [11]. J_{ij} parameters in Curie, temperature estimation were taken into account up to the 49th coordination sphere and were limited to a value multiple of 6 lattice parameters.

2. Results and discussion

At the first stage, the magnetic exchange interaction parameters were calculated for the A2 structure of the $\text{Fe}_{98}\text{Ga}_2$ alloy with the experimental lattice value $a_0 = 2,87 \text{ \AA}$ [12]. Fig. 1 shows the values of J_{ij} between Fe atoms depending on the distance between the atoms (in units of the crystal lattice parameter). The exchange interaction between pairs of Ga-Ga and Fe-Ga atoms does not exceed 0,1 meV and is excluded from consideration. In Fig. 1, J_{ij} exhibit oscillating damped behavior. The largest FM interaction is observed in the first coordination sphere of Fe atoms and is $\approx 22 \text{ meV}$. Let us consider how the values of J_{ij} change depending on the crystal lattice parameter and the concentration of $Me = \text{Al}, \text{Ga}$, and Ge atoms.

Fig. 2 shows the distribution of the magnetic exchange interaction constants for the $\text{Fe}_{100-x}\text{Al}_x$ alloy series depending on the value of the crystal lattice and the concentration of Al atoms for the first three coordination spheres (Fig. 2(a) – at a distance of $\sqrt{3}/2a$, Fig. 2(b) – at a distance of a , and Fig. 2(c) – at a distance of $\sqrt{2}a$). The J_{ij} distribution has a non-linear behavior. Between the nearest Fe atoms (Fig. 2(a)), depending on the Al concentration, the change is no more than 5 meV, from $\approx 19 \text{ meV}$ for pure Fe to $\approx 24 \text{ meV}$ in the

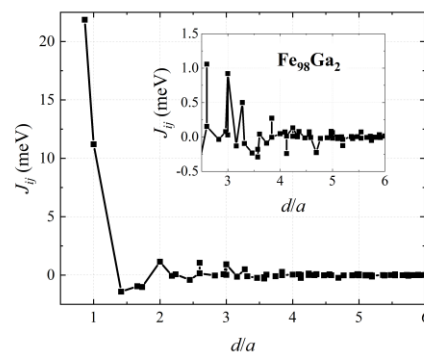


Fig. 1. Magnetic exchange interaction constants J_{ij} as a function of the distance (d/a) between the pairs of i and j atoms, calculated for the experimental lattice value. ($a_0 = 2,87 \text{ \AA}$) [11] in the A2 structure of the $\text{Fe}_{98}\text{Ga}_2$ alloy

case of $Fe_{86}Al_{14}$. Note that such an increase corresponds to the region of lattice parameters $a = 2,85-2,86 \text{ \AA}$, which is close to the experimental value. In the range of values $a \leq 2,76 \text{ \AA}$, J_{ij} demonstrate a weak dependence on the Al concentration, changing by 1 meV ($\approx 20,5 \sim 21,5 \text{ meV}$), while in the range of $a \geq 2,92 \text{ \AA}$, the change in J_{ij} is greater than 3 meV ($\approx 20 \sim 23,5 \text{ meV}$).

In the second coordination sphere (at a distance of a , Fig. 2(b)) the distribution of exchange parameters is different, and two regions can be distinguished in the distribution depending on the lattice parameter. In the first region with small values of the lattice parameters ($a \leq 2,82 \text{ \AA}$), the J_{ij} parameters change slightly with increasing Al concentration, increasing almost linearly with an increase in the lattice parameter at a fixed Al concentration in the alloy. In this region, the parameter values change from $\approx 4,5$ to $\approx 10,5 \text{ meV}$. The second region in Fig. 2(b) is characterized by a decrease in magnetic exchange with an increase in the Al concentration at constant values of a and a fixed Al concentration in the alloy. In this region, the change in the parameters of the magnetic exchange interaction is observed from $\approx 8,0$ to $\approx 14,0 \text{ meV}$.

In the case of interaction between Fe atoms located at a distance of $\sqrt{2}$ (Fig. 2(c), the third coordination sphere), a region of antiferromagnetic interaction is observed in the distribution. This region is observed for lattice parameters of $2,8 \leq a \leq 3,0 \text{ \AA}$ and in the concentration range of $0 \leq x \leq 8 \text{ at. \%}$. In general, a weak (no more than 4 meV) change in the constants of magnetic exchange interaction in the third coordination sphere can be noted.

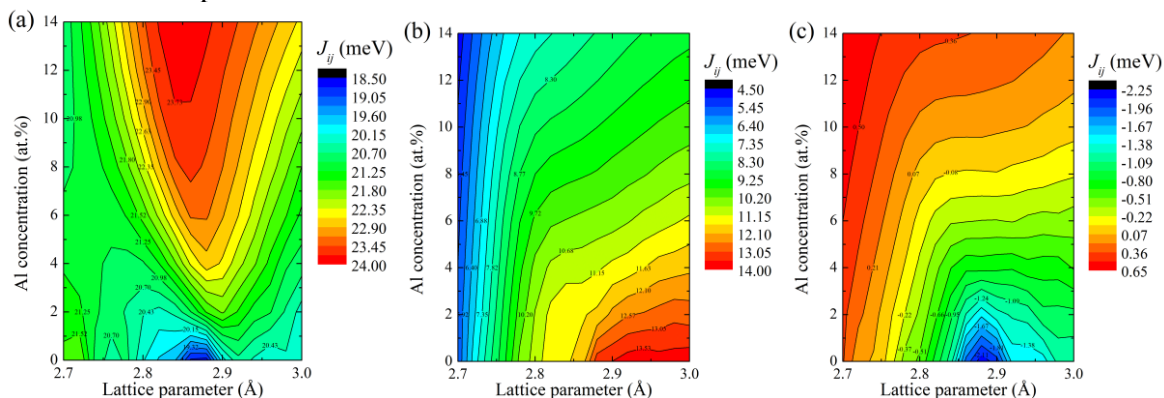


Fig. 2. Distribution of the magnetic exchange interaction constant of $Fe_{100-x}Al_x$ alloys between Fe atoms depending on the crystal lattice parameter a and the Al concentration x in (a) the first, (b) second, and (c) third coordination spheres

In Fe-Ga and Fe-Ge alloys, the behavior of the magnetic exchange interaction constants is similar. The difference lies in the magnitude of the parameters associated with the presence of $Me = Al, Ga, Ge$ atoms in the alloys, which was shown earlier in our works [5–7, 13–17].

In [5–7, 13–17], the authors showed that when modeling using the Monte Carlo method, the calculated Curie temperature values depend significantly on J_{ij} 's value. Taking this fact into account, in the present work, we analyzed the influence of the value of the crystal lattice parameter and the concentration of nonmagnetic atoms in the $Fe_{100-x}Al_x$, $Fe_{100-x}Ga_x$ and $Fe_{100-x}Ge_x$ alloys on the Curie temperature. The values of T_C shown in Fig. 3 as a function of the crystal lattice parameter and the concentration of $Me = Al, Ga, Ge$ atoms were obtained in the mean field approximation, which, as shown by the results of [4, 15], gives overestimated values compared to experimental values, but allows for a qualitative repetition of the experimentally observed trends [4, 18, 19].

Fig. 3 demonstrates that for all three systems: Fe-Al, Fe-Ga, and Fe-Ge, the T_C distributions are similar, and the main difference is observed in the range of lattice parameters from 2,9 to 3,0 Å. Up to lattice parameter values of $a \geq 2,94 \text{ \AA}$, Curie temperatures have a maximum in the range of $Me = Al, Ga, Ge$ atomic concentrations from 0 to 2 at. %. This behavior does not coincide with the observed experimental concentration dependence of the Curie temperature, according to which the behavior of the $T_C(x)$ curve has a descending behavior when $Me = Al, Ga, Ge$ atoms are added to pure iron [12, 20–22]. Note that in the case of the Fe-Ge alloy, a concentration of $\approx 4,5 \text{ at. \%}$ can be distinguished, where the second maximum is observed at $a = 2,9 \text{ \AA}$.

Fig. 3 shows the $T_C(x)$ cross-sections corresponding to the experimental values of the crystal lattice parameter [12, 20, 21] and the crystal lattice parameters obtained by *ab initio* geometric optimization of the crystal structure [6, 7, 23]. For visual clarity, Fig. 4 shows the Curie temperatures as functions of the concentrations of $Me = Al, Ga, Ge$ atoms along the experimental and theoretical dependences of the lat-

tice parameters estimated for all the alloys under consideration (Fig. 3). It can be seen that considering both the experimental and theoretical values of a_0 when calculating the T_C does not allow us to obtain a dependence corresponding to the experimental $T_C(x)$.

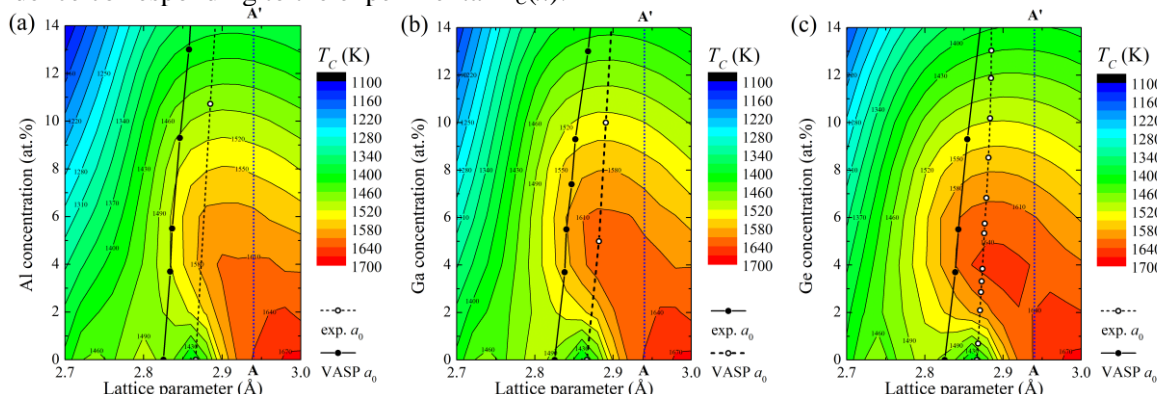


Fig. 3. Distribution of the Curie temperature for alloys: (a) $\text{Fe}_{100-x}\text{Al}_x$, (b) $\text{Fe}_{100-x}\text{Ga}_x$, and (c) $\text{Fe}_{100-x}\text{Ge}_x$, depending on the crystal lattice parameter a and the $Me = \text{Al, Ga, Ge}$ concentration x . Solid (open) circles are experimental (obtained from geometric optimization using the VASP software package) dependences of the crystal lattice parameters; AA' is the distribution cross-section

The figure shows that maximum Curie temperature corresponds to the concentration range of $4 \leq x \leq 8$ at. %. The Curie temperature increases below this range and decreases above it. Nevertheless, such a cross-section (AA') can be found in these distributions (Fig. 3), along which the Curie temperature dependence changes from higher to lower with increasing concentration of the alloying element and is qualitatively in agreement with the experimental dependence. This cross-section can be constructed for the parameter $a \geq 2,94 \text{ \AA}$ for all alloys. As can be seen from Fig. 4, for this value of the crystal lattice parameter, the Curie temperature decreases with increasing concentration of $Me = \text{Al, Ga, Ge}$.

The final thing to note from the analysis of the Curie temperature distribution is the absence of a direct correlation between the distribution of the largest interactions (between the nearest neighboring Fe atoms) and the distribution of the Curie temperature. From this, we conclude that the value of the Curie temperature is in a complex nonlinear dependence on the magnetic exchange interaction parameters.

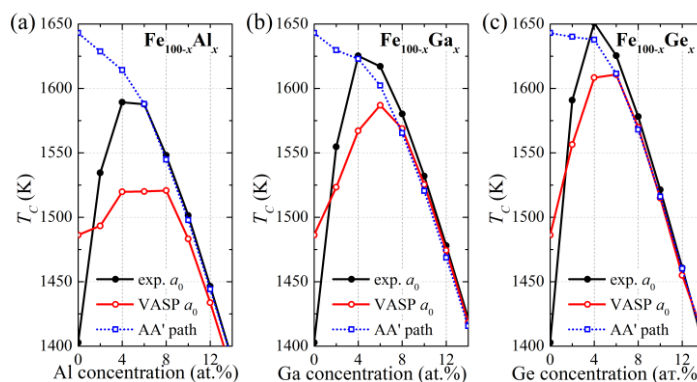


Fig. 4. Calculated Curie temperature values for alloys: (a) $\text{Fe}_{100-x}\text{Al}_x$, (b) $\text{Fe}_{100-x}\text{Ga}_x$, and (c) $\text{Fe}_{100-x}\text{Ge}_x$, obtained with experimental, theoretical (by *ab initio* geometric optimization) parameters of the crystal lattice, and along the cross-section AA' in Fig. 3 ($a = 2,94 \text{ \AA}$)

Conclusion

In this work, for $\text{Fe}_{100-x}\text{Me}_x$ alloys ($Me = \text{Al, Ga, Ge}$, $0 \leq x \leq 14$ at. %), the constants of magnetic exchange interaction J_{ij} are calculated within the density functional theory and the Curie temperatures T_C are estimated within the mean field approximation for the disordered phase A2 in the crystal lattice parameter range of $2,7 \leq a \leq 3,0 \text{ \AA}$. The distribution of constants J_{ij} obtained in the work has a nonlinear behavior. The strongest interaction observed between the nearby Fe atoms is ferromagnetic and is $\approx 23 \text{ meV}$. In the second coordination sphere, the ferromagnetic interaction between Fe atoms is preserved and varies within 4–14 meV. In the third coordination sphere, antiferromagnetic exchange interaction is observed, which reaches a value of $\approx -2,5 \text{ meV}$. Estimation of the Curie temperature using the mean field approximation yields overestimated values compared to the experimental results. The Curie temperatures obtained with the experimental parameters of the crystal lattice have concentration dependences different from those observed experimentally, namely, they have a maximum Curie temperature in the concentration range of $4 \leq x \leq 8$ at. %. On the obtained distributions of the Curie temperature depending on the lattice constant and the content of $Me = \text{Al, Ga, Ge}$ in $\text{Fe}_{100-x}\text{Me}_x$ alloys, it is possible to obtain concentration dependences that qualitatively describe the decreasing behavior of $T_C(x)$ ob-

served experimentally. The study shows that the Curie temperature value is in a complex nonlinear dependence on both the crystal structure constant and the parameters of the magnetic exchange interaction.

This study was supported by the Russian Science Foundation, project no. 24-22-20086, <https://rscf.ru/project/24-22-20086/>.

References

1. Golovin I.S., Palacheva V.V., Mohamed A.K., Balagurov A.M. Structure and Properties of Fe–Ga Alloys as Promising Materials for Electronics. *Physics of Metals and Metallography*, 2020, Vol. 121, pp. 851–893. DOI: 10.1134/S0031918X20090057.
2. Clark A.E., Hathaway K.B., Wun-Fogle M., Restorff J.B., Lograsso T.A., Keppens V.M., Petculescu G., Taylor R.A. Extraordinary Magnetoelasticity and Lattice Softening in BCC Fe-Ga Alloys. *Journal of Applied Physics*, 2003, Vol. 93, Iss. 10, pp. 8621–8623. DOI: 10.1063/1.1540130.
3. Balagurov A.M., Golovin I.S. Neutron Scattering in Studies of Fe-based Functional Alloys (Fe–Ga, Fe–Al). *Physics-Uspekhi*, 2021, Vol. 64, Iss. 7, pp. 702–721. DOI: 10.3367/UFNe.2020.11.038886.
4. Zagrebin M.A., Matyunina M.V., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. The Effect of Exchange-Correlation Potentials on Magnetic Properties of Fe-(Ga, Ge, Al) Alloys. *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, Vol. 1389, p. 012087. DOI: 10.1088/1742-6596/1389/1/012087.
5. Zagrebin M.A., Matyunina M.V., Koshkin A.B., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. Structural and Magnetic Properties of Fe–Al alloys: Ab initio Studies. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2022, Vol. 557, p. 169437. DOI: 10.1016/j.jmmm.2022.169437.
6. Zagrebin M.A., Matyunina M.V., Tarasova Yu.S., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. The Effect of Structural Disorder on Magnetic Properties of Fe-Ga Alloys: Insights from Ab initio and Monte Carlo Calculations. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 2025, Vol. 38, Article no. 136. DOI: 10.1007/s10948-025-06979-8.
7. Pavlukhina O.O., Matyunina M.V., Zagrebin M.A., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D., Zotov I.S. Magnetic Properties of Fe-(Ga,Ge) Compounds: Insights from Ab initio and Monte Carlo Simulations. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 2025, Vol. 38, Article no. 157. DOI: 10.1007/s10948-025-07000-y.
8. Ebert H., Ködderitzsch D., Minár J. Calculating Condensed Matter Properties using the KKR-Green’s Function Method – Recent Developments and Applications. *Reports on Progress in Physics*, 2011, Vol. 74, no. 9, p. 096501. DOI: 10.1088/0034-4885/74/9/096501.
9. Liechtenstein A.I., Katsnelson M.I., Antropov V.P., Gubanov V.A. Local Spin Density Functional Approach to the Theory of Exchange Interactions in Ferromagnetic Metals and Alloys. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 1987, Vol. 67, Iss. 1, pp. 65–74. DOI: 10.1016/0304-8853(87)90721-9.
10. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review B*, 1996, Vol. 77, p. 3865. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
11. Anderson P.W. Theory of Magnetic Exchange Interactions: Exchange in Insulators and Semiconductors. *Solid State Physics*, 1963, Vol. 14, pp. 99–214. DOI: 10.1016/S0081-1947(08)60260-X.
12. Borrego J.M., Blázquez J.S., Conde C.F., Conde A., Roth S. Structural Ordering and Magnetic Properties of Arc-Melted FeGa Alloys. *Intermetallics*, 2007, Vol. 15, Iss. 2, pp. 193–200. DOI: 10.1016/j.intermet.2006.05.007.
13. Matyunina M., Zagrebin M., Sokolovskiy V., Buchelnikov V. Ab initio Study of Magnetic and Structural Properties of Fe-Ga Alloys. *EPJ Web of Conferences*, 2018, Vol. 185, pp. 04013. DOI: 10.1051/epjconf/201818504013.
14. Matyunina M.V., Zagrebin M.A., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. Magnetic properties of $Fe_{100-x}Ga_x$: Ab initio and Monte Carlo Study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2019, Vol. 470, pp. 118–122. DOI: 10.1016/j.jmmm.2017.11.011.
15. Zagrebin M.A., Matyunina M.V., Miroshkina O.N., Pavlukhina O.O., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. Phase Transitions in Fe_3Al -based Alloys: Ab initio Study. *Phase Transitions*, 2020, Vol. 93, iss. 1, pp. 43–53. DOI: 10.1080/01411594.2019.1695255
16. Matyunina M.V., Zagrebin M.A., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. First Principles Study of Structural and Magnetic Properties in $Fe_{100-x}Ge_x$ alloys. *Physica B: Condensed Matter*, 2020, Vol. 580, p. 411934. DOI: 10.1016/j.physb.2019.411934

17. Matyunina M.V., Zagrebin M.A., Buchelnikov V.D. Structural, Magnetic and Magnetocaloric Properties of Fe-Ga Alloys. *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*, 2020, Vol. 5, Iss. 4(2), pp. 580–591. DOI: 10.47475/2500-0101-2020-15417.
18. Koshkin A.B., Zagrebin M.A., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. First-Principles Studies of the Phase Transitions in Fe-Si Alloys. *Bulletin of the South Ural State University. Series of “Mathematics. Mechanics. Physics”*, 2021, Vol. 13, no. 1, pp. 52–58. DOI: 10.14529/mmph210106
19. Koshkin A.B., Zagrebin M.A., Matyunina M.V., Buchelnikov V.D. Structural and Magnetic phase Transitions in $\text{Fe}_{100-x}\text{Al}_x$ Alloys: an Ab initio Study. *Materials. Technologies. Design*, 2021, Vol. 3, no. 4(6), pp. 20–25. DOI: 10.54708/26587572_2021_34620.
20. Stein F., Palm M. Re-Determination of Transition Temperatures in the Fe-Al System by Differential Thermal Analysis. *International Journal of Materials Research*, 2007, Vol. 98, Iss. 7, pp. 580–588. DOI: 10.3139/146.101512.
21. Golovin I.S., Neuhäuser H., Sinning H.-R., Siemers C. Structure and Anelasticity of Ordered and Disordered Fe–Ge Alloys. *Intermetallics*, 2010, Vol. 18, Iss. 5, pp. 913–921. DOI: 10.1016/j.intermet.2009.12.031.
22. Kubaschewski O. *Iron-Binary Phase Diagrams*. Springer Berlin, Heidelberg, 1982, 185 p. DOI: 10.1007/978-3-662-08024-5
23. Tarasova Yu.S., Matyunina M.V. Vliyanie atomnogo besporyadka na magnitnye svoystva kristallicheskoj reshetki A2 splavov Fe-Z ($Z = \text{Ga}, \text{Ge}, \text{Al}$) (Influence of Atomic Disorder on the Magnetic Properties of the A2 Crystal Lattice of Fe-Z ($Z = \text{Ga}, \text{Ge}, \text{Al}$) alloys). *Yuzhno-Ural'skaya molodezhnaya shkola po matematicheskomu modelirovaniyu: sbornik trudov VII Vserossiyskoj nauchno-prakticheskoy konferentsii 14–15 iyunya 2024 g.* (South Ural Youth School on Mathematical Modeling: Collection of Papers of the VII All-Russian Scientific and Practical Conference June 14–15, 2024). Chelyabinsk: Publishing center of SUSU, 2024, pp. 65–69. (in Russ.).

Received June 3, 2025

Information about the authors

Zagrebin Mikhail Aleksandrovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor, Radiophysics and Electronics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: miczag@mail.ru.

Markovich Ivan Alekseevich is Post-graduate Student, Mathematical and Computer Modeling Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

Kuznetsov Andrey Sergeevich is Laboratory Assistant, Researcher, Condensed Matter Physics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

Matyunina Mariya Viktorovna, is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Condensed Matter Physics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: matunins.fam@mail.ru.

Butakov Anatoliy Vladimirovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Radiophysics and Electronics Department, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation.

*Bulletin of the South Ural State University
Series “Mathematics. Mechanics. Physics”
2025, vol. 17, no. 3, pp. 47–54*

УДК 537.61

DOI: 10.14529/mmph250305

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ОЦК ФАЗЫ СПЛАВОВ $\text{Fe}_{100-x}\text{Me}_x$ ($\text{Me} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}$)

М.А. Загребин¹, И.А. Маркович², А.С. Кузнецов¹, М.В. Матюнина¹, А.В. Бутаков¹

¹ Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

² Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация
E-mail: miczag@mail.ru

Аннотация. Для сплавов Fe-Me ($\text{Me} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}$) в рамках теории функционала плотности рассчитаны постоянные магнитного обменного взаимодействия J_{ij} и проведена оценка темпера-

туры Кюри T_C для неупорядоченной фазы A2 в интервале концентраций $Me = Al, Ga, Ge$ $0 \leq x \leq 14$ ат. % и диапазоне параметров кристаллической решетки $2,7 \leq a \leq 3,0$ Å. Полученное в работе распределение J_{ij} демонстрирует нелинейное поведение. Наибольшее ферромагнитное взаимодействие в первой координационной сфере составляет ≈ 23 мэВ. В третьей координационной сфере наблюдается антиферромагнитное обменное взаимодействие, которое достигает значения $\approx -2,5$ мэВ. Температуры магнитного перехода, рассчитанные с использованием приближения молекулярного поля на основании экспериментальных значений и параметров a_0 , рассчитанных в рамках теории функционала плотности, показывают наличие концентрационного интервала $4 \leq x \leq 8$ ат. %, в котором T_C возрастает. Сечение распределения рассчитанных значений температуры Кюри показывает, что для всех исследуемых сплавов Fe-Me ($Me = Al, Ga, Ge$) при параметре решетки $a_0 = 2,94$ Å возможно построить зависимость $T_C(x)$, удовлетворяющую экспериментальной.

Ключевые слова: сплавы на основе Fe; первопринципные расчеты; магнитное обменное взаимодействие, температура Кюри.

Литература

1. Структура и свойства Fe–Ga-сплавов – перспективных материалов для электроники / И.С. Головин, В.В. Палачева, А.К. Мохамед, А.М. Балагуров // Физика металлов и металловедение. – 2020. – Т. 121, № 9. – С. 937–980.
2. Extraordinary Magnetoelasticity and Lattice Softening in BCC Fe-Ga Alloys / A.E. Clark, K.B. Hathaway, M. Wun-Fogle *et al.* // J. of Applied Physics. – 2003. – Vol. 93, Iss. 10. – P. 8621–8623.
3. Балагуров, А.М. Рассеяние нейтронов в исследованиях функциональных сплавов на основе железа (Fe–Ga, Fe–Al) / А.М. Балагуров, И.С. Головин // УФН. – 2021. – Т. 191, № 7. – С. 738–759.
4. The Effect of Exchange-Correlation Potentials on Magnetic Properties of Fe-(Ga, Ge, Al) alloys / M.A. Zagrebin, M.V. Matyunina, V.V. Sokolovskiy, V.D. Buchelnikov // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – Vol. 1389. – P. 012087.
5. Structural and Magnetic Properties of Fe–Al Alloys: *Ab initio* Studies / M.A. Zagrebin, M.V. Matyunina, A.B. Koshkin *et al.* // J. of Magnetism and Magnetic Materials. – 2022. – Vol. 557. – P. 169437.
6. The Effect of Structural Disorder on Magnetic Properties of Fe-Ga Alloys: Insights from *Ab initio* and Monte Carlo Calculations / M.A. Zagrebin, M.V. Matyunina, Yu.S. Tarasova *et al.* // J. of Superconductivity and Novel Magnetism. – 2025. – Vol. 38. – Article no. 136.
7. Magnetic Properties of Fe-(Ga,Ge) Compounds: Insights from *Ab initio* and Monte Carlo Simulations / O.O. Pavlukhina, M.V. Matyunina, M.A. Zagrebin *et al.* // J. of Superconductivity and Novel Magnetism. – 2025. – Vol. 38. – Article no. 157.
8. Ebert, H. Calculating Condensed Matter Properties using the KKR-Green's Function Method – Recent Developments and Applications / H. Ebert, D. Ködderitzsch, J. Minár // Reports on Progress in Physics. – 2011. – Vol. 74, no. 9. – P. 096501.
9. Local Spin Density Functional Approach to the Theory of Exchange Interactions in Ferromagnetic Metals and Alloys / A.I. Liechtenstein, M.I. Katsnelson, V.P. Antropov, V.A. Gubanov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 1987. – Vol. 67, Iss. 1. – P. 65–74.
10. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Physical Review B. – 1996. – Vol. 77. – P. 3865. [Erratum Phys. Rev. Lett. 78, 1396 (1997)]
11. Anderson, P.W. Theory of Magnetic Exchange Interactions: Exchange in Insulators and Semiconductors / P.W. Anderson // Solid State Physics. – 1963. – Vol. 14. – P. 99–214.
12. Structural Ordering and Magnetic Properties of Arc-Melted FeGa Alloys / J.M. Borrego, J.S. Blázquez, C.F. Conde *et al.* // Intermetallics. – 2007. – V. 15, Iss. 2. – P. 193–200.
13. *Ab initio* Study of Magnetic and Structural Properties of Fe-Ga Alloys / M. Matyunina, M. Zagrebin, V. Sokolovskiy, V. Buchelnikov // EPJ Web of Conferences. – 2018. – Vol. 185. – P. 04013.
14. Magnetic Properties of Fe_{100-x}Ga_x: *Ab initio* and Monte Carlo Study / M.V. Matyunina, M.A. Zagrebin, V.V. Sokolovskiy, V.D. Buchelnikov // J. of Magnetism and Magnetic Materials. – 2019. – Vol. 470. – P. 118–122.

15. Phase Transitions in Fe₃Al-Based Alloys: Ab initio Study / M.A. Zagrebin, M.V. Matyunina, O.N. Miroshkina *et al.* // Phase Transitions. – 2020. – Vol. 93, Iss. 1. – P. 43–53.

16. Matyunina, M.V. First Principles Study of Structural and Magnetic Properties in Fe_{100-x}Ge_x Alloys / M.V. Matyunina, M.A. Zagrebin, V.V. Sokolovskiy, V.D. Buchelnikov // Physica B: Condensed Matter. – 2020. – Vol. 580. – P. 411934.

17. Структурные, магнитные и магнитокалорические свойства сплавов Fe-Ga / М.В. Матюнина, В.В. Соколовский, М.А. Загребин, В.Д. Бучельников // Челябинский физико-математический журнал. – 2020. – Т. 5, no. 4-2. – С. 580–591.

18. First-Principles Studies of the Phase Transitions in Fe-Si Alloys / А.Б. Кошкин, М.А. Загребин, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2021. – Т. 13, № 1. – С. 52–58.

19. Структурные и магнитные фазовые превращения в сплавах Fe_{100-x}Al_x: исследования ab initio / А.Б. Кошкин, М.А. Загребин, М.В. Матюнина, В.Д. Бучельников // Materials. Technologies. Design. – 2021. – Т. 3, № 4(6). – С. 20–25.

20. Stein, F. Re-Determination of Transition Temperatures in the Fe-Al System by Differential thermal Analysis / F. Stein, M. Palm // International Journal of Materials Research. – 2007. – Vol. 98, Iss. 7. – P. 580–588.

21. Structure and Anelasticity of Ordered and Disordered Fe-Ge Alloys / I.S. Golovin, H. Neuhäuser, H.-R. Sinning, C. Siemers // Intermetallics. – 2010. – Vol. 18, Iss. 5. – P. 913–921.

22. Kubaschewski, O. Iron-Binary Phase Diagrams / O. Kubaschewski. – Berlin, Springer, 1982. – 185 p.

23. Тарасова, Ю.С. Влияние атомного беспорядка на магнитные свойства кристаллической решетки A2 сплавов Fe-Z (Z = Ga, Ge, Al) / Ю.С. Тарасова, М.В. Матюнина // Южно-Уральская молодежная школа по математическому моделированию: сборник трудов VII Всероссийской научно-практической конференции 14–15 июня 2024 г. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2024. – С. 65–69.

Поступила в редакцию 3 июня 2025 г.

Сведения об авторах

Загребин Михаил Александрович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: miczag@mail.ru.

Маркович Иван Алексеевич – аспирант, кафедра «Математическое и компьютерное моделирование», Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), г. Челябинск, Российская Федерация.

Кузнецов Андрей Сергеевич – лаборант-исследователь кафедры физики конденсированного состояния, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

Матюнина Мария Викторовна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики конденсированного состояния, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: matunins.fam@mail.ru.

Бутаков Анатолий Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация.

О ВЫБОРЕ ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ВРЕМЕНИ ЗАДЕРЖКИ НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТА ХОНГА–ОУ–МАНДЕЛЯ

Д.А. Куц¹, М.С. Подошведов¹, А.Г. Воронцов¹, С.П. Кулик^{1,2},
С.А. Подошведов¹

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

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва,
Российская Федерация

E-mail: kutcda@susu.ru

Аннотация. В работе рассматривается оценка ошибки измерения времени задержки между прибытиями на светоделитель двух идущих по разным каналам фотонов в оптической системе, построенной на базе интерферометра Хонга-Оу-Манделя (ХОМ). Источником двухфотонного света выступает излучение спонтанного параметрического рассеяния (СПР) света второго типа. Задержка фотона в одном из каналов ХОМ-интерферометра может вводиться путем изменения оптического пути вследствие действия различных факторов: механический сдвиг частей интерферометра, изменение показателя преломления среды при изменении температуры, электрического поля и т. п. Выходные порты светоделителя в рассматриваемой схеме подключены к однофотонным детекторам, которые при регистрации фотонов отправляют сигналы на счетчик совпадений. Оценка времени задержки происходит на основе данных с датчика совпадений. Величина абсолютной погрешности оценки времени задержки в данной работе выражена через ширину спектра бифотонов, величину видности, которая рассчитывается на основе максимального и минимального значения с датчика совпадений, а также величину оцениваемого времени задержки. На основе разработанного метода получены численные значения оценки ошибки временной задержки. Было обнаружено, что при фиксированной ширине бифотонного поля соответствующее минимальному значению абсолютной погрешности время задержки с уменьшением видности приближается к точке перегиба кривой зависимости числа совпадений от времени задержки. Это следует учитывать при проектировании измерительных устройств на основе интерферометра Хонга-Оу-Манделя.

Ключевые слова: эффект Хонга-Оу-Манделя; интерферометр Хонга-Оу-Манделя; спонтанное параметрическое рассеяние света; оценка параметра; формула распространения ошибки.

Введение

Эффект Хонга-Оу-Манделя – один из базовых эффектов квантовой оптики – заключается в том, что если на светоделитель по разным входным каналам одновременно поступает по одному фотону, которые не будут различаться по частоте, времени прихода и направлению поляризации, то на выходе из светоделителя фотоны сгруппируются: два фотона будут наблюдаться только либо в одном, либо в другом из выходов [1]. Этот эффект также получил название «антикорреляция фотонов», и данный эффект объясняется интерференцией двухфотонного излучения четвертого по полю порядка¹. Если же параметры фотонов различаются существенно (по сравнению с обратной шириной спектра), то сигнал, вызванный регистрацией одиночных фотонов, будет наблюдаться также и в обоих выходах одновременно. На рис. 1, а приведена типичная схема интерферометра Хонга-Оу-Манделя (ХОМ): пары фотонов (сигнальный и холостой), образующиеся в ходе спонтанного параметрического рассеяния света (СПР) на нелинейном кристалле, направляются на разные входы светоделителя, а затем – в однофотонные детекторы, с которых в счет-

¹ Обращаем внимание, что эффект антикорреляции имеет и классическую интерпретацию в терминах корреляционных функций. Однако, в отличие от описания с помощью фоковских состояний, видность в классическом случае не превышает 50 % (Клышко Д.Н. Квантовая оптика: квантовые, классические и метафизические аспекты. УФН, 1994, Т.164, вып.11, С. 1187–1214.)

чик совпадений направляются сигналы о регистрации фотонов. Типичный вид сигнала с датчика совпадений $R_c(\tau)$ приведен на рис. 1, б: в случае $\tau = 0$ наблюдается минимум [1], вызванный эффектом антикорреляции фотонов. Зависимость $R_c(\tau)$ характеризуют с помощью величины видности $\alpha = (R_c^{\max} - R_c^{\min}) / (R_c^{\max} + R_c^{\min})$. В случае полной неразличимости фотонов в холостом и сигнальном канале видность α равна 1.

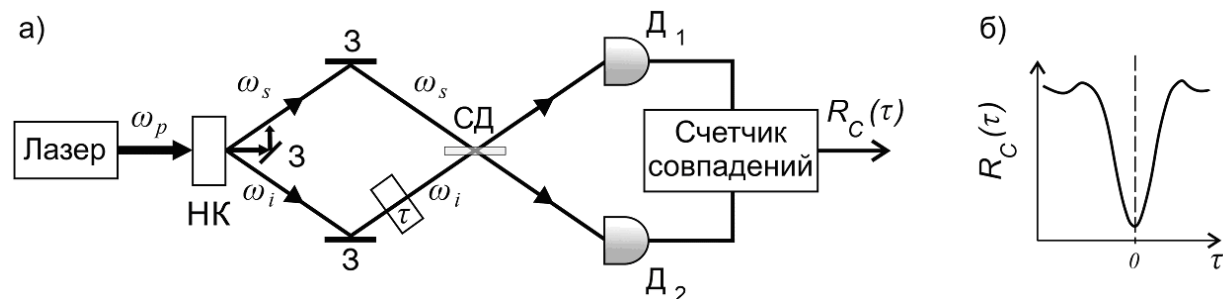


Рис. 1. а) Оптическая схема ХОМ интерферометра: ω_p – частота фотона накачки; НК – нелинейный кристалл; З – зеркало; ω_i, ω_s – частоты холостого и сигнального фотонов; τ – временная задержка; СД – светоделитель; Д1, Д2 – детекторы; $R_c(\tau)$ – сигнал с датчика совпадений; б) Типичный вид зависимости сигнала с датчика совпадений от величины времени задержки τ

Изменение величины τ вследствие действия каких-либо факторов приводит к изменению сигнала с датчика совпадений: данное обстоятельство можно использовать в метрологии для построения измерительных приборов, основанных на оценке величины τ на основе данных с датчика совпадений [2].

Отметим, что данный подход обладает рядом преимуществ. В отличие от классической интерферометрии, ХОМ-интерференция не зависит от изменения оптической фазы: ХОМ-интерферометр сохраняет свою способность измерять временные задержки, даже когда флуктуации разности хода составляют порядка длины волны и более. Типичные фазозависимые методы чувствительны к фазовым флуктуациям, тогда как ХОМ-интерферометрия невосприимчива к изменениям относительной фазы между двумя фотонами. Датчик на основе ХОМ-эффекта не требует потенциально непрактичных и/или сложных систем стабилизации, как это обычно требуется в классической интерферометрии. Эти особенности ХОМ-эффекта привели к предложениям для датчиков задержки времени со сверхвысоким временным разрешением [3].

Данная работа посвящена изучению абсолютной погрешности измерения времени задержки на основе ХОМ-интерферометра с входным бифотонным состоянием света. Учет коррелированных членов с большим числом фотонов [4] может внести дополнительные изменения в оценку погрешности временной задержки. Также на точность оценки временной задержки может оказывать влияние возможная запутанность генерируемых фотонов с фотонами накачки [5] в случае достаточно большой входной интенсивности света.

Оценка точности временной задержки

Бифотонное состояние неколлинеарного невырожденного по частоте светового поля в фиксированных поляризационно-пространственных модах синхронизмом типа II в частотном представлении описывается следующей волновой функцией [6]:

$$|\Psi\rangle = \iint d\omega_s d\omega_i f(\omega_s, \omega_i) a_1^+(\omega_s) a_2^+(\omega_i) |00\rangle, \quad (1)$$

где нижние индексы отвечают за сигнальную (s) и холостую (i) компоненты, выражения $a_1^+(\omega_s)$ и $a_2^+(\omega_i)$ описывают действие операторов рождения на соответствующих частотах на вакуумное состояние. Отметим, что спектральная амплитуда $f(\omega_s, \omega_i)$ является нормированной функцией, то есть подчиняется условию нормировки $\iint |f(\omega_s, \omega_i)|^2 d\omega_s d\omega_i = 1$.

Холостой фотон испытывает временную задержку τ , что в спектральном разложении приводит к появлению фазового множителя $\exp(i\omega_i\tau)$ в волновой функции бифотона. В данном случае временная задержка τ отсчитывается от минимума функции, показанной на рис. 1, б ($\tau = 0$ соответствует минимуму). Дальнейшая эволюция бифотона связана со смешением фотонов на равно-

весном светоделителе, что ведет к появлению состояния, уже напрямую связанного с ХОМ-эффектом

$$|\Psi(\tau)\rangle = \frac{1}{2} \iint d\omega_s d\omega_i f(\omega_s, \omega_i) \exp(i\omega_i \tau) \left(a_1^+(\omega_s) a_2^+(\omega_i) - a_1^+(\omega_i) a_2^+(\omega_s) \right) |00\rangle, \quad (2)$$

которое может быть переписано в эквивалентной, но более компактной форме

$$|\Psi(\tau)\rangle = \frac{1}{2} \iint d\omega_s d\omega_i \left(f(\omega_s, \omega_i) \exp(i\omega_i \tau) - f(\omega_i, \omega_s) \exp(i\omega_s \tau) \right) a_1^+(\omega_s) a_2^+(\omega_i) |00\rangle. \quad (3)$$

В данном измерении число совпадающих фотоотсчетов

$$S = \iint d\omega_1 d\omega_2 |\omega_1\rangle |\omega_2\rangle \langle \omega_1 | \langle \omega_2 |, \quad (4)$$

является наблюдаемой величиной, среднее значение $\langle S \rangle$ которой зависит от τ . Измерение оператора совпадений (4) позволяет оценить значение переменной τ . Точность этого измерения можно оценить с помощью формулы распространения ошибки [7]:

$$\delta\tau = \frac{\Delta S}{\left| \frac{d\langle S \rangle}{d\tau} \right|}, \quad (5)$$

где числитель $\Delta S = \sqrt{\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2}$ – среднеквадратичное отклонение в совпадениях фотоотсчетов, а знаменатель – величина, определяющая чувствительность среднего значения оператора S по отношению к переменной τ .

В реальном эксперименте присутствуют факторы, которые могут ухудшить видность интерференционной картины. В нашем рассмотрении вклад несовершенства настройки оптической схемы может быть промодулирован посредством рассмотрения уже несбалансированного светоделителя, на котором смешиваются фотоны, что позволяет рассчитать среднее значение оператора (4) как

$$\langle S \rangle = \frac{1}{2} \left(1 - \alpha \iint d\omega_1 d\omega_2 |f(\omega_1, \omega_2)|^2 \cos((\omega_1 - \omega_2)\tau) \right), \quad (6)$$

где α – видность интерференционной картины, и здесь мы также приняли во внимание симметричность амплитуды бифотона к перестановке частот, то есть выполнение условия $f(\omega_1, \omega_2) = f(\omega_2, \omega_1)$. Если аппроксимировать спектральную амплитуду бифотонного поля бигaussовской функцией

$$f(\omega_1, \omega_2) = \sqrt{\frac{2}{\pi \delta \omega \Delta \omega}} \exp\left(-\frac{(\omega_1 - \omega_2)^2}{2(\Delta \omega)^2}\right) \exp\left(-\frac{(\omega_1 + \omega_2 - \omega_0)^2}{2(\delta \omega)^2}\right), \quad (7)$$

то среднее значение оператора (6) преобразуется в финальное выражение

$$\langle S \rangle = \frac{1}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{(\Delta \omega)^2 \tau^2}{4}\right) \right), \quad (8)$$

где $\Delta \omega$ – ширина спектра бифотонного поля, $\delta \omega$ – ширина условного частотного распределения, связанная с шириной спектра накачки, несущая частота которой ω_0 . Если мы воспользуемся соотношением $\langle S^2 \rangle = \langle S \rangle^2$, то по формуле распространения ошибки в уравнении (5) получим оценку ошибки неизвестной временной задержки

$$\delta\tau = \frac{\sqrt{\langle S \rangle (1 - \langle S \rangle)}}{\left| \frac{d\langle S \rangle}{d\tau} \right|} = 2 \frac{\sqrt{1 - \alpha^2 \exp\left(-\frac{(\Delta \omega)^2 \tau^2}{2}\right)}}{\alpha (\Delta \omega)^2 \tau \exp\left(-\frac{(\Delta \omega)^2 \tau^2}{4}\right)}. \quad (9)$$

Полученная зависимость (9) в данной работе является основой для подбора значений величин α , $\Delta \omega$ при реализации в эксперименте. На рис. 2 приведены результаты численных расчетов определения времен задержки, соответствующих минимальным значениям абсолютной погрешности при заданных величинах ширины спектра бифотона, видности. Из приведенных на рис. 2 зависимостей можно видеть, что при видности больше 0,5 точка, соответствующая минимуму абсолютной погрешности времени задержки, лежит ниже точки перегиба функции $\langle S(\tau) \rangle$.

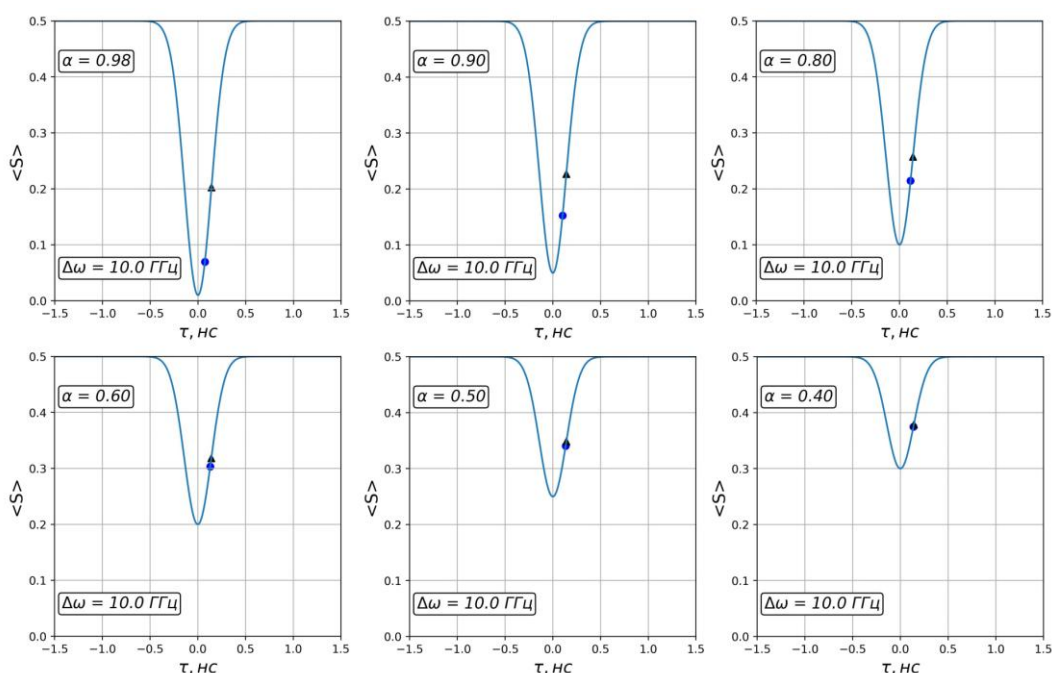


Рис. 2. Кривая $\langle S(\tau) \rangle$ при различных значениях видимости. Круг соответствует величине τ с минимальным значением абсолютной погрешности. Треугольник – точка перегиба функции $\langle S(\tau) \rangle$

Выводы

В случае СПР второго типа погрешность $\delta\tau$ определения времени задержки между прибытиями фотонов на светодетектор в ХОМ-интерферометре была выражена через величину ширины спектра бифотона $\Delta\omega$, видность α , а также время задержки между фотонами τ . Выражение для величины $\delta\tau(\alpha, \Delta\omega, \tau)$ было получено на основе формулы распространения ошибки. Для различных значений $\Delta\omega$ и α были определены такие времена задержки между фотонами τ_{\min} , для которых реализуются наименьшие абсолютные погрешности $\delta\tau$ при фиксированных $\Delta\omega$ и α . Было обнаружено, что при фиксированном значении $\Delta\omega$ величина τ_{\min} при уменьшении видности приближается к точке перегиба зависимости числа совпадений от времени задержки τ . Это обстоятельство нужно учитывать при проектировании работающих на основе ХОМ-интерферометра измерительных средств.

Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-20063, <https://rscf.ru/en/project/24-22-20063/>.

Литература

1. Hong, C.K. Measurement of Subpicosecond Time Intervals between Two Photons by Interference / C.K. Hong, Z.Y. Ou, L. Mandel // Phys. Rev. Lett. – 1987. – Vol. 59, Iss. 18. – P. 2044.
2. Квантовая оптическая метрология // А.П. Алуджанц, Д.В. Царёв, Д.А. Куц и др. // УФН. – 2024. – Iss. 194, no. 7. – pp. 711–739.
3. Attosecond-Resolution Hong–Ou–Mandel Interferometry / A. Lyons, G.C. Knee, E. Bolduc *et al.* // Sci. Adv. – 2018. – Vol. 4, no. 5. – eaap9416.
4. Podoshvedov, S.A. A Full Quantum Theory of Parametric Down Conversion and its Application to Coincidence Measurements / S.A. Podoshvedov, J. Noh, K. Kim // Journal of the Korean Physical Society. – 2005. – Vol. 47, Iss. 2. – P. 213–222.
5. Podoshvedov, S.A. Testing Quantum Mechanics Against Macroscopic Realism using the Output of χ^2 Nonlinearity / S.A. Podoshvedov, J. Kim // Phys. Rev. A. – 2006. – Vol. 74, Iss. 3. – 033810.

6. Theory of Two-Photon Entanglement in Type-II Optical Parametric Down-Conversion / M.H. Rubin, D.N. Klyshko, Y.H. Shih, A.V. Sergienko // *Phys. Rev. A.* – 1994. – Vol. 50, Iss. 6. – P. 5122–5133.

7. Quantum Metrology with Imperfect Measurements / Y.L. Len, T. Gefen, A. Retzker, J. Kołodzyński // *Nat Commun.* – 2022. – Vol. 13, Iss. 1. – P. 6971.

Поступила в редакцию 10 июля 2025 г.

Сведения об авторах

Куц Дмитрий Анатольевич – заведующий лабораторией квантовой обработки информации и квантовых вычислений, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: kutcda@susu.ru.

Подошведов Михаил Сергеевич – лаборант-исследователь лаборатории квантовой обработки информации и квантовых вычислений, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: mikerodob@gmail.com.

Воронцов Александр Геннадьевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1965-1474>, e-mail: vorontsovag@susu.ru.

Кулик Сергей Павлович – доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник Центра квантовых технологий, Московский государственный университет, г. Москва, Российская Федерация; Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: sergei.kulik@physics.msu.ru.

Подошведов Сергей Анатольевич – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории квантовой обработки информации и квантовых вычислений, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: sapodo68@gmail.com.

ON SELECTING OPTIMAL PARAMETERS FOR DELAY TIME MEASUREMENT USING THE HONG–OU–MANDEL EFFECT

D.A. Kuts¹, M.S. Podoshvedov¹, A.G. Vorontsov¹, S.P. Kulik^{1,2}, S.A. Podoshvedov¹

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

² *Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation*

E-mail: kutcda@susu.ru

Abstract. The paper deals with the measurement error of the delay time between the arrivals at the beam splitter of two photons traveling through different channels in an optical system based on a Hong-Ou-Mandel (HOM) interferometer. We consider the source of two-photon light to be the radiation of spontaneous parametric scattering (SPS) of light of the second type. The photon delay in one of the HOM interferometer channels can be induced by a change in the optical path length due to various factors: mechanical displacement of interferometer parts, changes in the refractive index of the medium caused by temperature variations, electric fields, etc. In the scheme, the outputs of the beam splitter are connected to single-photon detectors, which send signals to a coincidence counter upon photon detection. The coincidence counter data determine the delay time. The authors determine the absolute error in estimating the delay time in terms of the biphoton spectral width, the visibility, calculated from the maximum and minimum values of the coincidence counter signal, and the estimated delay time value itself. The derived expression facilitates finding the estimated delay time value. The study reveals that for a fixed biphoton field width, the delay time corresponding to the minimum absolute error value approach-

es the inflection point of the coincidence-time curve with decreasing visibility. This should be taken into account when designing measuring devices based on the Hong-Ou-Mandel interferometer.

Keywords: Hong-Ou-Mandel effect; Hong-Ou-Mandel interferometer; spontaneous parametric down-conversion; parameter estimation; error propagation formula.

References

1. Hong C.K., Ou Z. Y., Mandel L. Measurement of Subpicosecond Time Intervals between Two Photons by Interference. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, Vol. 59, Iss. 18, p. 2044. DOI: 10.1103/PhysRevLett.59.2044
2. Alodjants A.P., Tsarev D.V., Kuts D.A., Podoshvedov S.A., Kulik S.P. Quantum Optical Metrology. *Phys. Usp.*, 2024, Vol. 67, no. 7, pp. 668–693. DOI: 10.3367/UFNe.2024.01.039634
3. Lyons A., Knee G.C., Bolduc E., Roger T., Leach J., Gauger E.M. Attosecond-Resolution Hong-Ou-Mandel Interferometry. *Sci. Adv.*, 2018, Vol. 4, no. 5, eaap9416. DOI: 10.1126/sciadv.aap9416
4. Podoshvedov S.A., Noh J., Kim K. A Full Quantum Theory of Parametric Down Conversion and its Application to Coincidence Measurements. *Journal of the Korean Physical Society*, 2005, Vol. 47, Iss. 2, pp. 213–222.
5. Podoshvedov S.A., Kim J. Testing Quantum Mechanics Against Macroscopic Realism using the Output of χ^2 Nonlinearity. *Phys. Rev. A*, 2006, Vol. 74, Iss. 3, 033810. DOI: 10.1103/PHYSREVA.74.033810
6. Rubin M.H., Klyshko D.N., Shih Y.H., Sergienko A.V. Theory of Two-Photon Entanglement in Type-II Optical Parametric Down-Conversion, *Phys. Rev. A*, 1994, Vol. 50, Iss. 6, pp. 5122–5133. DOI: 10.1103/PhysRevA.50.5122
7. Len Y.L., Gefen T., Retzker A., Kołodyński J. Quantum Metrology with Imperfect Measurements. *Nat Commun.*, 2022, Vol. 13, Iss. 1, p. 6971. DOI: 10.1038/s41467-022-33563-8

Received July 10, 2025

Information about the authors

Kuts Dmitri Anatolyevich is Head of the Laboratory of Quantum Information Processing and Quantum Computing, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: kutcda@susu.ru.

Podoshvedov Mikhail Sergeevich is Research Assistant, Laboratory of Quantum Information Processing and Quantum Computing, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: mikepodo6@gmail.com.

Vorontsov Alexander Gennadevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Nanoscale Systems Physics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1965-1474>, e-mail: vorontsovag@susu.ru.

Kulik Sergey Pavlovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Principal Research Scientist, Center for Quantum Technologies, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation; South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: sergei.kulik@physics.msu.ru.

Podoshvedov Sergey Anatolyevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Senior Research Scientist, Laboratory of Quantum Information Processing and Quantum Computing, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: sapodo68@gmail.com.

РОЛЬ ПРИМЕСНЫХ ИОНОВ В ФОРМИРОВАНИИ НЕЛИНЕЙНОГО ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТКЛИКА НЕМАТИЧЕСКОЙ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКИ

Ф.В. Подгорнов¹, А.М. Гавриляк¹, М.В. Гавриляк^{1,2}

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

² Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Российская Федерация

E-mail: gavriilyak.maksim@yandex.ru

Аннотация. Экспериментально исследован нелинейный диэлектрический отклик нематического жидкого кристалла (НЖК). Показано наличие нечетных гармоник в диэлектрическом отклике в низкочастотной области спектра (от 0,5 мГц до 600 Гц). Выявлены два релаксационных эффекта, вызванных переносом примесных ионов – поляризация пространственного заряда и образование двойных электрических слоев.

Ключевые слова: нематические жидкие кристаллы; примесные ионы; поляризация пространственного заряда; двойной электрический слой; нелинейная диэлектрическая спектроскопия.

Введение

Классическими областями применения жидких кристаллов (ЖК) являются оптические пространственные модуляторы света [1, 2], дисплеи [3, 4], дифракционные элементы [5, 6] и другие электрооптические устройства [7, 8]. Однако в последнее время возникают новые области применения жидких кристаллов, такие как высокочувствительные гибкие датчики температуры [9] и давления [10], биосенсоры [11], квантовая криптография [12] и др. [13].

Несмотря на высокие требования к чистоте жидкокристаллических материалов, ионные примеси могут возникать в объеме ЖК как в процессе их синтеза [14], так и в процессе сборки [15] и работы устройств [16]. Таким образом, нелинейное поведение ионных примесей в жидкокристаллических устройствах является актуальной темой исследования, поскольку ионные примеси, попадающие в объем ЖК, негативно влияют на работу устройств, вызывая залипание и мерцание изображения в дисплеях [17, 18], а также снижение чувствительности и ложные срабатывания в жидкокристаллических сенсорах [19]. Ионные примеси под действием внешнего электрического поля приводят к изменению электрооптического отклика в модуляторах света [20] в результате изменения диэлектрических свойств ЖК [21, 22] и экранирования внешнего электрического поля [23, 24]. В серии работ [25, 26] была предложена модель динамического делителя напряжения, учитывающая перераспределение электрического поля внутри жидкокристаллической ячейки между ЖК и ориентирующим слоем. Согласно данной модели, форма и амплитуда напряжения, падающего на слое жидкого кристалла, зависят от электрических сопротивлений компонентов ЖК-ячейки, таких как ориентирующие слои, слой ЖК и двойной электрический слой [27].

Среди различных методов исследования ионных процессов в жидких кристаллах (напр. электрооптический [28, 29], циклическая вольтамперометрия [30] и др. [31]) можно выделить импедансную спектроскопию. Данный метод позволяет идентифицировать основные ионные процессы, протекающие преимущественно при низких частотах [32, 33]. В статье [34] рассмотрен метод определения подвижности ионной примеси в ЖК-ячейке импедансным методом. Предложено теоретическое описание поведения комплексного диэлектрического спектра ЖК, полученное с помощью решения уравнения диффузии [35, 36]. В предположении отсутствия переноса заряда и адсорбции на электродах продемонстрировано влияние диффузионной части двойного электрического слоя на спектры комплексного импеданса в низкочастотной области [37, 38]. Расширенная модель прыжковой ионной проводимости диэлектрических пленок позволяет получить уравнения частотной дисперсии комплексной диэлектрической проницаемости и электрической проводимости для жидкокристаллической ячейки с учетом влияния ориентирующих слоев [39].

Вышеописанные исследования проводились в предположении линейности диэлектрического отклика системы при малых амплитудах осциллирующего напряжения (меньше теплового напряжения $U < kT/ze$, где k – постоянная Больцмана, T – температура, z – валентность ионов, e – элементарный заряд). Однако в существующих устройствах к жидкому кристаллу при-

кладывается управляющий электрический сигнал, амплитуда которого превышает величину теплового напряжения, что должно приводить к нелинейности диэлектрического отклика [40–43].

Целью данной работы является идентификация физических процессов, ответственных за возникновение низкочастотного нелинейного диэлектрического отклика нематических жидких кристаллов.

Методика эксперимента

В данной работе исследовалась нематическая жидкокристаллическая смесь E7, являющаяся термотропным нематиком с температурой фазового перехода в изотропную жидкость $T \approx 330$ К и положительной диэлектрической анизотропией ($\Delta\varepsilon \approx 12$). Для измерения нелинейных диэлектрических спектров изготовлена жидкокристаллическая ячейка с планарной ориентацией. Такая ячейка представляет собой две параллельные стеклянные пластины, покрытые проводящим слоем из оксида индия-олова, с нанесенным на него слоем полиимида нейлон 6. Для задания планарной ориентации полимерный слой натирался мягкой ворсистой тканью. Толщина ячейки измерялась спектральным методом и составила $d_{cell} = 14$ мкм.

Диэлектрические измерения проведены с помощью импедансного спектрометра Novocontrol Beta System в частотном диапазоне от 0,5 мГц до 1 МГц. Амплитуда осциллирующим напряжения выбиралась $U_{osc} = 5$ мВ и 3 В для линейного и нелинейного режимов соответственно. Температура ЖК-ячеек контролировалась с помощью термостолика Linkam HFS600E-PB4. Для проведения нелинейных диэлектрических измерений выбраны следующие температуры: $T = 298$ К и $T = 353$ К для нематической и изотропной фазы соответственно.

Результаты и обсуждение

Нелинейная диэлектрическая спектроскопия (НДС) представляет собой расширенную версию классической диэлектрической спектроскопии. В рамках НДС на образец подаётся переменное электрическое напряжение с большей амплитудой по сравнению с тепловым напряжением. В таком случае регистрируемый токовый отклик перестаёт быть строго синусоидальным и включает в себя вклад высших гармоник. Высшие гармоники тока $I_n(\omega)$ рассчитываются с помощью комплексного преобразования Фурье из электрического тока $i(t)$:

$$I_n(\omega) = \frac{2}{nT} \int_0^{n\tau} i(t) e^{jn\omega t} dt, \quad (1)$$

где n – номер гармоники, j – мнимая единица, ω – циклическая частота осциллирующего напряжения, τ – время периода.

Гармонические составляющие нелинейного комплексного спектра импеданса определяются по аналогии с классической импедансной спектроскопией:

$$Z_n(\omega) = \frac{U(\omega)}{I_n(\omega)}, \quad (2)$$

где $U(\omega)$ – комплексная амплитуда приложенного осциллирующего электрического напряжения.

Используя параметры ЖК-ячейки и измеренный спектр импеданса, можно рассчитать комплексные спектры нелинейной диэлектрической проницаемости высших гармоник $\varepsilon_n(\omega) = \varepsilon'_n(\omega) - j\varepsilon''_n(\omega)$:

$$\varepsilon'_n(\omega) = \frac{Z_n''(\omega) d_{cell}}{\omega \varepsilon_0 S (Z_n'(\omega)^2 + Z_n''(\omega)^2)}, \quad (3)$$

$$\varepsilon''_n(\omega) = \frac{Z_n'(\omega) d_{cell}}{\omega \varepsilon_0 S (Z_n'(\omega)^2 + Z_n''(\omega)^2)}, \quad (4)$$

где $Z_n'(\omega)$ и $Z_n''(\omega)$ – n -е гармоники действительной и мнимой части импеданса, S – площадь перекрытия электродов ЖК-ячейки, ε_0 – электрическая постоянная.

Таким образом, с помощью нелинейной комплексной диэлектрической спектроскопии можно исследовать нелинейную зависимость диэлектрической релаксации. Спектры основной гар-

мониторинга действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости нематического жидкого кристалла в планарной ячейке при температурах $T = 298$ К и $T = 353$ К представлены на рис. 1. На данных графиках видно, что в диэлектрических спектрах присутствуют три релаксационных процесса. Первый процесс в области высоких частот от 100 Гц и выше связан с вращением молекул жидкого кристалла. В экспериментальных данных наблюдается плоский участок, зависящий от приложенного напряжения и температуры. Если приложенное напряжение меньше, чем напряжение Фредерикса ($U < U_{th}$), наблюдаемое плато соответствует диэлектрической проницаемости планарной ориентации ЖК, которая составляет $\epsilon'_\perp = 5,3$. В противоположном случае, когда $U > U_{th}$, происходит переориентация директора НЖК во внешнем электрическом поле, а диэлектрическая проницаемость будет равна усредненному значению ϵ'_\perp и ϵ'_\parallel составляющих проницаемости НЖК. Величина действительной части проницаемости при приложенном переменном электрическом напряжении с амплитудой $U = 3$ В на частоте $\nu = 10$ кГц составила $\epsilon' = 14,3$.

В изотропной фазе при $T = 353$ К ввиду разориентированности молекул жидкого кристалла диэлектрическая проницаемость остаётся постоянной и не зависит от напряжения. Диэлектрическая проницаемость ЖК в изотропной фазе равна $\epsilon'_{iso} = 9,4$ на частоте $\nu = 10$ кГц.

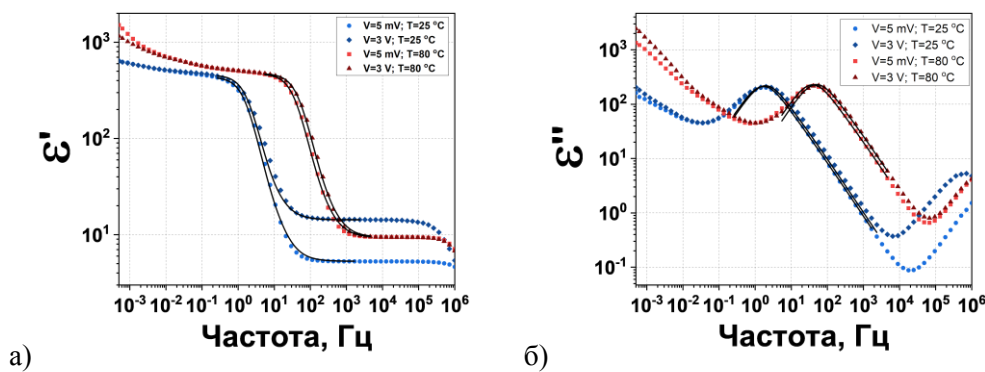


Рис. 1 а) действительная и б) мнимая части спектра диэлектрической проницаемости в зависимости от напряжения и температуры

Второй релаксационный процесс в области низких частот связан с поляризацией пространственного заряда, т. е. с движением противоположно заряженных примесных ионов в объеме ЖК и накоплением их на границе с электродом. Этот процесс проявляется в резком возрастании диэлектрической проницаемости на частотах $\nu < 100$ Гц, пока не достигнет максимума и не выйдет на плато в виду разделения заряда и образования дипольного момента, ограниченного толщиной зазора ЖК-ячейки. С повышением температуры релаксационный процесс смещается в область более высоких частот из-за уменьшения кинематической вязкости НЖК. В этом случае появляется третий низкочастотный релаксационный процесс, предположительно связанный с релаксацией двойного электрического слоя, образующегося в ЖК-ячейке. Однако сложность анализа данного эффекта связана с большим временем релаксации и ограничением работы измерительного прибора.

Частотная зависимость действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости, описывающая процесс поляризации пространственного заряда, выражается как [44]

$$\epsilon' = - \left(\frac{ne^2 D}{\omega \epsilon_0 k T A} \right) \left(\frac{1 + 2 \exp(A) \sin(A) - \exp(2A)}{1 + 2 \exp(A) \cos(A) + \exp(2A)} \right), \quad (5)$$

$$\epsilon'' = \left(\frac{ne^2 D}{\omega \epsilon_0 k T} \right) \left(1 + \frac{1 - 2 \exp(A) \sin(A) - \exp(2A)}{A(1 + 2 \exp(A) \cos(A) + \exp(2A))} \right), \quad (6)$$

где n – концентрация примесных ионов, D – коэффициент диффузии, $A = d_{cell} \sqrt{\omega/2D}$.

Результаты аппроксимации уравнениями (5), (6) представлены в виде сплошных линий (см. рис. 1). При низких частотах $\nu < 10$ мГц наблюдается отклонение аппроксимационных кривых от

экспериментальных данных. Данное отклонение может быть связано с включением низкочастотного релаксационного процесса, а именно релаксации двойных электрических слоёв.

В таблице представлены концентрация и коэффициенты диффузии примесных ионов, полученные по результатам аппроксимации. Анализ аппроксимированных параметров показывает, что с повышением температуры происходит увеличение концентрации примесных ионов, в то время как при увеличении напряжения их концентрация остаётся неизменной. Также наблюдается зависимость подвижности ионов от напряжения и температуры. При повышении напряжения в нематической фазе ($T = 298$ К) коэффициент диффузии увеличивается ввиду переориентации молекул жидкого кристалла, что связано с явлением анизотропии подвижности ионов в ЖК. С ростом температуры коэффициент диффузии увеличивается на порядок. Это связано с увеличением подвижности ионов из-за уменьшения кинематической вязкости жидкого кристалла в изотропной фазе ($T = 353$ К). Увеличение подвижности ионов в изотропной фазе при повышении напряжения может быть связано с нелинейным электрофоретическим движением примесных ионов в ЖК-ячейке [45].

Параметры пространственной поляризации

№	T , К	U , В	n , M^{-3}	D , M^2/c
1	298	0,005	$1,14 \cdot 10^{20}$	$1,10 \cdot 10^{-11}$
2	298	3	$1,18 \cdot 10^{20}$	$1,26 \cdot 10^{-11}$
3	353	0,005	$1,45 \cdot 10^{20}$	$2,52 \cdot 10^{-10}$
4	353	3	$1,46 \cdot 10^{20}$	$3,27 \cdot 10^{-10}$

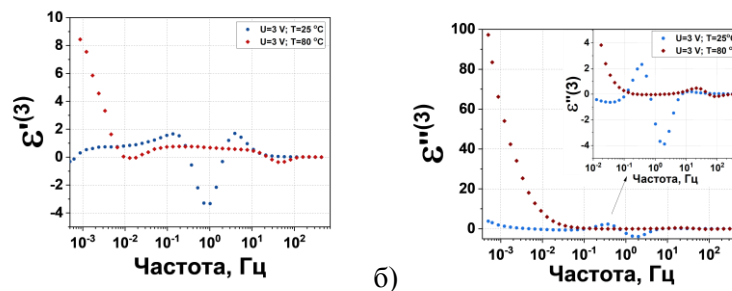


Рис. 2. а) действительная и б) мнимая части диэлектрической проницаемости третьей гармоники НЖК при температурах 298 К и 353 К

Экспериментальное исследование планарной нематической ЖК-ячейки в частотном диапазоне от 0,5 мГц до 600 Гц показало наличие третьей гармоники в спектрах комплексной диэлектрической проницаемости (рис. 2). Как видно из графиков, кривые действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости на третьей гармонике имеют несколько точек перегиба и могут принимать как положительные, так и отрицательные значения.

Как было показано в ранних исследованиях [46], процесс поляризации пространственного заряда примесных ионов является нелинейным ввиду насыщения дипольного момента и характеризуется наличием третьей гармоники диэлектрического отклика, что также подтверждается результатами эксперимента в частотном диапазоне от 0,1 до 600 Гц, что соответствует росту диэлектрической проницаемости на основной гармонике. Стоит отметить, что нелинейность данного процесса в нематической фазе является более выраженной по сравнению с изотропной фазой. Однако для второго более низкочастотного эффекта ($\nu < 0,1$ Гц) амплитуда третьей гармоники комплексной диэлектрической проницаемости на порядок больше в изотропной фазе. Это подтверждает тот факт, что нелинейность, возможно связанная с релаксацией двойного электрического слоя, преобладает в сравнении с релаксацией поляризации пространственного заряда.

Выводы

В данной статье исследованы механизмы возникновения нелинейности диэлектрического отклика в планарной ячейке, заполненной нематической жидкокристаллической смесью E7.

Анализ полученных данных выявил наличие двух релаксационных эффектов, проявляющих нелинейное поведение и возникновение третьей гармоники комплексной диэлектрической проницаемости в низкочастотной области спектра. Первый эффект связан с поляризацией пространственного заряда, возникающей из-за пространственного разделения примесных ионов в объеме жидкого кристалла во внешнем электрическом поле. Данный эффект проявляется в резком воз-

растании действительной части диэлектрической проницаемости при понижении частоты осциллирующего электрического напряжения от 100 до 0,1 Гц в нематической фазе и от 5 кГц до 5 Гц в изотропной фазе. Такой сдвиг в характерных частотах обусловлен уменьшением кинематической вязкости НЖК при возрастании температуры. Наличие второго эффекта, проявляющегося в дальнейшем повышении действительной части диэлектрической проницаемости, может быть объяснено образованием двойных электрических слоёв в ЖК-ячейке.

Литература

1. Yang, Y. A Review of Liquid Crystal Spatial Light Modulators: Devices and Applications / Y. Yang, A. Forbes, L. Cao // *Opto-Electronic Science*. – 2023. – Vol. 2, Iss. 8. – P. 230026.
2. High Fidelity Laser Beam Shaping using Liquid Crystal on Silicon Spatial Light Modulators as Diffractive Neural Networks / P. Buske, O. Hofmann, A. Bonnhoff *et al.* // *Optics Express*. – 2024. – Vol. 32, Iss. 5. – P. 7064.
3. Advanced Liquid Crystal Devices for Augmented Reality and Virtual Reality Displays: Principles and Applications / K. Yin, En. L. Hsiang, Ju. Zou *et al.* // *Light: Science and Applications*. – 2022. – Vol. 11, Iss. 1. – P. 1–22.
4. Mini-LED Backlight Technology Progress for Liquid Crystal Display / Z. Gao, H. Ning, R. Yao *et al.* // *Crystals*. – 2022. – Vol. 12, Iss. 3. – P. 313.
5. On Liquid Crystal Diffractive Optical Elements Utilizing Inhomogeneous Alignment / S. Valyukh, H. Arwin, V. Chigrinov, H. S. Kwok // *Optics Express*. – 2012. – Vol. 20, Iss. 14. – P. 15209–15221.
6. Дифракционные решетки с поверхностным микрорельефом из оптически анизотропного материала / В.В. Беляев, А.С. Соломатин, S. Кумар и др. // *Оптический журнал*. – 2021. – Т. 88, № 1. – С. 44–52.
7. Advanced Liquid Crystal-Based Switchable Optical Devices for Light Protection Applications: Principles and Strategies / R. Zhang, Zh. Zhang, J. Han *et al.* // *Light: Science and Applications*. – 2023. – Vol. 12, Iss. 1. – P. 11.
8. Photonic Devices with Multi-Domain Liquid Crystal Structures / A. Kudreyko, V. Chigrinov, K. Neyts *et al.* // *Crystals*. – 2024. – Vol. 14, Iss. 6. – P. 512.
9. Highly Sensitive and Transparent Flexible Temperature Sensor based on Nematic Liquid Crystals / K. Wu, J. Sun, L. Gao *et al.* // *Liquid Crystals*. – 2022. – Vol. 49, Iss. 3. – P. 372–379.
10. A Flexible Liquid Crystal Polymer MEMS Pressure Sensor Array for Fish-Like Underwater Sensing / A.G.P. Kottapalli, M. Asadnia, J. M. Miao *et al.* // *Smart Materials and Structures*. – 2012. – Vol. 21, Iss. 11. – P. 115030
11. Luan, Ch. Application and Technique of Liquid Crystal-Based Biosensors / Ch. Luan, H. Luan, D. Luo // *Micromachines*. – 2020. – Vol. 11, Iss. 2. – P. 176.
12. Polarization-Correction Device with Liquid Crystals for Quantum-Key-Distribution Satellite Systems / A. Jimenez-Girela, D. Merino-Pérez, A. Campos-Jara *et al.* // *Physical Review Applied*. – 2025. – Vol. 23, Iss. 6. – P. 064070.
13. Optical Quantum Computing using Liquid Crystal Devices/ H. Okada, T. Watanabe, S. Yokotsuka, A. Terazawa // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. – 2024. – Vol. 768, Iss. 7. – P. 59–90.
14. Ionic Liquid Crystals: Synthesis, Structure and Applications to I₂-free Solid-State Dye-Sensitized Solar Cells / W.S. Chi, H. Jeon, S.J. Kim *et al.* // *Macromolecular Research*. – 2013. – Vol. 21. – P. 315–320.
15. Garbovskiy, Y. Nano-Objects and Ions in Liquid Crystals: Ion Trapping Effect and Related Phenomena / Y. Garbovskiy, I. Glushchenko // *Crystals*. – 2015. – Vol. 5, Iss. 4. – P. 501–533.
16. Garbovskiy, Y. Time-Dependent Electrical Properties of Liquid Crystal Cells: Unravelling the Origin of Ion Generation / Y. Garbovskiy // *Liquid Crystals*. – 2018. – Vol. 45, Iss. 10. – P. 1540–1548.
17. Flicker-Free Fringe-Field Switching Liquid Crystal Display Operable at Extremely Low Frequencies for Power Saving / J. C. Choi, J. W. Lee, D. J. Lee *et al.* // *Advanced Engineering Materials*. – 2021. – Vol. 23, Iss. 9. – P. 2100174.
18. Image Sticking in Liquid Crystal Displays with Lateral Electric Fields / D. Xu, F. Peng, H. Chen *et al.* // *Journal of Applied Physics*. – 2014. – Vol. 116, Iss. 19. – P. 193102.

19. Garbovskiy Y. Conventional and Unconventional Ionic Phenomena in Tunable Soft Materials Made of Liquid Crystals and Nanoparticles / Y. Garbovskiy // *Nano Express*. – 2021. – Vol. 2, Iss. 1. – P. 012004.
20. Palomares, L.O. Optical Response of a Nematic Sample Submitted to a Periodic External Electric Field: Role of the Ionic Impurities / L.O. Palomares, J.A. Reyes, G. Barbero // *Physics Letters A*. – 2004. – Vol. 333, Iss. 1-2. – P. 157–163.
21. Dielectric Properties of Liquid Crystalline Composites Doped with Nano-Dimensional Fragments of Shungite Carbon / D.N. Chausov, A.D. Kurilov, A.V. Kazak *et al.* // *Liquid Crystals*. – 2019. – Vol. 46, Iss. 9. – P. 1345–1352.
22. Shcherbinin, D.P. Ionic Impurities in Nematic Liquid Crystal Doped with Quantum Dots CdSe/ZnS / D.P. Shcherbinin, E.A. Konshina // *Liquid Crystals*. – 2017. – Vol. 44, Iss. 4. – P. 648–655.
23. Naemura, S. Liquid-Crystal-Material Technologies for Advanced Display Applications / S. Naemura // *Journal of the Society for Information Display*. – 2000. – Vol. 8, Iss. 1. – P. 5–9.
24. Вклад примесных ионов в пространственно-временное распределение локального электрического поля в нематической жидкокристаллической ячейке / А. М. Гавриляк, М. В. Гавриляк, В.А. Боронин, Ф.В. Подгорнов // *Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика»*. – 2025. – Т. 17, № 2. – С. 69–81
25. Modeling Electrooptical Effects in Ferroelectric Liquid Crystals. 1. Basic Equations and Experimental Tests / S.P. Palto, L.M. Blinov, F.V. Podgornov, W. Haase // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. – 2004. – Vol. 410.
26. Mechanism of Electrooptic Switching Time Enhancement in Ferroelectric Liquid Crystal/Gold Nanoparticles Dispersion / F.V. Podgornov, W. Haase, M. Gavrilyak *et al.* // *Liquid Crystals*. – 2018. – Vol. 45, Iss. 11. – P. 1594–1602.
27. Direct Current Electric Conductivity of Ferroelectric Liquid Crystals–Gold Nanoparticles Dispersion Measured with Capacitive Current Technique / A.R. Karaawi, M.V. Gavrilyak, V.A. Boronin *et al.* // *Liquid Crystals*. – 2020. – Vol. 47, Iss. 10. – P. 1507–1515.
28. Molecular Reorientation Dynamics due to Direct Current Voltage-Induced Ion Redistribution in Undoped Nematic Planar Cell / P. Pagliusi, B. Zappone, G. Cipparrone, G. Barbero // *Journal of applied physics*. – 2004. – Vol. 96, Iss. 1. – P. 218–223.
29. Konshina, E.A. Study of Dynamic Light Scattering in Nematic Liquid Crystal and Its Optical, Electrical and Switching Characteristics / E.A. Konshina, D.P. Shcherbinin // *Liquid Crystals*. – 2018. – Vol. 45, Iss. 2. – P. 292–302.
30. Optical and Electrical Characterization of a Gold Nanoparticle Dispersion in a Chiral Liquid Crystal Matrix / M. Infusino, A. De Luca, F. Ciuchi *et al.* // *Journal of Materials Science*. – 2014. – Vol. 49, Iss. 4. – P. 1805–1811.
31. Transient and Steady Electric Currents Through a Liquid Crystal Cell / P.P. Korniychuk, A.M. Gabovich, A.I. Voitenko *et al.* // *Liquid Crystals*. – 2010. – Vol. 37, Iss. 9. – P. 1171–1181.
32. Рыбаков, Д.О. Двойные электрические слои и их влияние на низкочастотную диэлектрическую проницаемость 4-Н-Пентил-4'-Цианофенила (5СВ) / Д.О. Рыбаков, В.В. Беляев // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. – 2018. – Т. 18, № 4. – С. 40–47.
33. Беляев, Б.А. Влияние ионных примесей на импедансные спектры жидких кристаллов / Б.А. Беляев, Н.А. Дрокин, А.Н. Масленников // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. – 2012. – № 4(42). – С. 39–46.
34. Belyaev, B.A. Impedance Spectroscopy Investigation of Electrophysical Characteristics of the Electrode-Liquid Crystal Interface / B.A. Belyaev, N.A. Drokin // *Physics of the Solid State*. – 2015. – Vol. 57, Iss. 1. – P. 181–187.
35. Sawada, A. Dielectric Process of Space-Charge Polarization for an Electrolytic Cell with Blocking Electrodes / A. Sawada // *Journal of Chemical Physics*. – 2008. – Vol. 129, Iss. 6. – P. 064701.
36. Sawada, A. Electrode Process of Mobile Ions in Generating Space-Charge Polarization / A. Sawada, T. Manaka // *Physical Review E*. – 2024. – Vol. 109, Iss. 3. – P. 034802.
37. Sawada, A. Modeling of Electrode Polarization for Electrolytic Cells with a Limited Ionic Adsorption / A. Sawada // *Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. – 2013. – Vol. 88, Iss. 3. – P. 032406.

38. Alexe-Ionescu, A.L. Complex Dielectric Constant of a Nematic Liquid Crystal Containing Two Types of Ions: Limit of Validity of the Superposition Principle / A.L. Alexe-Ionescu, G. Barbero, I. Lelidis // *The Journal of Physical Chemistry B*. – 2009. – Vol. 113, Iss. 44. – P. 14747–14753.

39. Iwamoto, M. The Dielectric Dispersion of Insulating Films With Long-Range Movements of Charge Carriers / M. Iwamoto // *Journal of applied physics*. – 1995. – Vol. 77, Iss. 10. – P. 5314–5321.

40. Non Linear Dielectric Spectroscopy: A Method to Determine Physical Parameters of Ferroelectric Liquid Crystals / J.M. Leblond, R. Douali, C. Legrand, R. Dabrowski // *The European Physical Journal. Applied Physics*. – 2006. – Vol. 36, Iss. 2. – P. 157–163.

41. Nonlinear Dielectric Spectroscopy of МНРОВС / K. Tanaka, M. Ichikawa, Y Kimura // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. – 2007. – Vol. 477, Iss. 1. – P. 195–204.

42. Derfel, G. Numerical Study of Ionic Contribution to Susceptibility and Impedance of Dielectric Liquid Layer / G. Derfel, G. Barbero // *Journal of Molecular Liquids*. – 2009. – Vol. 150, Iss. 1-3. – P. 43–50.

43. Richert, R. Nonlinear Dielectric Effects in Liquids: A Guided Tour / R. Richert // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2017. – Vol. 29, Iss. 36. – P. 363001.

44. Sawada A. Novel Characterization Method of Ions in Liquid Crystal Materials by Complex Dielectric Constant Measurements / A. Sawada, K. Tarumi, S. Naemura // *Japanese journal of applied physics*. – 1999. – Vol. 38, Iss. 3R. – P. 1423.

45. Podgornov, F.V. Dynamics of Nonlinear Electrophoretic Motion of Dielectric Microparticles in Nematic Liquid Crystal / F.V. Podgornov, A.V. Ryzhkova, W. Haase // *Journal of Molecular Liquids*. – 2018. – Vol. 267. – P. 345–352.

46. Вклад поляризации пространственного заряда в нелинейный спектр диэлектрической проницаемости нематического жидкого кристалла: компьютерное моделирование / М.В. Гавриляк, А.М. Гавриляк, В.А. Боронин, Ф.В. Подгорнов // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. – 2025. – Т. 25, № 1. – С. 62–71.

Поступила в редакцию 5 июля 2025 г.

Сведения об авторах

Подгорнов Федор Валерьевич – доцент кафедры физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-9926-4799>, e-mail: fedorpod@yahoo.de.

Гавриляк Алина Маратовна – аспирант, ассистент, кафедра оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9179-6945>, e-mail: gavriliakam@susu.ru.

Гавриляк Максим Витальевич – ассистент, кафедра оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация; младший научный сотрудник, Лаборатория нелинейной оптики, Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-8299-9695>, e-mail: gavriliakmv@susu.ru.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2025, vol. 17, no. 3, pp. 61–70*

DOI: 10.14529/mmph250307

THE ROLE OF IMPURITY IONS IN NONLINEAR DIELECTRIC RESPONSE FORMATION OF NEMATIC LIQUID CRYSTAL CELL

F.V. Podgornov¹, A.M. Gavrilyak¹, M.V. Gavrilyak^{1,2}

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

² *Institute of Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation*

E-mail: gavrilyak.maksim@yandex.ru

Abstract. The study considers the nonlinear dielectric response of a nematic liquid crystal (NLC). Odd harmonics are found in the dielectric response in the low-frequency region of the spectrum from 0.5

mHz to 600 Hz. The transporting of impurity ions causes two relaxation effects: space charge polarization and the formation of electric double layers.

Keywords: nematic liquid crystals; impurity ions; space charge polarization; double electric layers; nonlinear dielectric spectroscopy.

References

1. Yang Y., Forbes A., Cao L. A Review of Liquid Crystal Spatial Light Modulators: Devices and Applications. *Opto-Electron. Sci.*, 2023, Vol. 2, no. 8, p. 230026. DOI: 10.29026/oes.2023.230026.
2. Buske P., Hofmann O., Bonnhoff A., Stollenwerk J., Holly C. High Fidelity Laser Beam Shaping Using Liquid Crystal on Silicon Spatial Light Modulators as Diffractive Neural Networks. *Opt. Express*, 2024, Vol. 32, no. 5, p. 7064. DOI: 10.1364/OE.507630.
3. Yin K., Hsiang E.-L., Zou J., Li Y., Yang Z., Yang Q., Lai P., Lin C., Wu S. Advanced Liquid Crystal Devices for Augmented Reality and Virtual Reality Displays: Principles and Applications. *Light Sci. Appl.*, 2022, Vol. 11, no. 1, pp. 1–22. DOI: 10.1038/s41377-022-00851-3.
4. Gao Z., Ning H., Yao R., Xu W., Zou W., Guo C., Luo D., Xu H., Xiao J. Mini-LED Backlight Technology Progress for Liquid Crystal Display. *Crystals*, 2022, Vol. 12, no. 3, p. 313. DOI: 10.3390/cryst12030313.
5. Valyukh S., Arwin H., Chigrinov V., Kwok H.S. On Liquid Crystal Diffractive Optical Elements Utilizing Inhomogeneous Alignment. *Opt. Express*, 2012, Vol. 20, no. 14, pp. 15209–15221. DOI: 10.1364/OE.20.015209.
6. Belyaev V.V., Solomatin A.S., Kumar S., Chausov D.N., Belyaev A.A., Margaryan A.L., Akopiyan N.G. Дифракционные решетки с поверхностью микровыступов из оптически анизотропного материала (Diffraction Gratings Made from Optically Anisotropic Material with Surface Microrelief). *Opticheskii Zhurnal*, 2021, Vol. 88, no 1, pp. 44–52. (in Russ.). DOI: 10.17586/1023-5086-2021-88-01-44-52
7. Zhang R., Zhang Zh., Han J., Yang L., Li J., Song Z., Wang T., Zhu J. Advanced Liquid Crystal-Based Switchable Optical Devices for Light Protection Applications: Principles and Strategies. *Light Sci. Appl.*, 2023, Vol. 12, no. 1, p. 11. DOI: 10.1038/s41377-022-01032-y.
8. Kudreyko A., Chigrinov V., Neyts K., Chausov D., Perestoronina A. Photonic Devices with Multi-Domain Liquid Crystal Structures. *Crystals*, 2024, Vol. 14, no. 6, p. 512. DOI: 10.3390/cryst14060512.
9. Wu K., Sun J., Gao L., Xing H., Cai M., Zhao T., Yang C., Ye W., Kong X. Highly Sensitive and Transparent Flexible Temperature Sensor Based on Nematic Liquid Crystals. *Liq. Cryst.*, 2022, Vol. 49, no. 3, pp. 372–379. DOI: 10.1080/02678292.2021.1970834.
10. Kottapalli A.G.P., Asadnia M., Miao J.M., Barbastathis G., Triantafyllou M.S. A Flexible Liquid Crystal Polymer MEMS Pressure Sensor Array for Fish-like Underwater Sensing. *Smart Mater. Struct.*, 2012, Vol. 21, no. 11, p. 115030. DOI: 10.1088/0964-1726/21/11/115030.
11. Luan Ch., Luan H., Luo D. Application and Technique of Liquid Crystal-Based Biosensors. *Micromachines*, 2020, Vol. 11, no. 2, p. 176. DOI: 10.3390/mi11020176.
12. Jimenez-Girela A., Merino-Pérez D., Campos-Jara A., Negrín J.S., Parejo P.G., Álvarez-Herrero A. Polarization-Correction Device with Liquid Crystals for Quantum-Key-Distribution Satellite Systems. *Phys. Rev. Appl.*, 2025, Vol. 23, no. 6, p. 064070. DOI: 10.1103/8plr-m6n8.
13. Okada H., Watanabe T., Yokotsuka S., Terazawa A. Optical Quantum Computing Using Liquid Crystal Devices. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 2024, Vol. 768, no. 7, pp. 59–90. DOI: 10.1080/15421406.2024.2342610.
14. Chi W. S., Jeon H., Kim S. J., Kim D. J., Kim J. H. Ionic Liquid Crystals: Synthesis, Structure and Applications to I₂-Free Solid-State Dye-Sensitized Solar Cells. *Macromol. Res.*, 2013, Vol. 21, pp. 315–320. DOI: 10.1007/s13233-013-1097-3.
15. Garbovskiy Y., Glushchenko I. Nano-Objects and Ions in Liquid Crystals: Ion Trapping Effect and Related Phenomena. *Crystals*, 2015, Vol. 5, no. 4, pp. 501–533. DOI: 10.3390/cryst5040501.
16. Garbovskiy Y. Time-dependent Electrical Properties of Liquid Crystal Cells: Unravelling the Origin of Ion Generation. *Liq. Cryst.*, 2018, Vol. 45, no. 10, pp. 1540–1548. DOI: 10.1080/02678292.2018.1455228.

17. Choi J.C., Lee J.W., Lee D.J., Park Y., Kim H.R. Flicker-Free Fringe-Field Switching Liquid Crystal Display Operable at Extremely Low Frequencies for Power Saving. *Adv. Eng. Mater.*, 2021, Vol. 23, no. 9, p. 2100174. DOI: 10.1002/adem.202100174.
18. Xu D., Peng F., Chen H., Yuan J., Wu S.T., Li M.C., Lee S.L., Tsai W.C. Image Sticking in Liquid Crystal Displays with Lateral Electric Fields. *J. Appl. Phys.*, 2014, Vol. 116, no. 19, p. 193102. DOI: 10.1063/1.4902083.
19. Garbovskiy Y. Conventional and Unconventional Ionic Phenomena in Tunable Soft Materials Made of Liquid Crystals and Nanoparticles. *Nano Express*, 2021, Vol. 2, no. 1, p. 012004. DOI: 10.1088/2632-959X/abe652.
20. Palomares L.O., Reyes J.A., Barbero G. Optical Response of a Nematic Sample Submitted to a Periodic External Electric Field: Role of the Ionic Impurities. *Phys. Lett. A*, 2004, Vol. 333, no. 1-2, pp. 157–163. DOI: 10.1016/j.physleta.2004.10.047.
21. Chausov D.N., Kurilov A.D., Kazak A.V., Smirnova A.I., Velichko V.K., Gevorkyan E.V., Rozhkova N.N., Usol'tseva N.V. Dielectric Properties of Liquid Crystalline Composites Doped with Nano-Dimensional Fragments of Shungite Carbon. *Liq. Cryst.*, 2019, Vol. 46, no. 9, pp. 1345–1352. DOI: 10.1080/02678292.2019.1566503.
22. Shcherbinin D. P., Konshina E. A. Ionic Impurities in Nematic Liquid Crystal Doped with Quantum Dots CdSe/ZnS. *Liq. Cryst.*, 2017, Vol. 44, no. 4, pp. 648–655. DOI: 10.1080/02678292.2016.1227483.
23. Naemura S. Liquid-Crystal-Material Technologies for Advanced Display Applications. *J. Soc. Inf. Disp.*, 2000, Vol. 8, no. 1, pp. 5–9. DOI: 10.1889/1.1828702.
24. Gavrilyak A.M., Gavrilyak M.V., Boronin V.A., Podgornov F.V. Contribution of Impurity Ions to Spatial-Temporal Distribution of Local Electric Field in Nematic Liquid Crystal Cell. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Mathematics. Mechanics. Physics"*, 2025, Vol. 17 no. 2, pp. 69–81. (in Russ.). DOI: 10.14529/mmph250208.
25. Palto S.P., Blinov L.M., Podgornov F.V., Haase W. Modeling Electrooptical Effects in Ferroelectric Liquid Crystals. 1. Basic Equations and Experimental Tests. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 2004, Vol. 410, no. 1, pp. 95–104. DOI: 10.1080/15421400490436133.
26. Podgornov F.V., Haase W., Gavrilyak M., Boronin V., Haase W. Mechanism of Electrooptic Switching Time Enhancement in Ferroelectric Liquid Crystal/Gold Nanoparticles Dispersion. *Liq. Cryst.*, 2018, Vol. 45, no. 11, pp. 1594–1602. DOI: 10.1080/02678292.2018.1458256.
27. Karaawi A.R., Gavrilyak M.V., Boronin V.A., Gavrilyak A.M., Kazachonok J.V., Podgornov F.V. Direct Current Electric Conductivity of Ferroelectric Liquid Crystals–Gold Nanoparticles Dispersion Measured with Capacitive Current Technique. *Liq. Cryst.*, 2020, Vol. 47, no. 10, pp. 1507–1515. DOI: 10.1080/02678292.2020.1740951.
28. Pagliusi P., Zappone B., Cipparrone G., Barbero G. Molecular Reorientation Dynamics due to Direct Current Voltage-Induced Ion Redistribution in Undoped Nematic Planar Cell. *J. Appl. Phys.*, 2004, Vol. 96, no. 1, pp. 218–223. DOI: 10.1063/1.1756693.
29. Konshina E.A., Shcherbinin D.P. Study of Dynamic Light Scattering in Nematic Liquid Crystal and Its Optical, Electrical and Switching Characteristics. *Liq. Cryst.*, 2018, Vol. 45, no. 2, pp. 292–302. DOI: 10.1080/02678292.2017.1323353.
30. Infusino M., De Luca A., Ciuchi F., Ionescu A., Scaramuzza N., Strangi G. Optical and Electrical Characterization of a Gold Nanoparticle Dispersion in a Chiral Liquid Crystal Matrix. *J. Mater. Sci.*, 2014, Vol. 49, no. 4, pp. 1805–1811. DOI: 10.1007/s10853-013-7868-6.
31. Korniychuk P.P., Gabovich A.M., Singer K., Voitenko A.I., Reznikov Y.A. Transient and Steady Electric Currents through a Liquid Crystal Cell. *Liq. Cryst.*, 2010, Vol. 37, no. 9, pp. 1171–1181. DOI: 10.1080/02678292.2010.490622.
32. Rybakov D.O., Belyaev V.V. Dvoynye elektricheskie sloi i ikh vliyanie na nizkochastotnyuyu di`elektricheskuyu pronitsaemost' 4-n-pentil-4'-cianobifenila (5CB) (Electrical Double Layers and their Effect on the Low-Frequency Dielectric Permittivity of 4-n-Pentyl-4'-Cyanobiphenyl (5CB)). *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2018, Vol. 18, no. 4, pp. 40–47. (in Russ.). DOI: 10.18083/LCAppl.2018.4.40
33. Belyaev B.A., Drokin N.A., Maslennikov A.N. Vliyanie ionnykh primesey na impedansnye spektry zhidkikh kristallov (Influence of Ionic Impurities on Impedance Spectra of Liquid Crystals). *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2012, no. 4(42), pp. 39–46. (in Russ.).

34. Belyaev B.A., Drokin N.A. Impedance spectroscopy investigation of electrophysical characteristics of the electrode-liquid crystal interface. *Phys. Solid State*, 2015, Vol. 57, no. 1, pp. 181–187. DOI: 10.1134/S1063783415010060.
35. Sawada A. Dielectric Process of Space-Charge Polarization for an Electrolytic Cell with Blocking Electrodes. *J. Chem. Phys.*, 2008, Vol. 129, no. 6, p. 064701. DOI: 10.1063/1.2965877.
36. Sawada A., Manaka T. Electrode Process of Mobile Ions in Generating Space-Charge Polarization. *Phys. Rev. E*, 2024, Vol. 109, no. 3, p. 034802. DOI: 10.1103/PhysRevE.109.034802.
37. Sawada A. Modeling of Electrode Polarization for Electrolytic Cells with a Limited Ionic Adsorption. *Phys. Rev. E*, 2013, Vol. 88, no. 3, p. 032406. DOI: 10.1103/PhysRevE.88.032406.
38. Alexe-Ionescu A. L., Barbero G., Lelidis I. Complex Dielectric Constant of a Nematic Liquid Crystal Containing Two Types of Ions: Limit of Validity of the Superposition Principle. *J. Phys. Chem. B*, 2009, Vol. 113, no. 44, pp. 14747–14753. DOI: 10.1021/jp906479w.
39. Iwamoto M. The Dielectric Dispersion of Insulating Films with Long-Range Movements of Charge Carriers. *J. Appl. Phys.*, 1995, Vol. 77, no. 10, pp. 5314–5321. DOI: 10.1063/1.359287.
40. Leblond J.M., Douali R., Legrand C., Dabrowski R. Nonlinear Dielectric Spectroscopy: A Method to Determine Physical Parameters of Ferroelectric Liquid Crystals. *Eur. Phys. J. Appl. Phys.*, 2006, Vol. 36, no. 2, pp. 157–163. DOI: 10.1051/epjap:2006104.
41. Tanaka K., Ichikawa M., Kimura Y. Nonlinear Dielectric Spectroscopy of MHPOBC. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 2007, Vol. 477, no. 1, pp. 195–204. DOI: 10.1080/15421400701684020.
42. Derfel G., Barbero G. Numerical Study of Ionic Contribution to Susceptibility and Impedance of Dielectric Liquid Layer. *J. Mol. Liq.*, 2009, Vol. 150, no. 1-3, pp. 43–50. DOI: 10.1016/j.molliq.2009.09.011.
43. Richert R. Nonlinear Dielectric Effects in Liquids: A Guided Tour. *J. Phys. Condens. Matter*, 2017, Vol. 29, no. 36, p. 363001. DOI: 10.1088/1361-648X/aa7cc4.
44. Sawada A., Tarumi K., Naemura S. Novel Characterization Method of Ions in Liquid Crystal Materials by Complex Dielectric Constant. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1999, Vol. 38, no. 3R, p. 1423. DOI: 10.1143/JJAP.38.1423.
45. Podgornov F.V., Ryzhkova A.V., Haase W. Dynamics of Nonlinear Electrophoretic Motion of Dielectric Microparticles in Nematic Liquid Crystal. *J. Mol. Liq.*, 2018, Vol. 267, pp. 345–352. DOI: 10.1016/j.molliq.2018.02.053.
46. Gavriilyak M.V., Gavriilyak A.M., Boronin V.A., Podgornov F.V. Vklad polyarizatsii prostranstvennogo zaryada v nelineynyy spektr dielektricheskoy pronitsayemosti nematicheskogo zhidkogo kristalla: kompyuternoe modelirovanie (Contribution of Space Charge Polarization to Nonlinear Permittivity Spectrum of Nematic Liquid Crystal: Computer Simulation). *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2025, Vol. 25, no. 1, pp. 62–71. (in Russ.) DOI: 10.18083/LCAppl.2025.1.62.

Received July 5, 2025

Information about the authors

Podgornov Fedor Valerievich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Physics of Nanoscale Systems Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-9926-4799>, e-mail: fedorpod@yahoo.de.

Gavriilyak Alina Maratovna is Post-graduate Student, Assistant, Department of Optoinformatics, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9179-6945>, e-mail: gavriliakam@susu.ru.

Gavriilyak Maksim Vitalievich is Assistant, Department of Optoinformatics, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation; Junior Research Fellow, Laboratory of Nonlinear Optics, Institute of Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-8299-9695>, e-mail: gavriliakmv@susu.ru.

ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВОЙ СТАБИЛЬНОСТИ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$)

А.А. Раев, К.Р. Ерагер, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: raiev.a@mail.ru

Аннотация. Исследованы химическая стабильность, структурные, магнитные и электронные свойства сплавов Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$) с использованием методов теории функционала плотности. Установлено, что все соединения термодинамически стабильны, причем их устойчивость коррелирует с концентрацией валентных электронов (e/a) и уменьшается для более тяжелых элементов. Магнитные свойства зависят от состава и степени тетрагональности: в кубической фазе рост e/a снижает намагниченность, тогда как деформация решетки ее усиливает. Полуметаллическое поведение с 100 % спиновой поляризацией обнаружено при $e/a = 4$ и 4,25, а для Ti_2VSb ($e/a = 4,5$) выявлено полупроводниковое состояние с узкой щелью (~0,1 эВ). Результаты согласуются с расчетами на основе функционала PBE и демонстрируют преимущества SCAN-функционала для точного описания сложных сплавов.

Ключевые слова: сплавы Ti_2VZ ; полуметаллическое поведение; спиновая поляризация; тетрагональные искажения; электронная структура; магнитные свойства; функционал SCAN.

Введение

В последние годы полуметаллические (ПМ) ферромагнитные (ФМ) соединения привлекают все большее внимание из-за их большого потенциала в области применения устройств спинтроники [1, 2]. Концепция ПМ ферромагнетиков была первоначально предложена де Гроотом и др. на основе расчетов полусплава Гейслера NiMnSb в 1983 году, который вел себя как металл для одного направления спина и как полупроводник или изолятор для противоположного направления спина [3]. ПМ поведение приводит к 100 % спиновой поляризации в одном из спиновых каналах на уровне Ферми E_F . На сегодняшний день многочисленное семейство сплавов Гейслера рассматривается в качестве перспективных (ПМ) материалов. Однако большинство из них содержат дорогостоящие элементы, либо сплавы, предложенные теоретически, являются неустойчивыми. В связи с этим поиск устойчивых ПМ сплавов Гейслера, состоящих из распространенных элементов, представляется актуальной задачей для современного материаловедения [4].

Например, в работе S. Galeghirian и др. [5] представлены исследования сплавов Гейслера Ti_2VZ ($Z = Al, Ga$ и In). В кубической структуре типа $L2_1$ исследуемые составы показали себя как обычные ферримагнетики, однако в инверсионной структуре XA каждое из соединений демонстрирует ПМ-характеристики с соответствующей шириной запрещенной зоны 0,52, 0,51 и 0,59 эВ. В работе Santao Qi и др. [6] рассмотрены сплавы Гейслера Ti_2VZ ($Z = Si, Ge, Sn$). Результаты расчетов показали, что сплавы Ti_2VSi и Ti_2VGe относятся к ПМ-соединениям с идеальной 100 % спиновой поляризацией на уровне E_F , в то время как сплав Ti_2VSn является ферримагнетиком. Кроме того, полностью компенсированный ферримагнетизм и полупроводимость довольно устойчивы в широком диапазоне сжатия и расширения решетки.

В представленной работе мы рассмотрели широкий спектр соединений на основе Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$) с целью установления взаимосвязи между электронными, структурными, магнитными свойствами и концентрацией валентных электронов.

Детали и методология вычислений

Расчеты свойств основного состояния сплавов Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$) выполнены в рамках теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP [7, 8], с использованием приближения обменно-корреляционного функционала SCAN [9] (мета-

обобщенное градиентное приближение). Исследуемые кристаллические структуры были сгенерированы на базе 16-атомной элементарной кубической ячейки (пр. группа № 216, F43m) с ФМ-упорядочением магнитных моментов (рис. 1) [10]. Общепринятое название данной структуры – инверсионная структура ХА гейслеровского типа, прототип Hg_2CuTi . Структура ХА примечательна тем, что за счет расположения атомов в неэквивалентных позициях возможен полуметаллический характер зонной структуры на уровне E_F в отличие от регулярной гейслеровской структуры L21, прототип Cu_2MnAl . Кроме того, согласно эмпирическому правилу сплавы Гейслера X_2YZ могут кристаллизоваться в структуру ХА при условии, если атомный номер или валентность Y элемента выше, чем у X из того же периода [10]. Для соединений Ti_2VZ выполняется рассмотренное условие, кроме того, разница между энергиями структур ХА и $L2_1$ весьма малая.

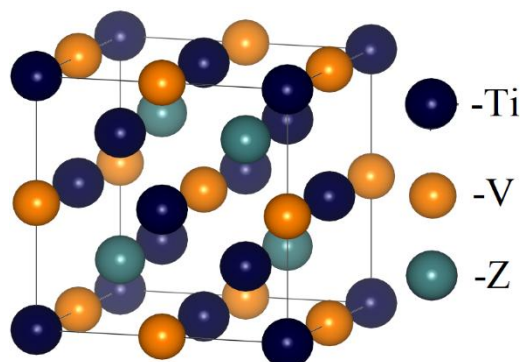


Рис. 1. Кристаллическая структура типа ХА соединений Ti_2VZ

Геометрическая оптимизация проводилась в рамках ионной релаксации с изменением позиций атомов, формы и объема ячейки. Интегрирование по k точкам зоны Бриллюэна проводилось на Γ -центрированной k -сетке ($7 \times 7 \times 7$) с плотностью ~ 5500 точек на атом обратной решетки. Энергия обрезания плоских волн составляла 470 эВ, а параметр сходимости составлял 10^{-7} эВ/атом.

Значения спиновой поляризации в расчетах плотности электронных состояний оценивались по формуле

$$P(\%) = \frac{p_{\uparrow}(E_F) - p_{\downarrow}(E_F)}{p_{\uparrow}(E_F) + p_{\downarrow}(E_F)} \times 100, \quad (1)$$

где $p_{\uparrow}, p_{\downarrow}$ – плотность электронных состояний на уровне E_F со спином вверх и вниз соответственно.

Энергия формирования сплава рассчитывалась по формуле

$$E_f = E_{tot} - \sum_i E_i, \quad (2)$$

где E_{tot} – полная энергия сплава, приходящаяся на один атом, а E_i – энергии атомов чистых элементов, которые рассчитывались с использованием функционала SCAN с учетом равновесных структур, взятых из базы данных электронного ресурса Materials project [11].

Результаты вычислений и их обсуждение

Для оценки химической стабильности сплавов Ti_2VZ ($Z = \text{Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn}$), т. е. их устойчивости к сегрегации на составляющие элементы, была рассчитана энергия формирования E_f структуры ХА с использованием (2). Если E_f принимает отрицательное значение, сплав считается стабильным; в противном случае происходит его распад на составляющие элементы. На рис. 2 приведена зависимость E_f от Z элемента.

Значения E_f для всех рассмотренных соединений расположены в отрицательном диапазоне, что говорит об их химической стабильности по отношению к распаду на составляющие элементы. Можно сделать вывод, что с ростом концентрации валентных электронов e/a , приходящихся на атом, соединения Ti_2VZ становятся более стабильными, тогда как увеличение периода Z элемента при фиксированном значении e/a способствует понижению химической устойчивости со-

единения. Так, элементы III группы (Al, Ga, In) формируют соединения с самой наименьшей энергией формирования; элементы IV группы (Si, Ge) находятся в отрезке промежуточной стабильности; а элементы V группы (P, As и Sb) приводят к наибольшей стабильности кубической фазы.

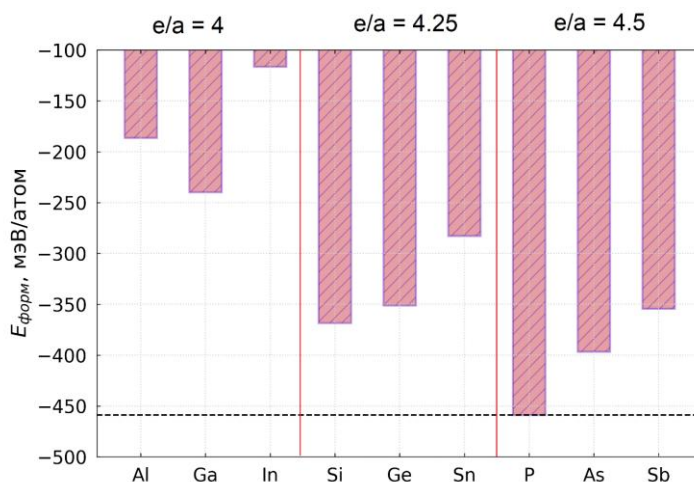


Рис. 2. Энергия формирования сплавов Ti_2VZ с кубической структурой ХА

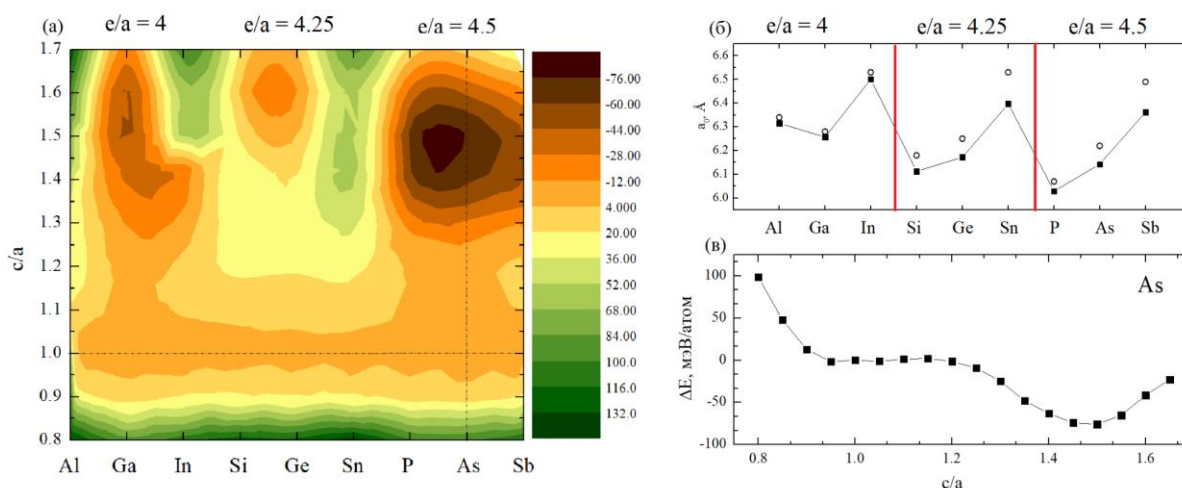


Рис. 3. (а) Контур изменения энергии в мэВ/атом, нормированный на кубическую фазу, для сплавов Ti_2VZ в зависимости от степени ее тетрагонального искажения c/a ; (б) постоянная ХА решётки a_0 вдоль линии $c/a = 1$; открытыми символами показаны значения a_0 , полученные с помощью функционала PBE в [5, 6, 12]; (в) зависимость $\Delta E(c/a)$ для Ti_2VAs

С целью проверки устойчивости кубической фазы ХА к возможным искажениям проведены расчеты изменения энергии (ΔE) соединений в зависимости от степени ее тетрагонального искажения (c/a). На рис. 3, а изображена контурная карта распределения ΔE в зависимости от c/a и содержания Z элемента в Ti_2VZ . Значение ΔE рассчитано относительно энергии структуры ХА ($c/a = 1$). Из рис. 3 видно, что увеличение e/a , приводит к возникновению глобального минимума энергии при степени тетрагонального искажения c/a в интервале от 1,4 до 1,6. Данная особенность проявляется наиболее ярко для Ti_2VP , Ti_2VAs и Ti_2VSb . Это объясняется тем, что данные химические элементы находятся в V группе периодической системы и имеют больше свободных электронов на внешней орбитали, способствующих нестигунгу поверхности E_F на границах зоны Бриллюэна.

На рис. 3, б и в показаны срезы контурной карты вдоль направлений, отмеченных пунктирной линией на рис. 3, а. Можно видеть, что равновесный параметр кубической решетки a_0 демонстрирует монотонно повторяющееся поведение: при фиксированной концентрации e/a увеличение порядкового номера Z элемента способствует увеличению a_0 за счет увеличения атомного

радиуса Z элемента. Стоит отметить хорошее согласие значений a_0 , полученных в данной работе с помощью функционала SCAN, и значений a_0 , вычисленных с помощью функционала PBE [5, 6, 12], в особенности для сплавов с $e/a = 4$.

На рис. 4 изображена контурная карта распределения полного магнитного момента в зависимости от c/a и содержания Z элемента в Ti_2VZ , а также срезы контурной карты вдоль направлений, отмеченных пунктирной линией. Широкий диапазон значений намагниченности от $-0,2$ до $4 \mu_B/\text{ф.ед.}$ указывает на чувствительность магнитного упорядочения и магнитных свойств к тетрагональной деформации и легированию Z элемента.

С одной стороны, для каждого из соединений тетрагональное искажение (сжатие, растяжение) способствует увеличению магнитного момента за счет изменения расстояний ближайшего окружения атомов Ti и V . С другой стороны, в случае кубической фазы ($c/a = 1$) увеличение концентрации e/a приводит к снижению и, в конечном счете, подавлению намагниченности (рис. 4, б). Таким образом, для группы соединений $Ti_2V(\text{Al, Ga, In})$ характерно среднее значение намагниченности $m \approx 1,85 \mu_B/\text{ф.ед.}$, для $Ti_2V(\text{Si, Ge, Sn}) - 0,83 \mu_B/\text{ф.ед.}$ и для $Ti_2V(\text{P, As, Sb}) - 0 \mu_B/\text{ф.ед.}$

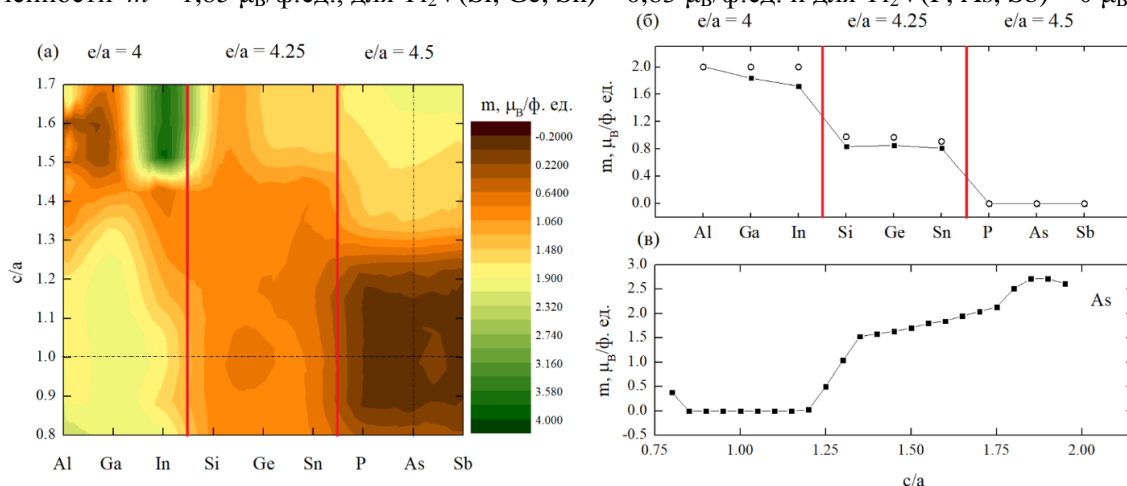


Рис. 4. а) контур полного магнитного момента для сплавов Ti_2VZ в зависимости от степени тетрагонального искажения c/a кубической структуры ХА; б) Намагниченность ХА решётки вдоль линии $c/a = 1$; открытыми символами показаны значения m , полученные с помощью функционала PBE в [5, 6, 12]; в) зависимость $m(c/a)$ для Ti_2VAs

Схожие значения m были получены ранее в работах [5, 6, 12], где использовали в расчетах функционал PBE. Интересно отметить, что для сплавов $Ti_2V(\text{P, As, Sb})$ деформация кубической структуры сопровождается сменой магнитного упорядочения и скачкообразным изменением намагниченности с 0 до $2 \mu_B/\text{ф.ед.}$ для фаз со степенью тетрагональности $c/a = 1$ и $1,5$ соответственно.

В принципе, значения m для ХА структуры согласуются со значениями, полученными с помощью правила Слейтера–Полинга: добавление элемента в металлический сплав приводит к уменьшению намагниченности насыщения сплава m на величину, пропорциональную количеству валентных электронов N_{ev} , $m = N_{ev} - 18$. Таким образом, для $Ti_2V(\text{Al, Ga, In})$ N_{ev} и m составляют 16 и $-2 \mu_B/\text{ф.ед.}$, для $Ti_2V(\text{Si, Ge, Sn}) - 17$ и $-1 \mu_B/\text{ф.ед.}$ и $Ti_2V(\text{P, As, Sb}) - 18$ и $0 \mu_B/\text{ф.ед.}$ соответственно. Отрицательный знак m косвенно указывает на наличие энергетической щели в «спин вверх» канале.

Для проверки возможной полуметалличности исследуемых соединений дополнительно проведен анализ плотностей электронных состояний (ПЭС) и зонной структуры в «спин вверх»- и «спин вниз»-каналах. Отметим следующие особенности. В соединениях с концентрацией $e/a = 4$ и $4,25$ зонная структура «спин вниз»-канала демонстрирует металлическое поведение ввиду множественных пересечений уровня E_F . Напротив, для «спин вниз» канала характерно наличие энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости. При этом для соединений $Ti_2V(\text{Al, Ga})$ ($e/a = 4$) и $Ti_2V(\text{Si, Ge})$ ($e/a = 4,25$) уровень E_F расположен достаточно близко к валентной зоне, тогда как для $Ti_2V\text{In}$ ($e/a = 4$) и $Ti_2V\text{Sn}$ ($e/a = 4,25$) уровень E_F находится практически посреди запрещенной зоны. Последующее увеличение концентрации e/a до $4,5$ приводит к металлическому и полупроводниковому характерам зонной структуры для $Ti_2V(\text{P, As})$ и $Ti_2V\text{Sb}$ соответственно. Расчеты показывают, что увеличение порядкового номера Z элемента при фикс-

сированном соотношении $e/a = 4,5$ способствует раскрытию запрещенной зоны ($\Delta E_{gap} \approx 0,1$ эВ) на E_F .

Для примера, на рис. 5 приведены зонный спектр и ПЭС для «спин вверх» канала соединения Ti_2VSn . Ветви зон демонстрируют сильную дисперсию вдоль выбранных путей в k -пространстве. В данном случае максимальное значение энергии потолка валентной зоны (вдоль пути К–Г) и дна зоны проводимости (точка X) составляют $-0,08$ и $0,17$ эВ соответственно, а их разница образует широкую щель в $0,26$ эВ на уровне E_F . Пики ПЭС ниже E_F соответствуют гибридным d -состояниям Ti и V, тогда как пики ПЭС в зоне проводимости отвечают за гибридизацию d -орбиталей V и sp орбиталей Sn. В целом, резкие пики ПЭС указывают на локализованные состояния электронов в окрестностях уровня E_F . Таким образом, 100 % заселенность d -орбиталей электронами в «спин вверх»-состоянии и отсутствие «спин вниз»-электронов на E_F приводит к 100 % спиновой поляризации.

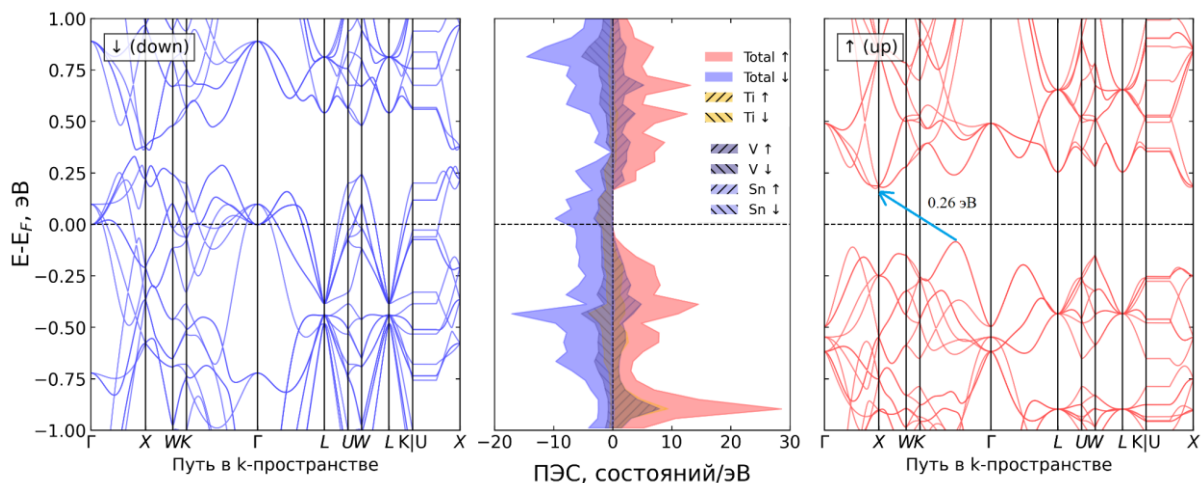


Рис. 5. Зонная структура и плотность электронных состояний для сплава Ti_2VSn в «спин вверх»- и «спин вниз»-каналах

В качестве обобщения результатов расчетов зонной структуры на рис. 6 представлена зависимость ширины запрещенной зоны в соединениях Ti_2VZ с разным содержанием валентных электронов. Наблюдается четкая корреляция между поведением ΔE_{gap} и намагниченностью (m) в зависимости от e/a . Для соединений с низким содержанием e/a и высокой m характерна наибольшая ширина запрещенной зоны в канале «спин вверх». При этом увеличение порядкового номера элемента Z при фиксированном $e/a = 4$ приводит к уменьшению ΔE_{gap} , что свидетельствует о существенных различиях в электронной структуре исследуемых материалов.

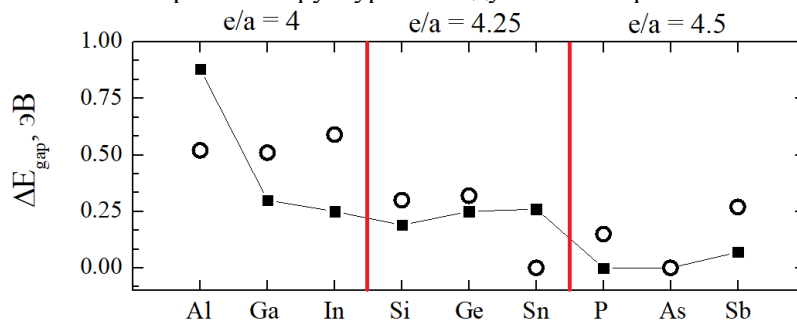


Рис. 6. Ширина запрещенной зоны в зависимости от химического элемента Z в сплавах Ti_2VZ ($Z = Al, Si, P, Ga, Ge, As, In, Sn, Sb$). Открытыми символами показаны значения ΔE_{gap} , полученные с помощью функционала PBE в [5, 6, 12]

В соединениях с $e/a = 4,25$ наблюдаются близкие значения ΔE_{gap} , что обусловлено сходством их электронной структуры и, как следствие, практически одинаковой намагниченностью. Для третьей группы соединений ($e/a = 4,5$) характерен металлический тип зонной структуры ($\Delta E_{gap} = 0, m = 0$), за исключением состава Ti_2VSb . В этом случае увеличение радиуса орбиталей и снижение энергии связи приводят к образованию запрещенной зоны и полупроводниковому поведе-

нию. В целом, можно заметить, что значения ΔE_{gap} , полученные с помощью расчетов функционалом SCAN, качественно воспроизводят результаты для функционала PBE [5, 6, 12]. Согласно исследованиям [13], функционал SCAN зарекомендовал себя лучшим образом в сравнении с PBE в плане предсказания ширины запрещенной зоны в полупроводниках и полуметаллических ферро- и ферримагнетиках.

Заключение

Проведенные расчеты химической стабильности, структурных и магнитных свойств, а также электронной структуры сплавов Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$) позволили выявить ключевые закономерности их поведения в зависимости от состава. Установлено, что все исследуемые соединения термодинамически стабильны, причем их устойчивость возрастает с увеличением концентрации валентных электронов (e/a) и снижается при переходе к более тяжелым элементам в пределах группы. Тетрагональные искажения структуры приводят к появлению энергетических минимумов при $c/a = 1,4-1,6$, особенно выраженных для Ti_2VP , Ti_2VAs и Ti_2VSb , что связано с электронными особенностями элементов V группы.

Магнитные свойства сплавов демонстрируют сильную зависимость от состава и степени тетрагональности: в кубической фазе увеличение e/a подавляет намагниченность, тогда как деформация решетки способствует ее росту. Полуметаллическое поведение со 100 % спиновой поляризацией наблюдается для соединений с $e/a = 4$ и 4,25, где в «спин вверх»-канале формируется широкая запрещенная зона, а в «спин вниз»-канале сохраняется металлический характер проводимости. Для Ti_2VSb ($e/a = 4,5$) обнаружено полупроводниковое состояние с узкой щелью ($\sim 0,1$ эВ), что подчеркивает роль атомного радиуса и гибридизации электронных состояний в формировании электронной структуры.

Полученные результаты согласуются с предыдущими исследованиями, выполненными с использованием функционала PBE, и подтверждают перспективность применения функционала SCAN для точного описания сложных сплавов. Выявленные закономерности могут быть полезны для целенаправленного дизайна материалов с заданными магнитными и транспортными свойствами, в частности, для разработки спиновых фильтров и термоэлектрических устройств. Дальнейшие исследования могут быть сосредоточены на экспериментальной верификации предсказанных свойств, а также на изучении влияния внешних факторов (температуры, давления) на стабильность и функциональные характеристики этих соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ в рамках проекта № 24-12-20016 (расчеты электронных свойств) и государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 075-00186-25-00 (расчеты структурных и магнитных свойств)).

Литература

1. Žutić, I. Spintronics: Fundamentals and Applications / I. Žutić, J. Fabian, S.D. Sarma // Reviews of modern physics. – 2004. – Vol. 76, Iss. 2. – P. 323.
2. Review on Spintronics: Principles and Device Applications / A. Hirohata, K. Yamada, Y. Nakatani *et al.* // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2020. – Vol. 509. – P. 166–711.
3. New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets / R. De Groot, F. Mueller, P. Van Engen, K. Buschow // Phys. Rev. Lett. – 1983. – Vol. 50, Iss. 25. – P. 2024–2027.
4. Марченков, В.В. Полуметаллические ферромагнетики, спиновые бесщелевые полупроводники и топологические полуметаллы на основе сплавов Гейслера: теория и эксперимент / В.В. Марченков, В.Ю. Ирхин // Физика металлов и металловедение. – 2021. – Т. 122, № 12. – С. 1221–1246.
5. Galehgirian, S. First Principles Study on Half-Metallic Properties of Heusler Compounds Ti_2VZ ($Z = Al, Ga, \text{ and } In$) / S. Galehgirian, F. Ahmadian // Solid State Communications. – 2015. – Vol. 202. – P. 52–57.
6. Qi, S. First-Principles Study on the Structural, Electronic and Magnetic Properties of the Ti_2VZ ($Z = Si, Ge, Sn$) Full-Heusler Compounds / S. Qi, J. Shen, C.-H. Zhang // Materials Chemistry and Physics. – 2015. – Vol. 164. – P. 177–182.
7. Kresse, G. Efficient Iterative Schemes for Ab initio Total-Energy Calculations using a Plane-wave Basis Set / G. Kresse, J. Furthmüller // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 54, Iss. 16. – P. 11169–11186.

8. Kresse G., Joubert D. From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method / G. Kresse, D. Joubert // Phys. Rev. B. – 1999. – Vol. 59, Iss. 3. – P. 1758–1775.

9. Accurate First-Principles Structures and Energies of Diversely Bonded Systems from an Efficient Density Functional / J. Sun, R.C. Remsing, Y. Zhang *et al.* // Nature chemistry. – 2016. – Vol. 8, no. 9. – P. 831–836.

10. Graf, T. Simple Rules for the Understanding of Heusler Compounds / T. Graf, C. Felser, S. Parkin // Prog. Solid State Chem. – 2011. – Vol. 39, Iss. 1. – P. 1–50.

11. Commentary: The Materials Project: A Materials Genome Approach to Accelerating Materials Innovation / A. Jain, S.P. Ong, G. Hautier *et al.* // APL Materials. – 2013. – no. 1 (1). – P. 011002.

12. Robust Fully-Compensated Ferrimagnetism and Semiconductivity in Inverse Heusler Compounds: Ti_2VZ ($Z = P, As, Sb, Bi$) / Y.J. Zhang, Z.H. Liu, G.D. Liu *et al.* // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2018. – Vol. 449. – P. 515–521.

13. Meta-GGA SCAN Functional in the Prediction of Ground State Properties of Magnetic Materials: Review of the Current State / V. Sokolovskiy, D. Baigutlin, O. Miroshkina, V. Buchelnikov // Metals. – 2023. – Vol. 13, Iss. 4. – P. 728.

Поступила в редакцию 6 июля 2025 г.

Сведения об авторах

Раев Андрей Александрович – аспирант, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: raiev.a@mail.ru.

Ерагер Ксения Романовна – кандидат физико-математических наук, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: eragerk@rambler.ru.

Соколовский Владимир Владимирович – доктор физико-математических наук, доцент, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: vsokolovsky84@mail.ru.

Бучельников Василий Дмитриевич – доктор физико-математических наук, профессор, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: buche@csu.ru.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2025, vol. 17, no. 3, pp. 71–78

DOI: 10.14529/mmph250308

PHASE STABILITY AND ELECTRONIC STRUCTURE OF HEUSLER ALLOYS Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$)

A.A. Raev, K.R. Erager, V.V. Sokolovsky, V.D. Buchelnikov
Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: raiev.a@mail.ru

Abstract. The article deals with the chemical stability, structural, magnetic, and electronic properties of Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$) alloys using density functional theory methods. All compounds are found thermodynamically stable, and their stability correlates with the valence electron concentration (e/a) and decreases for heavier elements. The magnetic properties depend on composition and the degree of tetragonality: in the cubic phase, an increase in e/a reduces magnetization intensity, whereas lattice distortion increases it. Half-metallic behavior with 100 % spin polarization appears at $e/a = 4$ and 4,25, while Ti_2VSb ($e/a = 4,5$) acquires a semiconducting state with a narrow gap $\sim 0,1$ eV. The results agree with PBE functional calculations and demonstrate the advantages of the SCAN functional for accurate description of complex alloys.

Keywords: Heusler alloys $Ti-VZ$; half-metallic behavior; spin polarization; tetragonal distortion; electronic structure; magnetic properties; SCAN functional.

References

1. Žutić I., Fabian J., Sarma S. D. Spintronics: Fundamentals and Applications. *Reviews of modern physics*, 2004, Vol. 76, Iss. 2, p. 323. DOI: 10.1103/RevModPhys.76.323
2. Hirohata A., Yamada K., Nakatani Y., Prejbeanu L., Diény B., Pirro P., Hillebrands B. Review on Spintronics: Principles and Device Applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol. 509, Article 166711. DOI: 10.1016/j.jmmm.2020.166711
3. De Groot R., Mueller F., Van Engen P., Buschow K. New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets // *Phys. Rev. Lett.*, 1983, Vol. 50, Iss. 25, pp. 2024–2027. DOI: 10.1103/PhysRevLett.50.2024
4. Marchenkov V.V., Irkhin V.Y. Half-Metallic Ferromagnets, Spin Gapless Semiconductors, and Topological Semimetals Based on Heusler Alloys: Theory and Experiment. *Phys. Metals Metallogr.*, 2021, Vol. 122, pp. 1133–1157. DOI: 10.1134/S0031918X21120061
5. Galeghirian S., Ahmadian F. First Principles Study on Half-Metallic Properties of Heusler Compounds Ti_2VZ ($Z = Al, Ga, \text{ and } In$). *Solid State Communications*, 2015, Vol. 202, pp. 52–57. DOI: 10.1016/j.ssc.2014.10.017
6. Qi S., Shen J., Zhang C.-H. First-Principles Study on the Structural, Electronic and Magnetic Properties of the Ti_2VZ ($Z = Si, Ge, Sn$) Full-Heusler Compounds. *Materials Chemistry and Physics*, 2015, Vol. 164, pp. 177–182.
7. Kresse G., Furthmüller J. Efficient Iterative Schemes for Ab initio Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set. *Phys. Rev. B.*, 1996, Vol. 54, Iss. 16, pp. 11169–11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
8. Kresse G., Joubert D. From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method. *Phys. Rev. B*, 1999, Vol. 59, Iss. 3, pp. 1758–1775. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.1758
9. Sun J., Remsing R.C., Zhang Y., Sun Z., Ruzsinszky A., Peng H., Yang Z., Paul A., Waghmare U., Wu X., Klein M.L., Perdew J.P. Accurate First-Principles Structures and Energies of Diversely Bonded Systems from an Efficient Density Functional. *Nature chemistry*, 2016, Vol. 8, pp. 831–836.
10. Graf T., Felser C., Parkin S. Simple Rules for the Understanding of Heusler Compounds. *Prog. Solid State Chem.*, 2011, Vol. 39, pp. 1–50. DOI: 10.1016/j.progsolidstchem.2011.02.001
11. Jain A., Ong S.P., Hautier G., Chen W., Richards W.D., Dacek S., Cholia S., Gunter D., Skinner G., Ceder K.A., Persson K. Commentary: The Materials Project: A Materials Genome Approach to Accelerating Materials Innovation. *APL Materials*, 2013, Vol. 1, p. 011002. DOI: 10.1063/1.4812323
12. Zhang Y.J., Liu Z.H., Liu G.D., Ma X.Q., Cheng Z.X. Robust Fully-Compensated Ferrimagnetism and Semiconductivity in Inverse Heusler Compounds: Ti_2VZ ($Z = P, As, Sb, Bi$). *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2018, Vol. 449, pp. 515–521. DOI: 10.1016/j.jmmm.2017.10.088
13. Sokolovskiy V., Baigutlin D., Miroshkina O., Buchelnikov V. Meta-GGA SCAN Functional in the Prediction of Ground State Properties of Magnetic Materials: Review of the Current State. *Metals*, 2023, Vol. 13, Iss. 4, p. 728. DOI: 10.3390/met13040728

Received July 6, 2025

Information about the authors

Raev Andrew Aleksandrovich is Post-graduate Student, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: raiev.a@mail.ru.

Erager Ksenia Romanovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: eragerk@rambler.ru.

Sokolovsky Vladimir Vladimirovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation; e-mail: vsokolovsky84@mail.ru.

Buchelnikov Vasily Dmitrievich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: buche@csu.ru.

Персоналии

3 апреля 2025 г. исполнилось 70 лет доктору физико-математических наук, профессору, заслуженному работнику высшей школы Василию Дмитриевичу Бучельникову.

В.Д. Бучельников – выдающийся физик-теоретик, внесший существенный вклад в современную теорию магнетизма. При его непосредственном участии были созданы и развиты теория электромагнитно-акустического преобразования в магнитоупорядоченных веществах, а также теория связанных электромагнитных, спиновых, упругих и релаксационных колебаний в магнетиках в области магнитных и ориентационных фазовых переходов. Большое количество исследовательских работ посвящено магнитным и структурным превращениям в сплавах Гейслера.

Выпускник физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова, ученик школы академика Л.Д. Ландау, Василий Дмитриевич основал в Челябинском государственном университете научную школу «Физика магнитных явлений». Признанный педагог, он успешно сочетает научную работу с преподаванием, пользуясь уважением коллег и студентов.

Под руководством Василия Дмитриевича с 1993 года защищены 7 докторских и 16 кандидатских диссертаций, что значительно продвинуло развитие новых направлений в теории конденсированного состояния.

Василием Дмитриевичем в соавторстве опубликовано свыше 350 научных работ, включая 3 монографии, главы в зарубежных изданиях и 4 обзора в «Успехах физических наук», из них более 100 работ опубликовано за последние 5 лет.

Василий Дмитриевич Бучельников пользуется заслуженным авторитетом в научной среде не только в нашей стране, но и за рубежом! Коллеги и друзья сердечно поздравляют Василия Дмитриевича с юбилеем и желают ему здоровья и долголетия, дальнейших успехов и новых достижений на поприще науки и преподавания!



ТРЕБОВАНИЯ К ПУБЛИКАЦИИ СТАТЬИ

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

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

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

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

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

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

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

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

8. Адрес электронной почты: mmph@susu.ru

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

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

11. Плата с аспирантов за публикацию не взимается.

СВЕДЕНИЯ О ЖУРНАЛЕ

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

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

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

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук» по следующим научным специальностям и соответствующим им отраслям науки: 1.1.1. Вещественный, комплексный и функциональный анализ (физико-математические науки); 1.1.2. Дифференциальные уравнения и математическая физика (физико-математические науки); 1.1.6. Вычислительная математика (физико-математические науки); 1.1.7. Теоретическая механика, динамика машин (технические и физико-математические науки); 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы (физико-математические науки); 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (физико-математические науки); 1.3.6. Оптика (физико-математические науки); 1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки); 2.3.1. Системный анализ, управление и обработка информации, статистика (физико-математические науки).

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

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

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

Периодичность выхода – 4 номера в год.

Адрес редакции: 454080, г. Челябинск, ул. С. Кривой, 79, Издательский центр ЮУрГУ, каб. 2.

Адрес издателя: 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76.

ВЕСТНИК
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
Серия
«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»
Том 17, № 3
2025

16+

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

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 30.07.2025. Дата выхода в свет 15.08.2025.

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

Тираж 500 экз. Заказ 209/193. Цена свободная.

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