

ВЕСТНИК



**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

**2026
Т. 18, № 1**

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

СЕРИЯ

«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»

Решением ВАК России включен в Перечень рецензируемых научных изданий

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

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

Редакционная коллегия

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

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 **Гундетти Д.** (Болонский университет, г. Болония, 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** (INHA-Университет, г. Инчон, Южная Корея)
д.ф.-м.н., профессор **Кундикова Н.Д.** (Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург)
д.ф.-м.н., профессор **Меньших В.В.** (Воронежский институт МВД Российской Федерации, г. Воронеж)
д.ф.-м.н., профессор **Пинчук С.И.** (Университет штата Индиана, г. Блумингтон, США)
Ph. D., ассистент-профессор **Пузырев Е.С.** (Университет Вандербильта, г. Нэшвилл, США)
д.т.н., профессор **Равшанов Н.К.** (Ташкентский университет информационных технологий, г. Ташкент, Узбекистан)
д.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.т.н., профессор **Чернявский А.О.** (Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск)
д.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Штраус В.А.** (Университет Симона Боливара, г. Каракас, Венесуэла)
д.ф.-м.н., профессор **Яловец А.П.** (Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск)

© Издательский центр ЮУрГУ, 2026



BULLETIN

OF THE SOUTH URAL
STATE UNIVERSITY

2026

Vol. 18, no. 1

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

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
A.O. Chernyavskiy, Doctor of Engineering, Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
V.A. Strauss, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, University of Simon Bolivar, Caracas, Venezuela
A.P. Yalovets, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

- АНТИПИНА Е.В., МУСТАФИНА С.А., АНТИПИН А.Ф. Генетический алгоритм для многокритериальной оптимизации динамических систем с бесконечномерной моделью..... 5
- БОЙКО А.П., ЛУНЁВ А.Д. Модель и метод поиска максимального структурированного потока в графе с множественными весами ребер..... 15
- РОЙТЕНБЕРГ В.Ш. О бифуркациях некоторых сепаратрисных контуров кусочно-гладкой динамической системы с симметрией..... 26
- ТАГИЕВ Р.К., МАМЕДОВА А.К. Задача оптимального управления для эллиптического уравнения с условиями периодичности и с управлением при решении..... 34
- ЧУБЫРЬ Н.О. Точное аналитическое решение некоторого класса нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений мембранной электрохимии..... 41

Механика

- ГУБАРЕВА К.В., ПРОСВИРЯКОВ Е.Ю., ЕРЕМИН А.В. Точное квадратичное полиномиальное решение для описания неоднородного течения Куэтта–Пуазейля в бесконечном горизонтальном слое с проницаемыми границами..... 47
- МАРТЫНОВ А.А. Математическое моделирование газодинамических характеристик радиально-осевой турбины..... 63
- SHCHUROVA E.I., SHCHUROV I.A. CAD/CAE Numerical Modeling of Fiber-Reinforced 3D Woven Composite Parts and their Machining Process..... 72

Физика

- ПОЛЕВОЙ Б.Г., НЕНАРОКОМОВ Д.И., ЖИВУЛИН Д.Е., ЖЕРЕБЦОВ Д.А., ВОРОНЦОВ А.Г., ГОДОВСКИЙ Д.Ю. Фоторезистивный эффект в плёнках $Pb_{1-x}Cd_xS$, полученных осаждением в вакууме..... 81
- ЧИРКОВ П.В., МИРЗОЕВ А.А. Молекулярно-динамическое моделирование стабильности гидридов титана при помощи машинно-обученных потенциалов..... 91

CONTENTS

Mathematics

- ANTIPINA E.V., MUSTAFINA S.A., ANTIPIN A.F. Genetic Algorithm for Multi-Objective Optimization of Dynamic Systems Using an Infinite-Dimensional Model..... 5
- BOYKO A.P., LUNEV A.D. A Model and Method for Finding the Maximum Structured Flow in a Graph with Multiple Edge Weights..... 15
- ROITENBERG V.Sh. On Bifurcations of Certain Separatrix Contours of a Piecewise-Smooth Dynamical System with Symmetry..... 26
- TAGIYEV R.K., MAMMADOVA A.K. Optimal Control Problem for an Elliptic Equation with Periodicity Conditions and Control at Solution..... 34
- CHUBYR N.O. An Exact Analytical Solution to a Certain Class of Nonlinear Ordinary Differential Equations of Membrane Electrochemistry..... 41

Mechanics

- GUBAREVA K.V., PROSVIRYAKOV E.Yu., EREMIN A.V. Exact Quadratic Polynomial Solution for Describing Inhomogeneous Couette–Poiseuille Flow in an Infinite Horizontal Layer with Permeable Boundaries..... 47
- MARTYNOV A.A. Mathematical Modeling of the Gas Dynamic Characteristics of a Radial-Axial Turbine..... 63
- SHCHUROVA E.I., SHCHUROV I.A. CAD/CAE Numerical Modeling of Fiber-Reinforced 3D Woven Composite Parts and their Machining Process..... 72

Physics

- POLEVOY B.G., NENAROKOMOV D.I., ZHIVULIN D.E., ZHEREBTSOV D.A., VORONTSOV A.G., GODOVSKIY D.Yu. Photoresistive Effect in $Pb_{1-x}Cd_xS$ Films Produced by Vacuum Deposition..... 81
- CHIRKOV P.V., MIRZOEV A.A. Molecular Dynamics Simulation of Titanium Hydride Stability using Machine-Learned Potentials..... 91

ГЕНЕТИЧЕСКИЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ С БЕСКОНЕЧНОМЕРНОЙ МОДЕЛЬЮ

Е.В. Антипина, С.А. Мустафина, А.Ф. Антипин

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Российская Федерация

E-mail: stepashinaev@ya.ru

Аннотация. Исследуется многокритериальная задача оптимизации параметров процесса полимеризации, математическая модель которого описывается бесконечной системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Для её решения предложен генетический алгоритм, основанный на принципе Парето-доминирования. Ключевой особенностью алгоритма является процедура редукции бесконечной системы уравнений к конечному виду с помощью метода моментов. Приведены результаты вычислительного эксперимента для процесса полимеризации бутадиена на неодимсодержащей каталитической системе. В ходе эксперимента определены такие параметры, как продолжительность синтеза и начальные концентрации мономера и алюминийорганического соединения, которые обеспечивают максимальную конверсию мономера при заданном значении индекса полидисперсности конечного продукта.

Ключевые слова: многоцелевая оптимизация; процесс полимеризации; генетический алгоритм; метод моментов.

Введение

Математическое моделирование процессов синтеза полимеров является важным инструментом для оптимизации условий их протекания, позволяющим повысить эффективность процессов и качество получаемых продуктов. Сложность математического описания процесса полимеризации обусловлена тем, что реакционная система содержит неограниченное количество компонентов. Поэтому математическая модель полимеризационного процесса представляет собой бесконечномерную систему дифференциальных уравнений [1]. При определении оптимальных значений параметров полимеризационных процессов часто возникает необходимость одновременно учитывать не один, а несколько критериев оптимальности, выражающих заранее заданные свойства полимеров. Высокая размерность математической модели процесса и нелинейность его динамики создают трудности при поиске решения задачи многоцелевой оптимизации и требуют разработки специальных алгоритмов.

Одним из направлений решения многокритериальных задач является применение методов скаляризации, в которых осуществляется переход от нескольких критериев оптимальности к одному критерию [2, 3]. Наиболее распространенным среди них методом является метод взвешенной суммы [4, 5]. Данный метод основан на сведении многокритериальной задачи к однокритериальной путем введения обобщенного критерия, представленного в виде суммы исходных критериев, взвешенных коэффициентами. Весовые коэффициенты выражают степень значимости каждого критерия оптимизации. Метод взвешенной суммы эффективно применяется для решения задач с выпуклым целевым множеством. При решении задач оптимизации технологических процессов часто приходится сталкиваться с невыпуклой и овражной структурой минимизируемых функционалов. Поэтому для решения задач многоцелевой оптимизации процессов синтеза полимеров применимость метода взвешенной суммы ограничена.

К методам скаляризации относится также метод главного критерия [6]. Суть метода заключается в том, что в качестве оптимизируемой функции выбирается лишь один из критериев оптимизации, а остальные критерии рассматриваются в качестве ограничений задачи. Метод применим для решения многоцелевых задач, в которых можно четко выделить главный критерий. В

общем случае при применении метода главного критерия можно потерять эффект взаимного влияния второстепенных критериев, а также возникают трудности вычислительного характера в случае нелинейных функций-ограничений.

К другому классу методов решения задач многокритериального выбора относятся методы, основанные на концепции Парето-доминирования, в частности, генетические алгоритмы [7–10]. Различие в работе алгоритмов состоит в определении пригодности особей в качестве решения и в механизме селекции [11]. Генетические алгоритмы применяются, в основном, для решения многокритериальных задач оптимизации функций или динамических процессов, которые описываются конечными системами дифференциальных уравнений. Поэтому предлагается расширить область их применения для оптимизации параметров процессов синтеза полимеров, математическое описание которых представляется бесконечными системами дифференциальных уравнений.

Целью работы является разработка генетического алгоритма для решения задачи многокритериальной оптимизации процесса синтеза полимеров на основе его математической модели.

Постановка задачи

Пусть математическое описание полимеризационного процесса представляется системой дифференциальных уравнений [1]:

$$\frac{dR_l}{dt} = \sum_{i=1}^{\infty} a_{li} R_i + \sum_{i,j=1}^{\infty} b_{lij} R_i R_j, \quad 1 \leq l \leq \infty, \quad (1)$$

с начальными условиями

$$R_l(0) = R_l^0, \quad (2)$$

где R_l – компонент реакционной смеси (инициатор I , свободный радикал R , мономер M , активные центры P_1 , активная P_i и неактивная Q_i цепи полимера длиной i), $t \in [0, \tau]$ – время, a_{li} , b_{lij} – константы скорости реакции.

В качестве оптимизируемых параметров рассмотрим начальные концентрации k веществ $R_1(0), \dots, R_k(0)$, и продолжительность процесса τ , для которых область допустимых значений Ω задается неравенствами:

$$R_i^{\min} \leq R_i(0) \leq R_i^{\max}, \quad i = \overline{1, k}, \quad (3)$$

$$\tau^{\min} \leq \tau \leq \tau^{\max}. \quad (4)$$

Пусть задан вектор критериев оптимизации:

$$J(R_1(0), \dots, R_k(0), \tau) = (J_1(R_1(0), \dots, R_k(0), \tau), \dots, J_m(R_1(0), \dots, R_k(0), \tau)). \quad (5)$$

Необходимо определить начальные концентрации реагентов $R_1(0), \dots, R_k(0)$ и продолжительность процесса τ с учетом ограничений (3) и (4), при которых каждый критерий оптимизации достигает своего минимального значения:

$$J_s(R_1(0), \dots, R_k(0), \tau) \rightarrow \min, \quad s = \overline{1, m}. \quad (6)$$

Алгоритм многоцелевой оптимизации процесса полимеризации

Сформулируем численный алгоритм многоцелевой оптимизации условий протекания полимеризационного процесса на основе метода FFGA (Fonseca and Fleming's Multiobjective Genetic Algorithm) [8], в котором поиск решения осуществляется путем ранжирования особей с применением принципов Парето-доминирования.

Основная идея Парето-оптимальности заключается в том, что невозможно улучшить решение по одному из показателей, не ухудшив, при этом, по другому [12].

Пусть $x = (R_1(0), \dots, R_k(0), \tau) \in \Omega$, $y = (R_1(0), \dots, R_k(0), \tau) \in \Omega$.

Решение $x \in \Omega$ называется эффективным (недоминируемым), если в Ω не существует решения y , которое по критериям оптимизации было бы не хуже, чем x ($J_l(y) \leq J_l(x)$), и по крайней мере по одному s -му критерию было бы строго лучше, чем x ($J_s(y) < J_s(x)$).

Решение x доминирует решение y , если $J(x) < J(y)$.

Если решение x недоминируемо относительно Ω , то оно называется Парето-оптимальным.

Множество всех эффективных точек называется множеством Парето в пространстве переменных, а их образ в пространстве целевых функций – фронтом Парето [11].

Пусть в качестве популяции выступает наборов оптимизируемых параметров процесса:

$$u_i = (u_{i1}, \dots, u_{ir}) = (R_1(0), \dots, R_k(0), \tau),$$

где u_i – особь, u_{ij} – j -й ген i -й особи, $i = \overline{1, P}$, P – размер популяции, $r = k + 1$.

Каждой i -й особи поставим в соответствие ранг $rang_i$ [13]:

$$rang_i = 1 + g, \quad (7)$$

где g – количества доминирующих решений. Качество особи u_i определяется ее рангом: чем меньше ранг $rang_i$, тем приспособленность особи выше, и, следовательно, она больше подходит в качестве решения оптимизационной задачи, чем особи с меньшей приспособленностью (большим рангом).

Поскольку система дифференциальных уравнений (1) является незамкнутой, применим метод моментов для ее преобразования к конечному виду [14]. Получив численное решение конечной системы дифференциальных уравнений, можно вычислить значения целевых функционалов (6), и определить приспособленность каждой особи путем вычисления ее ранга.

Алгоритм многоцелевой оптимизации процесса полимеризации состоит из следующих шагов.

Шаг 1. Заполнить начальную популяцию оптимизируемых параметров процесса полимеризации случайными значениями из области Ω :

$$u_{ij}^0 = R_j^{\min} + \alpha_j (R_j^{\max} - R_j^{\min}), \quad j = \overline{1, r-1},$$

$$u_{ij}^0 = \tau^{\min} + \alpha_j (\tau^{\max} - \tau^{\min}), \quad j = r,$$

где $\alpha_j \in [0, 1]$ – случайное число, $i = \overline{1, P}$.

Шаг 2. Преобразовать систему (1) к конечному виду, подставив в нее выражения для моментов цепей полимера и их производных:

$$\mu_n = \sum_{i=2}^{+\infty} i^n P_i, \quad \eta_n = \sum_{i=2}^{+\infty} i^n Q_i, \quad \frac{d\mu_n}{dt} = \sum_{i=2}^{\infty} i^n \frac{dP_i}{dt}, \quad \frac{d\eta_n}{dt} = \sum_{i=2}^{\infty} i^n \frac{dM_i}{dt}, \quad (8)$$

где μ_n, η_n – моменты n -го порядка активных и неактивных цепей полимера P_i, Q_i соответственно [1].

Шаг 3. Решить полученную систему дифференциальных уравнений с начальными условиями $(u_{i1}^0, \dots, u_{ir}^0)$, $t \in [0, u_{ir}^0]$, $i = \overline{1, P}$. Для каждого набора оптимизируемых параметров вычислить значения целевых функционалов $J_s(u_i^0)$, $s = \overline{1, m}$.

Шаг 4. Определить приспособленность особей начальной популяции. Для этого вычислить ранг $rang_i$ каждой особи u_i^0 , $i = \overline{1, P}$.

Шаг 5. Установить счетчик итераций равным 1: $iter = 1$.

Шаг 6. Выполнить процедуру селекции. Из наиболее приспособленных особей выбрать случайным образом две особи-родителя u^{r1}, u^{r2} .

Шаг 7. Выполнить процедуру кроссовера. Сгенерировать три особи-потомка u^{p1}, u^{p2}, u^{p3} :

$$u^{p1} = \frac{u^{r1} + u^{r2}}{2}, \quad u^{p2} = \frac{3u^{r1} - u^{r2}}{2}, \quad u^{p3} = \frac{3u^{r2} - u^{r1}}{2}.$$

Шаг 8. Выполнить процедуру мутации для потомков u^{p1}, u^{p2}, u^{p3} , в результате которой сформировать три особи-мутанта u^{m1}, u^{m2}, u^{m3} . Для этого случайным образом выбрать l -й ген каждого из потомков. Если $l \in \{1, \dots, r-1\}$, то заменить его случайным значением из диапазона (3). Если ген соответствует продолжительности процесса τ ($l = r$), то заменить его случайным значением из промежутка (4).

Шаг 9. Вычислить приспособленность особей u^{m1} , u^{m2} , u^{m3} путем вычисления рангов. Для этого решить систему, полученную на шаге 2, с начальными условиями $(u_{i1}^{mj}, u_{i2}^{mj}, \dots, u_{ir-1}^{mj})$, $t \in [0, u_{ir}^{mj}]$, $i = \overline{1, P}$, $j = 1, 2, 3$.

Шаг 10. Сформировать множество наименее приспособленных особей u_l^{bad} , $l = \overline{1, q}$.

Шаг 11. Выбрать из u^{m1} , u^{m2} , u^{m3} наиболее приспособленную особь и заменить ею случайно выбранную особь из множества u_l^{bad} , $l = \overline{1, q}$.

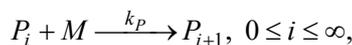
Шаг 12 Объединить множество u_l^{bad} , $l = \overline{1, q}$ с остальной частью популяции.

Шаг 13. Если $iter \leq N$ (N – заданное количество итераций), то $iter = iter + 1$ и перейти на шаг 6. Иначе выбрать множество особей с наименьшим рангом, которое является приближенным решением задачи многоцелевой оптимизации процесса полимеризации.

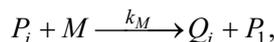
Вычислительный эксперимент

С помощью сформулированного алгоритма найдем приближенное решение задачи многоцелевой оптимизации для процесса полимеризации бутадиена на неодимсодержащей каталитической системе. Кинетическая схема данного процесса состоит из следующих стадий [15]:

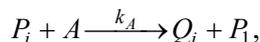
1) рост цепи:



2) передача цепи на мономер:



3) передача цепи на алюминийорганическое соединение (АОС):



где P_i , Q_i – активные и неактивные цепи полимера длиной i соответственно, M – мономер, A – АОС, k_P , k_M , k_A – константы скоростей реакций роста цепи, передачи цепи на мономер и передачи цепи на АОС соответственно.

Математическое описание процесса полимеризации бутадиена представляется бесконечномерной системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dt} &= -MC_a(k_P + k_M), \\ \frac{dA}{dt} &= -k_A AC_a, \\ \frac{dP_1}{dt} &= -k_P MP_1 + (k_M M + k_A A) \sum_{i=2}^{\infty} P_i, \\ \frac{dQ_1}{dt} &= k_M MP_1 + k_A AP_1, \\ \frac{dP_i}{dt} &= k_P M(P_{i-1} - P_i) - k_M MP_i - k_A AP_i, \quad i \geq 2, \\ \frac{dQ_i}{dt} &= k_M MP_i + k_A AP_i, \quad i \geq 2, \end{aligned} \tag{9}$$

с начальными условиями:

$$M(0) = M^0, A(0) = A^0, P_1(0) = C_a, Q_1(0) = 0, P_i(0) = Q_i(0) = 0, i \geq 2, \tag{10}$$

где $C_a = \sum_{i=1}^{\infty} P_i(t)$ – концентрация активных центров.

С помощью формул (8) приведем систему (9) к конечной системе дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}
 \frac{dM}{dt} &= -MP_1(k_P + k_M) - M\mu_0(k_P + k_M), \\
 \frac{dA}{dt} &= -k_AAP_1 - k_AA\mu_0, \\
 \frac{dP_1}{dt} &= -k_PMP_1 + (k_MM + k_AA)\mu_0, \\
 \frac{dQ_1}{dt} &= k_MMP_1 + k_AAP_1, \\
 \frac{d\mu_0}{dt} &= k_PMP_1 - (k_MM + k_AA)\mu_0, \\
 \frac{d\eta_0}{dt} &= (k_MM + k_AA)\mu_0, \\
 \frac{d\mu_1}{dt} &= 2k_PMP_1 + k_PM\mu_0 - (k_MM + k_AA)\mu_1, \\
 \frac{d\eta_1}{dt} &= (k_MM + k_AA)\mu_1, \\
 \frac{d\mu_2}{dt} &= 4k_PMP_1 + k_PM\mu_0 + 2k_PM\mu_1 - (k_MM + k_AA)\mu_2, \\
 \frac{d\eta_2}{dt} &= (k_MM + k_AA)\mu_2, \\
 \frac{d\mu_3}{dt} &= 8k_PMP_1 + 3k_PM(\mu_2 + \mu_1) + k_PM\mu_0 - (k_MM + k_AA)\mu_3, \\
 \frac{d\eta_3}{dt} &= (k_MM + k_AA)\mu_3,
 \end{aligned} \tag{11}$$

с начальными условиями

$$M(0) = M^0, A(0) = A^0, P_1(0) = C_a, Q_1(0) = 0, \mu_n(0) = \eta_n(0) = 0, n = \overline{0,3}. \tag{12}$$

Численное решение системы (11) позволяет определить средние молекулярные характеристики молекулярно-массового распределения полимеров:

1) среднечисленную молекулярную массу

$$M_n = m_0 \frac{\mu_1 + \eta_1}{\mu_0 + \eta_0};$$

2) среднемассовую молекулярную массу

$$M_w = m_0 \frac{\mu_2 + \eta_2}{\mu_1 + \eta_1},$$

где m_0 – молекулярная масса бутадиена.

Одним из показателей физико-химических свойств полимера является его полидисперсность Pd , характеризующая неоднородность макромолекул по структуре и размерам:

$$Pd = \frac{M_w}{M_n}.$$

Если индекс полидисперсности равен 2, то есть среднемассовая молекулярная масса в 2 раза больше среднечисленной молекулярной массы, то в полимерах присутствует значительное количество молекул с различными молекулярными массами, что свидетельствует о широком распределении молекулярных масс.

Пусть оптимизируемыми параметрами процесса полимеризации бутадиена являются начальные концентрации мономера $M(0)$ и алюминийорганического соединения $A(0)$, на значения которых наложены ограничения (моль/л):

$$0,5 \leq M(0) \leq 8, \tag{13}$$

$$0,00001 \leq A(0) \leq 0,05. \tag{14}$$

Математика

Также варьируемым параметром является время контакта веществ τ , допустимые значения которого задаются в виде неравенства (мин):

$$10 \leq \tau \leq 100. \quad (15)$$

Требуется определить продолжительность процесса полимеризации τ , начальные концентрации мономера $M(0)$ и АОС $A(0)$, при которых достигается максимальная конверсия мономера, и значение индекса полидисперсности полимеров равно 2, то есть

$$J_1(M(0), A(0), \tau) = \left(1 - \frac{M(\tau)}{M(0)}\right) \cdot 100\% \rightarrow \max, \quad (16)$$

$$J_2(M(0), A(0), \tau) = |Pd - 2| \rightarrow \min. \quad (17)$$

Задача (9)–(17) решена с помощью программы, написанной на языке Delphi, с параметрами алгоритма: $P = 50$, $N = 100$. Поиск численного решения системы дифференциальных уравнений (11) с начальными условиями (12) осуществлялся с помощью предиктор-корректорного метода Адамса второго порядка.

Результаты решения задачи (9)–(17) приведены на рис. 1, 2. Для обеспечения максимальной конверсии мономера и полидисперсности получаемых полимеров нужно придерживаться одного из десяти режимов протекания процесса полимеризации бутадиена (табл. 1).

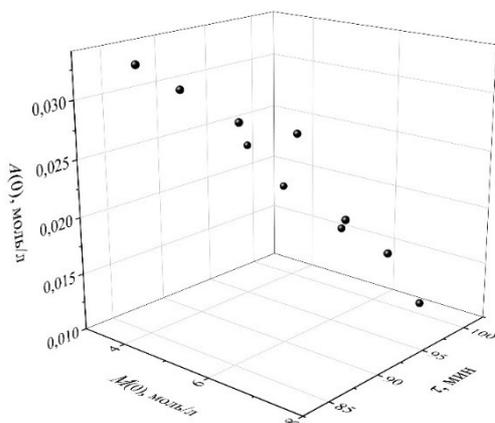


Рис. 1. Аппроксимация множества Парето

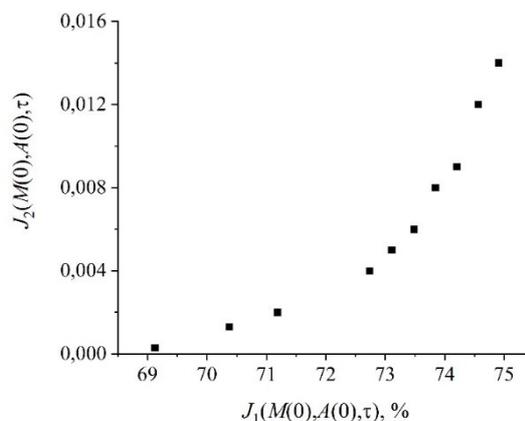


Рис. 2. Аппроксимация фронта Парето

Таблица 1

Оптимальные условия протекания процесса полимеризации бутадиена

$M(0)$, моль/л	$A(0)$, моль/л	τ , мин	Конверсия мономера, %	Pd
3,854	0,033	85	69,13	2,0003
4,112	0,03	88	70,38	2,0013
4,989	0,028	90	71,19	2,002
6,508	0,02	94	72,74	1,996
5,211	0,026	95	73,11	2,005
7,044	0,017	96	73,48	1,994
3,556	0,023	97	73,85	1,992
5,627	0,017	98	74,20	1,991
4,015	0,019	99	74,56	1,988
7,045	0,011	100	74,91	1,986

Также решены задачи однокритериальной оптимизации процесса полимеризации бутадиена по каждому из критериев (16), (17). Расчет проведен с помощью разработанной авторами программы на языке Delphi, реализующей генетический алгоритм с вещественным кодированием [16]. Полученные результаты вычислений представлены в табл. 2.

Значение наибольшей конверсии мономера, найденной в результате расчетов с помощью алгоритма многоцелевой оптимизации, равно 74,91 % (последняя строка табл. 1), при этом $Pd = 1,986$. При решении однокритериальной задачи максимизации конверсии мономера получе-

но значение индекса полидисперсности полимеров, равное 1,713 (первая строка табл. 2). Отсюда видно, что применение алгоритма многоцелевой оптимизации позволило уменьшить отклонение значения Pd от целевого значения, равного 2, с 14,35% до 0,7%.

Таблица 2

Результаты решения задач однокритериальной оптимизации процесса полимеризации бутадиена

Критерий оптимизации	$M(0)$, моль/л	$A(0)$, моль/л	τ , мин	Конверсия мономера, %	Полидис- персность
$J_1(M(0), A(0), \tau) \rightarrow \min$	1,7	0,0017	99	74,56	1,713
$J_2(M(0), A(0), \tau) \rightarrow \min$	4,47	0,045	68	60,94	1,992

Аналогично, при решении многокритериальной задачи (9)–(17) увеличено наибольшее значение конверсии мономеров на 13,44 % (значение конверсии 69,13 % при наименьшем отклонении полидисперсности от значения 2), по сравнению с решением задачи оптимизации с одним критерием (17) (значение конверсии 60,94 %). Поэтому для одновременного поиска наибольших значений критериев оптимизации (16), (17) целесообразно применять разработанный алгоритм.

Заключение

Разработанный алгоритм решения задачи многоцелевой оптимизации можно использовать для определения оптимальных значений параметров процесса синтеза полимеров, математическая модель которого может быть представлена бесконечной системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Алгоритм, сформулированный на основе метода FFGA, включает в себя процедуру преобразования бесконечной системы дифференциальных уравнений к конечному виду. Преимуществом алгоритма является отсутствие необходимости задавать приоритеты критериям оптимизации.

Алгоритм реализован в виде программы на языке Delphi для промышленно значимого процесса полимеризации бутадиена. Сформулирована задача многоцелевой оптимизации процесса, в которой варьируемыми параметрами являются время контакта веществ, начальные концентрации мономера и алюминийорганического соединения. В качестве критериев оптимальности заданы максимальная конверсия мономера и достижение показателя полидисперсности полимеров заданного значения, который определяет молекулярные характеристики конечного продукта. В результате работы алгоритма получено множество Парето-оптимальных решений рассматриваемой многокритериальной задачи. Сравнение решения задачи многоцелевой оптимизации процесса полимеризации бутадиена с решениями, полученными в результате минимизации каждого критерия по отдельности, показало, что применение разработанного алгоритма позволяет существенно улучшить показатели наибольшей конверсии мономера и индекса полидисперсности полимеров.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FRRR-2026-0007).

Литература

1. Антипина, Е.В. Поиск оптимального начального состава реакционной смеси процесса полимеризации с помощью искусственных иммунных систем / Е.В. Антипина, С.А. Мустафина, А.Ф. Антипин // Прикладная информатика. – 2004. – Т. 19, № 6. – С. 59–67.
2. О решении многокритериальных задач принятия решений на основе парных сравнений / Н.К. Кривулин, Т. Абильдаев, В.Д. Горшечникова и др. // Компьютерные инструменты в образовании. – 2020. – № 2. – С. 27–58.
3. Nakayama, H. Sequential Approximate Multiobjective Optimization using Computational Intelligence / H. Nakayama, Y. Yun, M. Yoon. – Berlin: Springer, 2009. – 200 p.
4. Воробьева, М.В. Анализ методов многокритериального принятия решений / М.В. Воробьева // Региональная и отраслевая экономика. – 2022. – № 1. – С. 24–28.
5. Островский, Г.М. Многокритериальная оптимизация технологических процессов в условиях неопределенности / Г.М. Островский, Ю.М. Волин // Автоматика и телемеханика. – 2007. – № 3. – С. 165–180.
6. Владимирова, Л.В. Многокритериальная оптимизация динамики пучков / Л.В. Владимирова // Известия Иркутского государственного университета. Серия «Математика». – 2014. – Т. 7. – С. 3–18.

7. Coello, C.A. A Comprehensive Survey of Evolutionary-Based Multiobjective Optimization Techniques / C.A. Coello // Knowledge and Information Systems. – 1999. – Vol. 1. – P. 269–308.
8. Fonseca, C.M. Multiobjective Optimization and Multiple Constraint Handling with Evolutionary Algorithms. I: A Unified Formulation / C.M. Fonseca, P.J. Fleming // IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics. Part A: Systems and Humans. – 1998. – Vol. 28, Iss. 1. – P. 26–37.
9. Zitzler, E. Multiobjective Evolutionary Algorithms: A Comparative Case Study and the Strength Pareto Approach / E. Zitzler, L. Thiele // IEEE transactions on evolutionary computation. – 1999. – Vol. 3, no. 4. – P. 257–271.
10. A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm: NSGA II / K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal, T. Meyarivan // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. – 2002. – Vol. 6, no. 2. – P. 182–197.
11. Антипина, Е.В. Алгоритм решения задачи многоцелевой оптимизации на основе кинетической модели химической реакции / Е.В. Антипина, С.А. Мустафина, А.Ф. Антипин // Автоматизация. – 2021. – Т. 57, № 6. – С. 124–131.
12. Подиновский, В.В. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач / В.В. Подиновский, В.Д. Ногин. – М.: Физматлит, 2007. – 255 с.
13. Исследование эффективности генетических алгоритмов многокритериальной оптимизации / С.Ю. Белецкая, Ю.А. Асанов, А.Д. Поваляев, А.В. Гаганов // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2015. – Т. 11, № 1. – С. 24–27.
14. Подвальный, С.Л. Моделирование промышленных процессов полимеризации на основе метода моментов / С.Л. Подвальный // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2015. – Т. 11, № 1. – С. 11–16.
15. Обратная кинетическая задача ионно-координационной полимеризации диенов / Т.С. Усманов, Э.Р. Максютова, И.К. Гатауллин и др. // Высокомолекулярные соединения. Серия А. – 2003. – Т. 45, № 2. – С. 181–187.
16. Search for the Optimal Composition of the Reaction Mixture based on a Genetic Algorithm / E. Antipina, S. Mustafina, A. Antipin, A. Akimov // Match: communications in mathematical and computer chemistry. – 2025. – Vol. 94, no. 2. – P. 309–324.

Поступила в редакцию 24 октября 2025 г.

Сведения об авторах

Антипина Евгения Викторовна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, управление научных исследований и разработок, Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Российская Федерация, e-mail: stepashinaev@ya.ru.

Мустафина Светлана Анатольевна – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра математического и компьютерного моделирования, Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Российская Федерация.

Антипин Андрей Федорович – кандидат технических наук, доцент, кафедра прикладной информатики и программирования, Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Российская Федерация.

GENETIC ALGORITHM FOR MULTI-OBJECTIVE OPTIMIZATION OF DYNAMIC SYSTEMS USING AN INFINITE-DIMENSIONAL MODEL

E.V. Antipina, S.A. Mustafina, A.F. Antipin

Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation

E-mail: stepashinaev@ya.ru

Abstract. This article investigates the multi-objective problem of optimizing polymerization process parameters. The complexity of the mathematical description of the polymerization process stems from the fact that the reaction system contains an unlimited number of components. Therefore, the mathematical model of the polymerization process is an infinite-dimensional system of differential equations. To solve this multi-objective problem of polymerization process optimization, the article proposes a genetic algorithm based on the Pareto dominance principle. A key feature of the algorithm is the procedure for reducing the infinite system of equations to a final form using the moment method. An advantage of the algorithm is the absence of the need to prioritize the optimization criteria. The article presents the results of a computational experiment on the polymerization of butadiene on a neodymium-containing catalytic system. The experiment allowed determining such parameters as the synthesis duration and the initial concentrations of the monomer and organoaluminum compound that ensure maximum monomer conversion at a given polydispersity index of the final product. The solution to the problem of the multi-objective optimization of the butadiene polymerization process was compared to the solutions obtained by minimizing each criterion separately. It was found that the use of the developed algorithm allows for a significant improvement in the indicators of the highest monomer conversion and the polydispersity index of polymers.

Keywords: multi-objective optimization; polymerization process; genetic algorithm; moment method.

References

1. Antipina E., Mustafina S., Antipin A. Search for the Optimal Initial Composition of the Reaction Mixture of the Polymerization Process using Artificial Immune Systems. *Journal of Applied Informatics*, 2004, Vol. 19, no. 6, pp. 59–67. (in Russ.). DOI: 10.37791/2687-0649-2024-19-6-59-67
2. Krivulin N., Abildaev T., Gorshechnikova V., Kapatsa D., Magdich E., Mandrikova A. On Solving Multicriteria Decision Making Problems Based on Pairwise Comparisons. *Computer Tools in Education*, 2020, no. 2, pp. 27–58. (in Russ.). DOI: 10.32603/2071-2340-2020-2-27-58
3. Nakayama H., Yun Y., Yoon M. *Sequential Approximate Multiobjective Optimization Using Computational Intelligence*. Berlin: Springer, 2009, 200 p. DOI: 10.1007/978-3-540-88910-6
4. Vorobieva M.V. Analysis of Methods of Multi-Criteria Decision Making. *Regional and sectoral economy*, 2022, no. 1, pp. 24–28. (in Russ.). DOI: 10.47576/2782-4578_2022_1_24.
5. Volin Yu.M., Ostrovskii G.M. Multicriteria Optimization of Technological Processes under Uncertainty Conditions. *Automation and Remote Control*, 2007, Vol. 68, no. 3, pp. 523–538. DOI: 10.1134/S0005117907030125
6. Vladimirova L. Multicriteria Optimization of Beam Dynamics. *Bulletin of Irkutsk State University. Series Mathematics*, 2014, Vol. 7, pp. 3–18. (in Russ.).
7. Coello C.A. A Comprehensive Survey of Evolutionary-Based Multiobjective Optimization Techniques. *Knowledge and Information Systems*, 1999, Vol. 1, pp. 269–308. DOI: 10.1007/bf03325101
8. Fonseca C.M., Fleming P.J. Multiobjective Optimization and Multiple Constraint Handling with Evolutionary Algorithms. I: A Unified Formulation. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics. Part A: Systems and Humans*, 1998, Vol. 28, Iss. 1, pp. 26–37. DOI: 10.1109/3468.650319
9. Zitzler E., Thiele L. Multiobjective Evolutionary Algorithms: A Comparative Case Study and the Strength Pareto Approach. *IEEE transactions on evolutionary computation*, 1999, Vol. 3, no. 4, pp. 257–271. DOI: 10.1109/4235.797969

10. Deb K., Pratap A., Agarwal S., Meyarivan T. A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm: NSGA II. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2002, Vol. 6, no. 2, pp. 182–197. DOI: 10.1109/4235.996017

11. Antipina E.V., Antipin A.F., Mustafina S.A. Algorithm of Solving a Multiobjective Optimization Problem on The Basis of a Kinetic Chemical Reaction Model. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2021, Vol. 57, no. 6, pp. 668–674. DOI: 10.3103/S8756699021060029

12. Podinovskiy V.V., Nogin V.D. *Pareto-optimal'nye resheniya mnogokriterial'nykh zadach* (Pareto-Optimal Solutions to Multi-Criteria Problems). Moscow, Fizmatlit Publ., 2007, 256 p. (in Russ.).

13. Beletskaja S.Yu., Asanov Yu.A., Povalyaev A.D., Gaganov A.V. Research of the Efficiency of Multiobjective Optimization Genetic Algorithms. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*, 2015, Vol. 11, no. 1, pp. 24–27. (in Russ.).

14. Podvalny S.L. Modeling of Industrial Polymerization Processes Based on The Method of Moments. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*, 2015, Vol. 11, no. 1, pp. 11–16. (in Russ.).

15. Usmanov T.S., Maksyutova E.R., Gataullin I.K., Spivak S.I., Usmanov S.M., Monakov Yu.B. Inverse Kinetic Problem for Ion-Coordination Polymerization of Dienes. *Vysokomolekulyarnye soedineniya. Seriya A*, 2003, Vol. 45, no. 2, pp. 181–187. (in Russ.).

16. Antipina E., Mustafina S., Antipin A., Akimov A. Search for the Optimal Composition of the Reaction Mixture based on a Genetic Algorithm. *Match: communications in mathematical and computer chemistry*, 2025, Vol. 94, no. 2, pp. 309–324. DOI: 10.46793/match.94-2.309A

Received October 24, 2025

Information about the authors

Antipina Evgenia Viktorovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Senior Staff Scientist of the Department of Scientific Research and Development, Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation, e-mail: stepashinaev@ya.ru.

Mustafina Svetlana Anatolievna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor of the Department of Mathematical and Computer Modeling, Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation.

Antipin Andrey Fedorovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor of the Department of Applied Informatics and Programming, Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation.

МОДЕЛЬ И МЕТОД ПОИСКА МАКСИМАЛЬНОГО СТРУКТУРИРОВАННОГО ПОТОКА В ГРАФЕ С МНОЖЕСТВЕННЫМИ ВЕСАМИ РЕБЕР

А.П. Бойко¹, А.Д. Лунёв²

¹ Военная академия связи им. С.М. Будённого, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация

² Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Российская Федерация

Аннотация. Представлена модель сети в виде графа, весами ребер которого являются подмножества из целых чисел. Данные веса характеризуют пропускную способность и ограничивают потоки через ребра. Между вершинами s и t данной сети необходимо сформировать особый вид потока, к которому предъявляются дополнительные требования: в каждом ребре маршрута от s к t необходимо выделить одинаковое подмножество смежных упорядоченных элементов, количество которых определяет величину потока. Интерес представляет задача поиска подмножества таких потоков, которые не имеют общих элементов и могут быть одновременно реализованы, а сумма их величин максимальна для данной сети. Модель и метод на основе целочисленного линейного программирования, представленные в данной статье, могут быть использованы для анализа пропускной способности графов с множественными весами ребер.

Ключевые слова: структурированный поток; множественные веса ребер; пропускная способность сети.

Введение

Теория графов является мощным, проверенным инструментарием для решения потоковых задач, возникающих в различных областях человеческой деятельности. Представление реальных систем в виде графов, где вершины являются узлами системы (города, узлы связи, заводы), а ребра – каналы, по которым осуществляется передача потока (дороги, каналы, сетевые соединения, трубы), позволяет осуществлять моделирование и оптимизацию потока через сеть, под которым могут пониматься трафик на дорогах, информационные данные, некая жидкость и т.д.

В данной работе уделяется внимание особому виду потока, обладающему определённой структурой и отвечающему дополнительным требованиям, обусловленным его природой. Так, например, ребра в графе могут представлять собой линии связи, а веса – частоты, на которых возможна передача сигналов в данных линиях. Любой диапазон частот, доступных для передачи сигналов, может быть представлен в виде подмножества частотных интервалов, пронумерованных целыми числами. Тогда веса ребер являются подмножествами целых чисел, характеризующие их пропускную способность.

Ребра в графе могут представлять собой дороги, а целочисленные компоненты множественных весов – пронумерованные полосы движения в этих дорогах.

Задача заключается в нахождении такой последовательности ребер между вершинами графа, что в каждом ребре последовательности существует одинаковое подмножество смежных целочисленных компонентов. Физически это может означать передачу сигнала по составной линии связи на одних и тех же частотах, или перемещение транспортного средства по маршруту в пределах полосы движения. При этом и сигнал, и транспортное средство могут занимать как одну, так и несколько частот (полос движения) подряд.

Для получения научно-обоснованных решений, а также проведения исследований и экспериментов по распределению описанных потоков в сетях с множественными весами ребер, необходима разработка их математических моделей.

1. Модель структурированного потока

Пусть $G = (V, E)$ – неориентированный граф без петель и кратных ребер с множеством вершин $V = \{v_i\}$, $i \in \overline{1, N_1}$ и множеством ребер $E \subset V \times V$, таким, что если вершины v_i и v_j соединены ребром, то $e_{ij} \in E$. Зафиксируем две вершины графа $s, t \in V$, образующие соответственно исток и сток. Тогда граф $G = (V, E)$ представляет собой двухполюсную сеть с полюсами s и t . Каждому ребру $e_{ij} \in E$ поставим в соответствие некоторое множество $C_{ij} = \{c_n, c_{n+1}, \dots, c_{N_2}\} \subset Z$, $N_2 < \infty$ называемое пропускной способностью ребра e_{ij} . Тогда будем полагать, что $G(V, E)$ – граф сети с множественными весами ребер.

Определение 1. Припишем каждому ребру $e_{ij} \in E$ некоторый вес в виде упорядоченного множества $F_{ij} = \{c_{n+h}, c_{n+h+1}, \dots, c_{N_3}\} \subset C_{ij}$, $h \leq N_3 \leq N_2$ такого, что $c_{n+1} = c_n + 1 \mid \forall n \in \overline{1, N_3 - 1}$. Будем называть F_{ij} *структурированным потоком по ребру*, соединяющему вершины v_i и v_j .

Обозначим через $\mu_{s,t}$ маршрут из s в t , представляющий собой упорядоченную последовательность ребер $(e_{sv_i}, e_{v_i v_j}, \dots, e_{v_z t})$, начинающуюся в вершине s , заканчивающуюся в вершине t и не проходящую через одну и ту же вершину дважды, причем каждые два соседних ребра имеют общую вершину. Будем описывать маршрут перечнем ребер его образующих, т. е. $\mu_{s,t} = (e_{sv_i}, e_{v_i v_j}, \dots, e_{v_z t})$.

Определение 2. Если функция $f^{cmp} : E \rightarrow R$ удовлетворяет условиям:

1. $F_{ij} \subset C_{ij}$, $\forall i, j \mid e_{ij} \in E$;
2. $|F_{ij}| = -|F_{ji}|$;
3. $\sum |F_{ij}| = \begin{cases} |F_{ij}|, & i = s, j \in \overline{1, N_1}, \\ 0, & i, j \in \overline{1, N_1}, i \neq s, j \neq t, \\ -|F_{ij}|, & i \in \overline{1, N_1}, j = t; \end{cases}$
4. $F_{sv_i} = F_{v_i v_j} = \dots = F_{v_z t}$;

то f^{cmp} называется *структурированным потоком* из s в t в сети с множественными весами ребер $G(V, E)$. Условие 1 представляет собой модифицированный вариант условия, отражающего тот факт, что поток через любое ребро сети не должен превышать его пропускной способности. Применительно к сети с множественными весами ребер данное условие означает, что F_{ij} должно быть упорядоченным подмножеством, состоящим из элементов множества C_{ij} . Условие 2 определяет знак потока по отношению к вершине, в зависимости от того восходит он к ней или исходит. Условие 3 выражает факт сохранения потока во всех вершинах, за исключением s и t . Данные условия являются традиционными при определении потоков в сетях [1–3], за исключением некоторых дополнений в условии 1 и условия 4, отражающих новизну понятия *структурированный поток*. Их суть заключается в необходимости формирования одинаковых структурированных потоков во всех ребрах маршрута от s к t .

Значение $|f^{cmp}| = |F_{sv_i}| = |F_{v_i v_j}| = \dots = |F_{v_z t}|$ называется величиной структурированного потока.

Структурированный поток считается максимальным, если его величина максимальна из всех возможных структурированных потоков.

2. Метод поиска максимального структурированного потока

Задачу поиска максимального структурированного потока f_{\max}^{cmp} можно свести к задаче поиска маршрута с максимальной пропускной способностью.

Определение 3. Под пропускной способностью маршрута $\mu_{s,t} = (e_{sv_i}, e_{v_i v_j}, \dots, e_{v_z t})$, понимается пересечение множеств, характеризующих пропускные способности образующих его ребер:

$$C(\mu_{s,t}) = C_{sv_i} \cap C_{v_i v_j} \cap \dots \cap C_{v_z t}. \quad (1)$$

Тогда величина максимального структурированного потока $|f_{\max}^{cmp}|$, определяется как:

$$|f_{\max}^{cmp}| = \max_{\mu_{s,t}^i \in M_{s,t}} |C(\mu_{s,t}^i)|,$$

где $M_{s,t}$ – множество всех маршрутов из s в t .

Пример 1. Пусть в графе $G(V, E)$, изображенном на рис. 1, каждому ребру из множества $E = \{e_{12}, e_{23}, e_{36}, e_{14}, e_{45}, e_{56}, e_{25}\}$ присвоен вес в виде множества из целых чисел: $C_{12} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, $C_{23} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10\}$, $C_{36} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$, $C_{14} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10\}$, $C_{45} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10\}$, $C_{56} = \{5, 6, 7, 8, 9, 10\}$, $C_{25} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10\}$. Вершины v_1 и v_6 образуют полюса, между которыми необходимо найти максимальный структурированный поток. С помощью известных алгоритмов [4] найдём множество всех маршрутов между вершинами v_1 и v_6 : $\mu_{1,6}^1 = (e_{12}, e_{23}, e_{36})$, $\mu_{1,6}^2 = (e_{12}, e_{25}, e_{56})$, $\mu_{1,6}^3 = (e_{14}, e_{45}, e_{56})$, $\mu_{1,6}^4 = (e_{14}, e_{45}, e_{52}, e_{23}, e_{36})$. Пропускная способность маршрута $C(\mu_{1,6}^1)$ определяется как $C_{12} \cap C_{23} \cap C_{36}$, и представляет $C(\mu_{1,6}^1) = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. По аналогии определяются пропускные способности остальных маршрутов: $C(\mu_{1,6}^2) = \{5, 6\}$, $C(\mu_{1,6}^3) = \{5, 6, 7, 8, 9, 10\}$, $C(\mu_{1,6}^4) = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$. Наибольшей мощностью обладает множество $|C(\mu_{1,6}^1)| = 8$. Соответственно максимальный поток между вершинами v_1 и v_6 представлен множествами: $F_{14} = F_{45} = F_{52} = F_{23} = F_{36} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$ и его величина составляет $|f_{\max}^{cmp}| = 8$.

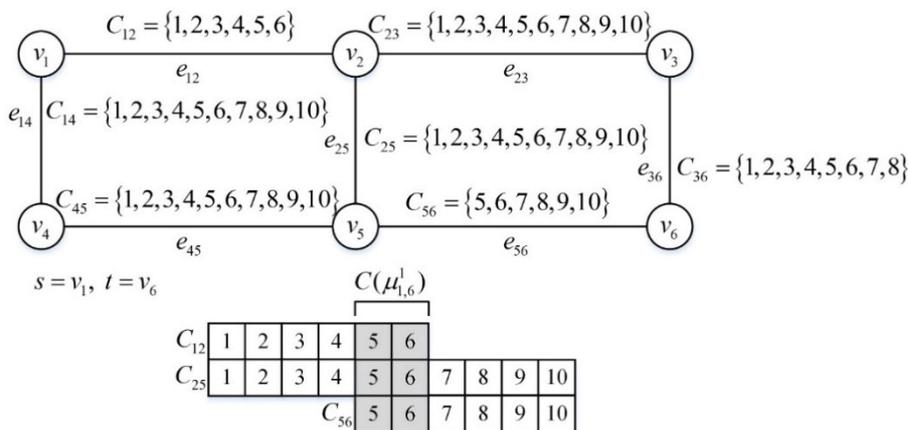


Рис. 1. Граф сети с множественными весами ребер

В общем случае, между узлами s и t в сети $G(V, E)$ можно сформировать множество структурированных потоков различной величины $\{f_m^{cmp}\}$. Два структурированных потока считаются одновременно реализуемыми, если маршруты, на основе которых они формируются не имеют общих рёбер или имеют общие ребра, но образующие их структурированные потоки по общим ребрам не имеют общих элементов.

Особый интерес представляет задача поиска такого множества одновременно реализуемых структурированных потоков, сумма величин которых является максимальной для данного графа сети с множественными весами ребер.

Определение 4. Пусть Φ – множество всех возможных структурированных потоков между узлами s и t в сети $G(V, E)$, а $F \in \Phi$ – некоторое подмножество структурированных потоков, которые могут быть реализованы одновременно. Максимальным суммарным структурированным потоком F_{\max} будем называть такое подмножество одновременно реализуемых структурированных потоков, что сумма их величин является максимальной:

$$F_{\max} = \max_{F \in \Phi} \sum_{f_m^{cmp} \in F} |f_m^{cmp}|.$$

Предлагаемый в данной статье метод поиска F_{\max} основан на решении задачи целочисленного линейного программирования (ЦЛП) и включает в себя следующие действия.

1. Поиск $M_{s,t}$ – множества всех маршрутов из s в t . Для этого могут быть использованы как традиционные известные алгоритмы обхода в глубину или в ширину, так и модифицированные: алгоритм Йена в совокупности с алгоритмами Дейкстры или A^* (A «со звездочкой») [5].

2. Определение пропускной способности каждого маршрута $\mu_{s,t}^k \in M_{s,t}$ с использованием выражения (1) и формирование множества пропускных способностей всех маршрутов из s в t :

$$C(M_{s,t}) = \{C(\mu_{s,t}^k) \mid \mu_{s,t}^k \in M_{s,t}\}.$$

3. Поиск всех возможных структурированных потоков на основе каждого маршрута $\mu_{s,t}^k \in M_{s,t}$ и формирование множества $\{f_m^{cmp}\}$.

Утверждение 1. Пусть $C(\mu_{s,t}^k)$ – пропускная способность маршрута $\mu_{s,t}^k$. Если все элементы множества $C(\mu_{s,t}^k)$ можно упорядочить таким образом, чтобы $c_{n+1} = c_n + 1, \forall n \mid c_n, c_{n+1} \in C(\mu_{s,t}^k)$,

то на основе маршрута $\mu_{s,t}^k$ можно сформировать $N_5 = \frac{|C(\mu_{s,t}^k)| \cdot (|C(\mu_{s,t}^k)| + 1)}{2}$ структурированных

потоков величины $1 \leq |f_m^{cmp}| \leq C(\mu_{s,t}^k)$. Данное утверждение основано на решении известной комбинаторной задачи о количестве отрезков в последовательности (подсчет подотрезков) [6].

Пример 2. Пусть пропускная способность маршрута $\mu_{s,t}^k$ определяется множеством $C(\mu_{s,t}^k) = \{1, 2, 3, 4\}$. На его основе возможна реализация $N_5 = 10$ потоков: $\{1\}, \{2\}, \{3\}, \{4\}, \{1, 2\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}, \{1, 2, 3\}, \{2, 3, 4\}, \{1, 2, 3, 4\}$.

4. Формирование системы ограничений на одновременную реализацию структурированных потоков.

Определим, что переменная x_m равна 1, если m -й структурированный поток реализуется в сети, и 0 в противном случае.

Система ограничений на переменные x_m формируется исходя из условия, что суммарная величина структурированных потоков через ребра не должна превышать их пропускной способности, а сами структурированные потоки не должны иметь общих элементов.

Тогда система ограничений на одновременную реализацию структурированных потоков на основе маршрута $\mu_{s,t}^k$ имеет вид:

$$A^T \cdot x \leq 1_{|C(\mu_{s,t}^k)|},$$

где: $x^T = (x_1 \ x_2 \ \dots \ x_{N_5})$ – вектор, элементами которого являются двоичные переменные x_m ,

$1_{|C(\mu_{s,t}^k)|} = \left(1_1 \ 1_2 \ \dots \ 1_{|C(\mu_{s,t}^k)|} \right)^T$ – вектор из единиц, A – матрица размерности $N_5 \times |C(\mu_{s,t}^k)|$,

строки которой соответствуют m -м потокам, а столбцы – соответствуют элементам пропускной

способности маршрута $c_d \in C(\mu_{s,t}^k)$. Элементы a_{mn} матрицы A принимают значения 1 в том случае, если для реализации m -го потока используется n -й элемент. Все остальные элементы матрицы A равны 0.

Пример 3. Для маршрута с пропускной способностью из примера 2 вектор x^T состоит из 10 элементов, а матрица A имеет вид:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

После перемножения матрицы A^T и вектора x , система ограничений на одновременную реализацию структурированных потоков в пределах маршрута представляет собой:

$$A^T \cdot x \leq 1_{|C(\mu_{s,t}^k)|} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 + x_5 + x_8 + x_{10} \leq 1 \\ x_2 + x_5 + x_6 + x_8 + x_9 + x_{10} \leq 1 \\ x_3 + x_6 + x_7 + x_8 + x_9 + x_{10} \leq 1 \\ x_4 + x_7 + x_9 + x_{10} \leq 1 \end{cases}$$

Для каждого маршрута $\mu_{s,t}^k$ необходимо сформировать матрицу A_k . Если маршруты имеют общие ребра то, система ограничений формируется с учётом дополнительных неравенств, обусловленных наличием общих элементов пропускной способности ребра, и матрицы A_k маршрутов объединяются в одну матрицу. Пусть маршруты $\mu_{s,t}^1$ и $\mu_{s,t}^2$ с пропускными способностями $C(\mu_{s,t}^1)$ и $C(\mu_{s,t}^2)$ соответственно, имеют общее ребро $e_{ij} \in E$ с пропускной способностью C_{ij} (рис. 2).

Тогда матрицы A_1 и A_2 для формирования ограничений на переменные x_m^1 и x_m^2 объединяются в матрицу ограничений A следующим образом:

1) матрицы A_1 и A_2 дополняются столбцами из нулей справа и слева соответственно так, чтобы количество столбцов в обеих матрицах было равно $|C(\mu_{s,t}^1) \cup C(\mu_{s,t}^2)|$:

$$A'_1 = [A_1 \quad 0] = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & \dots & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix},$$

$$A'_2 = [0 \quad A_2] = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 1 & 1 \end{bmatrix};$$

2) матрицы A'_1 и A'_2 объединяются по строкам (вертикальная конкатенация):

$$A = \begin{bmatrix} A'_1 \\ A'_2 \end{bmatrix}.$$

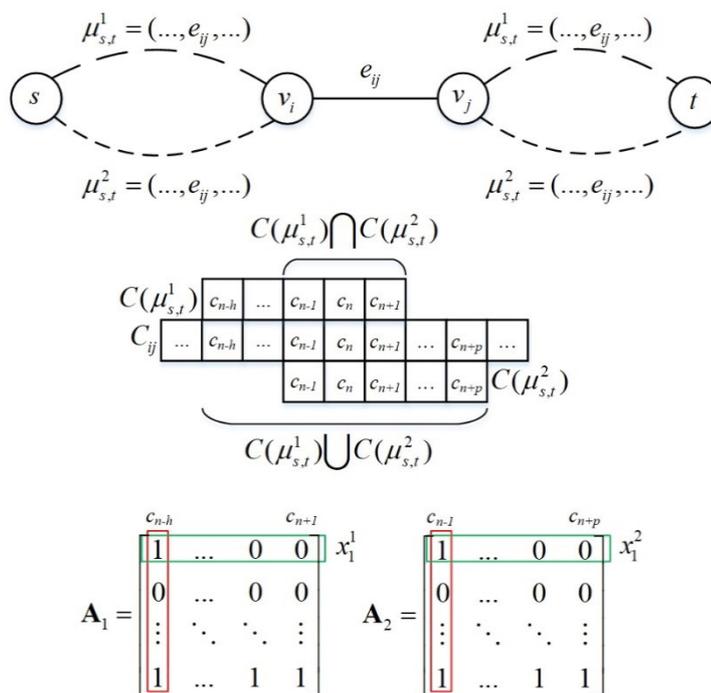


Рис. 2. Маршруты с общим ребром

Векторы переменных $x^1 = (x_1^1 \ x_2^1 \ \dots \ x_m^1)^T$ и $x^2 = (x_1^2 \ x_2^2 \ \dots \ x_m^2)^T$ также объединяются по строкам:

$$x = \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \end{pmatrix} = (x_1^1 \ x_2^1 \ \dots \ x_m^1 \ x_1^2 \ x_2^2 \ \dots \ x_m^2)^T,$$

и система ограничений, порождаемая общим ребром $e_{ij} \in E$, приобретает вид: $A^T \cdot x \leq 1$.

5. Формирование целевой функции и решение задачи целочисленного линейного программирования (ЦЛП).

Целевая функция задачи имеет вид:

$$f_0(x) = \sum_{m=1}^{N_4} x_m \cdot |f_m^{cmp}| \rightarrow \max,$$

где N_4 – количество всех возможных структурированных потоков.

Система ограничений для задачи ЦЛП формируется исходя из ограничений на одновременную реализацию структурированных потоков в сети и ограничений на целочисленность переменных:

$$A^T \cdot x \leq 1, \quad 0 \leq x \leq 1,$$

где 0 и 1 – векторы размерности x из 0 и 1 соответственно.

Пример 4. Найдем максимальный суммарный структурированный поток F_{\max} между вершинами s и t в графе, представленном на рис. 1. На основе маршрута $\mu_{1,6}^1$ с пропускной

способностью $C(\mu_{1,6}^1) = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ возможно сформировать $\frac{|C(\mu_{1,6}^1)| \cdot (|C(\mu_{1,6}^1)| + 1)}{2} = 21$

структурированных потока величиной от 1 до 6 и вектор переменных x_m имеет вид: $x^1 = (x_1^1 \ x_2^1 \ \dots \ x_{21}^1)^T$. Аналогично, на основе маршрутов $\mu_{1,6}^2$, $\mu_{1,6}^3$, и $\mu_{1,6}^4$ ($C(\mu_{1,6}^2) = \{5, 6\}$,

$C(\mu_{1,6}^3) = \{5, 6, 7, 8, 9, 10\}$, $C(\mu_{1,6}^4) = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$) возможно формирование 3, 21 и 36

структурированных потоков соответственно. Тогда векторы переменных x_m имеют вид:

$$x^2 = (x_1^2 \ x_2^2)^T, \quad x^3 = (x_1^3 \ x_2^3 \ \dots \ x_{21}^3)^T, \quad x^4 = (x_1^4 \ x_2^4 \ \dots \ x_{36}^4)^T.$$

На рис. 3 изображены возможные структурированные потоки и их величины для маршрута $\mu_{1,6}^1$.

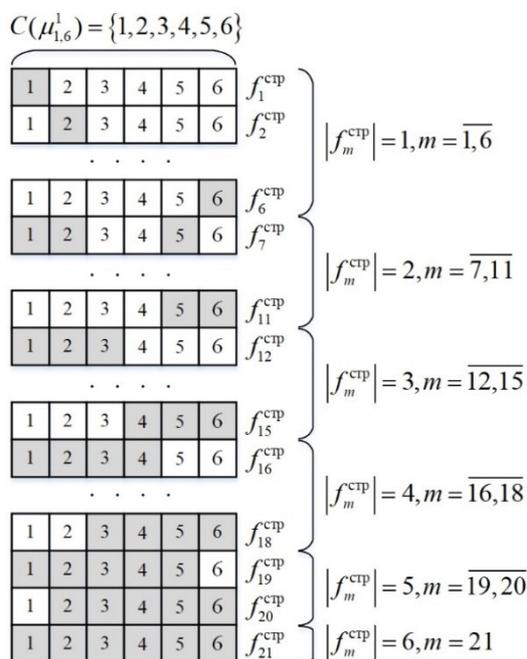


Рис. 3. Формирование структурированных потоков на основе маршрута $\mu_{1,6}^1$

Матрицы A_1 , A_2 , A_3 и A_4 для маршрутов $\mu_{1,6}^1$, $\mu_{1,6}^2$, $\mu_{1,6}^3$, и $\mu_{1,6}^4$ соответственно равны:

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix},$$

$$A_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad A_4 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Маршруты $\mu_{1,6}^1$ и $\mu_{1,6}^2$ имеют общее ребро e_{12} . Тогда матрицы A_1 и A_2 объединяются:

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ [0 \ A_2] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Маршруты $\mu_{1,6}^1$ и $\mu_{1,6}^4$ имеют общие ребра e_{23} и e_{36} . Тогда матрицы A_1 и A_4 объединяются:

$$\begin{bmatrix} [A_1 & 0] \\ A_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Аналогично объединяются матрицы: A_2 и A_3 , A_2 и A_4 , A_3 и A_4 . В итоге формируется матрица A из $21+3+21+36=81$ строки и 8 столбцов, а векторы x^1 , x^2 , x^3 и x^4 объединяются в вектор x из 81 элемента:

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}.$$

Целевая функция задачи в матричной форме имеет вид:

$$f_0(x) = x^T \cdot f^{cmp} \rightarrow \max,$$

при условии, что:

$$\begin{aligned} x^T \cdot A &\leq 1_{81}, \\ x_m &\in \{0,1\}, \end{aligned}$$

где $f^{cmp} = (|f_1^{cmp}| \quad |f_2^{cmp}| \quad \dots \quad |f_{81}^{cmp}|)^T$ – вектор, элементы которого представлены величинами структурированных потоков.

В данной постановке, с использованием известных методов, разработанных для решения задач целочисленного линейного программирования [7–8], может быть получено множество неразличимых решений, доставляющих максимальное значение целевой функции $f_0(x)$. Так, например, решение данного примера составляет $f_0(x) = 12$, и может быть получено в результате множества комбинаций, например: $x_{21}^1 = 1$, $x_{21}^3 = 1$, все остальные двоичные переменные равны 0. Тогда, $f_0(x) = 1 \cdot 6 + 1 \cdot 6 = 12$, что соответствует одновременной передаче в сети двух структурированных потоков величины $\{1,2,3,4,5,6\}$ и $\{5,6,7,8,9,10\}$ по ребрам маршрутов $\mu_{1,6}^1$ и $\mu_{1,6}^3$ соответственно. Очевидно, что точно такое же значение целевой функции можно получить при одновременной реализации в сети структурированных потоков $\{1,2,3\}$ и $\{4,5,6\}$ по ребрам маршрута $\mu_{1,6}^1$ и, например, структурированных потоков $\{5,6,7,8\}$ и $\{9,10\}$ по ребрам маршрута $\mu_{1,6}^3$. Таким образом, решения данной задачи будут лежать в некоторой гиперплоскости и представлять собой неразличимые альтернативы доставляющие значения целевой функции $f_0(x) = 12$.

3. Асимптотический анализ метода

Нахождение всех маршрутов между двумя вершинами неориентированного графа в общем случае является NP-полной задачей. Указанные ранее алгоритмы поиска в глубину и в ширину могут иметь сложность $O(|V|+|E|)$ для каждого найденного маршрута, количество которых может расти экспоненциально с увеличением размера графа и в худшем случае (например полносвязный граф) сложность будет $O(|V|!)$. Таким образом, в общем случае для графов большой размерности поиск всех маршрутов является невозможен и необходимо использовать эвристики или дополнительные ограничения, например поиск некоторого ε количества маршрутов опреде-

ленной длины с помощью алгоритма Йена, сложность которого составляет $O(\varepsilon \cdot [|V| \cdot (|E| + |V| \cdot \log |V|)])$, где $[|V| \cdot (|E| + |V| \cdot \log |V|)]$ – сложность алгоритма Дейкстры для поиска кратчайшего пути.

Определение пропускной способности каждого маршрута предполагает выполнение пересечения нескольких множеств, характеризующих пропускные способности ребер. Если маршрут $\mu_{s,t}^k$ содержит в себе η ребер, и пропускная способность каждого ребра описывается множеством элементов C_{ij} , то в худшем случае (если все множества C_{ij} для каждого ребра e_{ij} маршрута $\mu_{s,t}^k$ одинаковые и после каждого пересечения размер $\bigcap_{ij} C_{ij} \mid e_{ij} \in \mu_{s,t}^k$ не уменьшается) метод последовательного пересечения дает сложность $O(|C_{ij}| \cdot \eta)$ при условии, что проверка принадлежности элемента множеству занимает $O(1)$. Для отдельного маршрута задача определения его пропускной способности относится к классу P . Однако, для всей сети в худшем случае сложность будет составлять $O(|M_{s,t}| \cdot |C_{ij}| \cdot \bar{\eta})$, где $|M_{s,t}|$ – количество маршрутов из s в t , $\bar{\eta}$ – средняя длина маршрутов из $M_{s,t}$. Таким образом, как и в случае с поиском всех маршрутов, сложность вычисления их пропускных способностей зависит от размера графа и мощности множеств, характеризующих пропускные способности ребер. Задача определения пропускных способностей всех маршрутов является NP-полной.

Задача поиска всех возможных структурированных потоков $\{f_m^{cmp}\}$ предполагает решение задачи о количестве отрезков для каждого маршрута. Для одного маршрута при использовании наивного подхода (простой перебор) сложность составляет $O(1)$. Однако, необходимость выполнения данной операции для каждого маршрута, также, как и в случае с поиском всех маршрутов, определяется их количеством.

При формировании системы ограничений на одновременную реализацию структурированных потоков необходимо выполнить конкатенацию матриц. Сложность данной операции для двух матриц является линейной, а для общей задачи определяется количеством матриц A_k (равных количеству маршрутов) и количеством ребер в графе. Таким образом, в наихудшем случае, когда все маршруты отличаются только одним ребром, сложность составляет $O((|M_{s,t}| - 1) \cdot |E|)$ и позволяет отнести задачу к классу NP-полных.

Наконец решение задачи ЦЛП известными методами, например, методом ветвей и границ, зависит от $|\{f_m^{cmp}\}|$ и в худшем случае имеет экспоненциальную сложность $O\left(2^{|\{f_m^{cmp}\}|}\right)$ и относится к классу NP-трудных. Количество возможных структурированных потоков определяется количеством маршрутов и их пропускной способностью. Таким образом для неориентированных графов с большими значениями $|V|$, $|E|$ и $|C_{ij}|$ решение данным методом не может быть гарантировано за полиномиальное время.

Несмотря на это, ряд признаков, таких как целочисленность вектора f^{cmp} и возможность приведения матрицы ограничений A к унимодулярному виду, вселяют определенную надежду на возможность релаксации данной задачи и сведению её к задаче линейного программирования. Несмотря на это, основой метода является поиск всех маршрутов в графе, что в настоящее время не позволяет уменьшить сложность данного метода.

Заключение

Задача поиска максимального потока является классической оптимизационной задачей на графах и её решению посвящено множество работ [1–3]. Несмотря на это, особенности весов ребер, представленных в виде множеств с целочисленными элементами, а также дополнительные ограничения, обусловленные наличием у потока определённой структуры, не позволяют исполь-

зывать традиционные алгоритмы для поиска максимального структурированного потока и максимального суммарного потока в графе с множественными весами ребер.

Представленные в работе математическая модель структурированного потока и задача поиска максимального суммарного потока, сформулированная в форме целочисленного линейного программирования, хоть и выглядят довольно громоздко, однако позволяют находить строгие решения. Кроме того, корректно сформулированная задача позволяет осуществлять проверку решений, получаемых с помощью специальных алгоритмов для решения потоковых задач и их модификаций с учетом дополнительных ограничений, представленных в статье.

Известно, что многие графовые задачи могут быть сформулированы в форме задач целочисленного линейного программирования. Однако специфика структуры потоковых моделей позволяет находить более эффективные алгоритмы, на разработку которых направлены дальнейшие усилия авторского коллектива статьи.

Литература

1. Форд, Л.Р. Потоки в сетях / Л.Р. Форд, Д.Р. Фалкерсон. – М.: Мир, 1966. – 276 с.
2. Фрэнк, А. Сети, связь и потоки / А. Фрэнк, С. Фриш. – М.: Связь, 1978. – 448 с.
3. Филлипс, Д.Т. Методы анализа сетей / Д.Т. Филлипс, А. Гарсиа-Диас. – М.: Мир, 1984. – 496 с.
4. Алгоритмы построения и анализ / Т. Кормен, Ч. Лейзерсон, Р. Ривест, К. Штайн. – М.: Вильямс, 2016. – 1323 с.
5. Кристофидес, Н. Теория графов. Алгоритмический подход / Н. Кристофидес. – М.: Мир, 1978. – 432 с.
6. Грэхем, Р.Л. Конкретная математика: Основания информатики / Р.Л. Грэхем, Д.Э. Кнут, О. Паташник. – М.: Мир, 1994. – 703 с.
7. Ху, Т. Целочисленное программирование и потоки в сетях / Т. Ху. – М.: Мир, 1974. – 519 с.
8. Таха, Х.А. Введение в исследование операций / Х.А. Таха. – М.: Вильямс, 2001. – 911 с.

Поступила в редакцию 15 августа 2025 г.

Сведения об авторах

Бойко Алексей Павлович – кандидат технических наук, доцент, докторант кафедры сетей связи и систем коммутации, Военная академия связи имени Маршала Советского Союза С.М. Будённого, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация, e-mail: varenyuxa89@gmail.com.

Лунёв Артём Дмитриевич – кандидат технических наук, доцент кафедры радиоэлектроники и телекоммуникаций, Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: a.d.lunev@urfu.ru.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2026, vol. 18, no. 1, pp. 15–25*

DOI: 10.14529/mmph260102

A MODEL AND METHOD FOR FINDING THE MAXIMUM STRUCTURED FLOW IN A GRAPH WITH MULTIPLE EDGE WEIGHTS

A.P. Boyko¹, A.D. Lunev²

¹ S.M. Budyonny Military Academy of Communications, St. Petersburg, Russian Federation

² B.N. Yeltsin Ural Federal University, Yekaterinburg, Russian Federation

Abstract. This article presents a network model in the form of a graph, where the edge weights are subsets of integers that characterize the throughput and constrain the flows through the edges. A special type of flow should be formed between s and t nodes in this network. This flow is subject to additional requirements: each edge along the route from s to t should have an identical subset of adjacent ordered elements, the number of which determines the magnitude of the flow. We are interested in finding a subset of such flows that have no common elements and can be simultaneously implemented, with the sum

of their magnitudes being maximal for a given network. The presented model and method based on integer linear programming can be used to analyze the throughput of graphs with multiple edge weights.

Keywords: structured flow; multiple edge weights; network throughput.

References

1. Ford L.R., Fulkerson D.R. *Flows in Networks*. NJ.: Princeton University Press, 2024, 216 p.
2. Frank H., Frisch I. *Communication, Transmission, and Transportation Networks (Electrical Engineering Series)*. Addison Wesley, Reading, Mass., 1971, 479 p.
3. Phillips D.T., Garcia-Diaz A. *Fundamentals of Network Analysis*. NJ.: Prentice-Hall, 1981, 474 p.
4. Cormen T.H., Leiserson C.E., Rivest R.L., Stein C. *Introduction to Algorithms*. Cambridge: The MIT Press, 2002, 1296 p.
5. Christofides N. *Graph Theory: An Algorithmic Approach*. London: Academic Press, 1975, 400 p.
6. Graham R.L., Knuth D.E. *Concrete Mathematics: A Foundations of Computer Science*. Addison-Wesley Professional, 1994, 672 p.
7. Hu T.C. *Integer Programming and Network Flows*. Addison-Wesley, 1970, 452 p.
8. Taha H.A. *Operations Research: An Introduction*. Pearson, 2022.

Received August 15, 2025

Information about the authors

Boyko Aleksey Pavlovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, and Doctoral Candidate in the Department of Communication Networks and Switching Systems, Marshal of the Soviet Union S. M. Budyonny Military Academy of Communications, St. Petersburg, Russian Federation, e-mail: varenyxa89@gmail.com.

Lunev Artyom Dmitrievich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor in the Department of Radioelectronics and Telecommunications, B. N. Yeltsin Ural Federal University, Yekaterinburg, Russian Federation, e-mail: a.d.lunev@urfu.ru.

О БИФУРКАЦИЯХ НЕКОТОРЫХ СЕПАРАТРИСНЫХ КОНТУРОВ КУСОЧНО-ГЛАДКОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ С СИММЕТРИЕЙ

В.Ш. Ройтенберг

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

Аннотация. На плоскости с декартовыми координатами (x, y) рассматривается однопараметрическое семейство кусочно-гладких векторных полей, инвариантных при отражении от оси x . Через начало координат O проходит линия переключения, трансверсально оси x . Пусть при нулевом значении параметра векторное поле семейства в левой полукрестности линии переключения совпадает с гладким векторным полем, имеющим точку O грубым устойчивым узлом, а в ее правой полукрестности совпадает с гладким векторным полем без особых точек. Пусть также это поле имеет на оси x грубое седло S , для которого открытая дуга оси x между точками O и S является входящей сепаратрисой седла, а две симметричные выходящие сепаратрисы седла не содержат особых точек и идут в точку O . В работе показано, что если при положительных значениях параметра в левой полукрестности линии переключения нет особой точки, то из каждого из двух симметричных контуров, образованных сепаратрисами, рождается устойчивая, периодическая траектория. При дополнительных условиях рождающаяся периодическая траектория является единственной и гиперболической.

Ключевые слова: кусочно-гладкое векторное поле; симметрия; инвариантность; особая точка; сепаратрисный контур; бифуркация; периодическая траектория.

Введение. Предварительные сведения. Бифуркации динамических систем, задаваемыми кусочно-гладкими векторными полями изучаются уже давно и описаны, по крайней мере, для случая систем на плоскости достаточно полно (см. напр., [1–5]). Изучались и бифуркации гладких динамических систем, инвариантных относительно разных групп преобразований фазового пространства [6–11]. В работе [12] исследован ряд бифуркаций в типичных семействах кусочно-гладких векторных полей на плоскости, инвариантных относительно центральной симметрии.

В настоящей заметке описаны бифуркации в типичном однопараметрическом семействе кусочно-гладких векторных полей на плоскости, инвариантных при отражении относительно прямой, в которых рождается пара симметричных устойчивых предельных циклов.

Пусть D – разбиение \mathbf{R}^2 на множества D_k , $k \in \{1, 2, \dots, n\}$ с C^∞ -гладкими границами ∂D_k , такие, что их пересечения $D_i \cap D_j$, $i \neq j$, совпадают с $\partial D_i \cap \partial D_j$, а X^k – векторные поля класса C^r на D_k . Кусочно-гладким векторным полем на плоскости \mathbf{R}^2 , задаваемым полями X^k , называется класс всех векторных полей \tilde{X} на \mathbf{R}^2 таких, что в точках $z \in \text{int } D_k$ $\tilde{X}(z) = X^k(z)$. Будем его обозначать $X = (X^1, X^2, \dots, X^n)$. Траектории векторных полей \tilde{X} будем задавать, используя выпуклое доопределение в точках линий переключения $\partial D_i \cap \partial D_j$ [1]. Они не зависят от выбора представителя класса и потому их можно называть *траекториями поля X* .

Пусть отображение $I: \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R}^2$, $I(x, y) := (x, -y)$ сохраняет разбиение D , то есть $\forall k \in \{1, 2, \dots, n\} \exists l \in \{1, 2, \dots, n\} I(D_k) = D_l$, а границы множеств D_k не касаются множества неподвижных точек инволюции I – оси x . Кусочно-гладкое векторное поле $X = (X^1, X^2, \dots, X^n)$ назовем *инвариантным относительно I* , если $\forall k \in \{1, 2, \dots, n\} \forall z \in D_k IX^k(z) = X^l I(z)$, где $D_l = I(D_k)$. Множество таких полей обозначим $\text{Vec}^r(D, I)$.

Предположим, что $O = (0, 0) \in D^0 := D_L \cap D_R$ при некоторых $L, R \in \{1, 2, \dots, n\}$. Тогда $I(D_L) = D_L$, $I(D_R) = D_R$, $I(D^0) = D^0$ и в достаточно малой окрестности точки O G^0 задается

уравнением $z_1 = g(z_2)$, где g – четная C^∞ -гладкая функция. Перейдем к этой окрестности к координатам $x = z_1 - g(z_2)$, $y = z_2$. Инволюция I переводит точку с координатами (x, y) в точку с координатами $(x, -y)$. В окрестности $V_\delta(O)$ точки O , задаваемой в координатах (x, y) неравенствами $|x| < \delta$, $|y| < \delta$, где δ – достаточно малое положительное число, D^0 имеет уравнение $x = 0$ и можно считать, что $V_\delta(O) \cap D_L$ ($V_\delta(O) \cap D_R$) дается неравенством $x \leq 0$ ($x \geq 0$). Далее будем отождествлять точку из $V_\delta(O)$ с ее координатной строкой (x, y) .

2. Условия и результаты. Пусть разбиение D такое, как описано выше. Рассмотрим однопараметрическое семейство векторных полей $X_\mu = (X_\mu^1, \dots, X_\mu^n) \in \text{Vec}^r(D, I)$, $\mu \in (-\mu_0, \mu_0)$, такое, что векторы $X_\mu^k(z)$, $k \in \{1, 2, \dots, m\}$, C^r -гладко зависят от $(z, \mu) \in G_k \times (-\mu_0, \mu_0)$, $r \geq 3$.

Векторное поле $X_\mu^L|_{V_\delta(O) \cap D_L}$ можно продолжить до C^r -векторного поля \bar{X}_μ^L на $V_\delta(O)$, инвариантного относительно I так, что вектор $\bar{X}_\mu^L(z)$ C^r -гладко зависит от $(z, \mu) \in V_\delta(O) \times (-\mu_0, \mu_0)$ [13, с. 587]. Пусть в координатах (x, y)

$$\bar{X}_\mu^L(z) = P(x, y, \mu)\partial / \partial x + Q(x, y, \mu)\partial / \partial y.$$

Вследствие инвариантности поля \bar{X}_μ^L

$$P(x, -y, \mu) \equiv P(x, y, \mu), \quad Q(x, -y, \mu) \equiv -Q(x, y, \mu). \tag{1}$$

Пусть O – особая точка поля \bar{X}_0^L , то есть

$$P(0, 0, 0) = Q(0, 0, 0) = 0. \tag{2}$$

Ввиду (1) $P'_y(0, 0, 0) = Q'_x(0, 0, 0) = 0$ и потому $\lambda_1^0 := P'_x(0, 0, 0)$ и $\lambda_2^0 := Q'_y(0, 0, 0)$ – собственные значения матрицы линейной части в точке O . Они не зависят от произвола в выборе векторных полей \bar{X}_μ^L . Предположим, что $\lambda_k^0 < 0$ ($k = 1, 2$), то есть точка O – грубый устойчивый узел поля \bar{X}_μ^L . Знак $P'_\mu(0, 0, 0)$ зависит только от векторных полей X_μ^L . Потребуем, чтобы $P'_\mu(0, 0, 0) \neq 0$. Без ограничения общности можно считать

$$P'_\mu(0, 0, 0) > 0, \tag{3}$$

поскольку случай $P'_\mu(0, 0, 0) < 0$ сводится к случаю $P'_\mu(0, 0, 0) > 0$ заменой μ на $-\mu$.

Пусть точка $S_0 = (x_1^0, 0) \in \text{int } G_{k_s}$ ($k_s \in \{1, 2, \dots, m\}$) является грубым седлом векторного поля $X_0^{k_s}$ с характеристическими показателями $\lambda_{10}^S > 0$ и $\lambda_{20}^S < 0$, открытая дуга L_0^{in} оси x между точками O и S_0 не содержит особых точек поля X_0 и является входящей сепаратрисой седла S_0 , а выходящие сепаратрисы L_0^+ и $L_0^- = I(L_0^+)$ точки S_0 , лежащие, соответственно, в верхней и нижней полуплоскостях, не содержат особых точек поля X_0 и ω -предельны к O (рис. 1).

Сепаратрисные контуры $\Gamma_0^\pm := L_0^{\text{in}} \cup L_0^\pm \cup \{O, S_0\}$ симметричны: $I(\Gamma_0^\pm) = \Gamma_0^\mp$, и образуют полицикл $\Gamma_0 := \Gamma_0^+ \cup \Gamma_0^-$.

Будем рассматривать два варианта:

(А) Выполняется условие $P''_{yy}(0, 0, 0) < 0$.

(Б) Ось x – ведущее направление узла O , то есть $\lambda_2^0 < \lambda_1^0$.

Сепаратрисы L_0^+ и L_0^- входят в O по ведущему направлению.

Седловой индекс $\gamma_0 := -\lambda_{20}^S / \lambda_{10}^S \neq 1$.

Теорема. В случаях (А) и (Б) найдутся число $\bar{\mu} \in (0, \mu_0]$ и окрестность U полицикла Γ_0 , $I(U) = U$, со следующими свойствами:

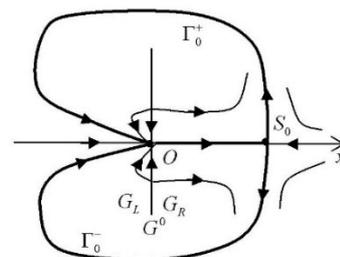


Рис. 1. Полицикл $\Gamma_0 := \Gamma_0^+ \cup \Gamma_0^-$

1) Для любого $\mu \in (0, \bar{\mu})$ векторное поле X_μ имеет в U две орбитно устойчивые периодические траектории: Γ_μ^+ , лежащую в верхней полуплоскости, и $\Gamma_\mu^- = I(\Gamma_\mu^+)$, лежащую в нижней полуплоскости, а их топологические пределы $\lim_{\mu \rightarrow 0^+} \Gamma_\mu^\pm = \Gamma_0^\pm$. В случае (Б) Γ_μ^+ и Γ_μ^- являются гиперболическими периодическими траекториями, а в U нет других периодических траекторий.

2) При $\mu \in (-\bar{\mu}, 0]$ у векторного поля X_μ в U нет периодических траекторий.

Доказательство теоремы приведено в разделах 3–4.

3. Случай (А). По теореме о неявной функции из (1)–(3) следует, что при некотором $\mu_1 > 0$ для всех $\mu \in (-\mu_1, \mu_1)$ векторное поле \bar{X}_μ^L имеет грубый устойчивый узел O_μ с координатами $x = \xi(\mu)$, $y = 0$, где

$$\xi(\cdot) \in C^r, \quad \text{sgn } \xi(\mu) = \text{sgn } \mu, \quad (4)$$

с матрицей линейной части поля в точке O_μ равной $\text{diag}(\lambda_1(\mu), \lambda_2(\mu))$, где $\lambda_1(\mu) := P'_x(\xi(\mu), 0, \mu)$ и $\lambda_2(\mu) := Q'_y(\xi(\mu), 0, \mu)$.

Ввиду (1) $Q(x, 0, \mu) = 0$, и потому $Q(x, y, \mu) = y(\lambda_2(\mu) + r_1(x - \xi(\mu), y, \mu))$, где $r_1 \in C^1$, $r_1(0, 0, \mu) = 0$. Следовательно, числа $d \in (0, \delta]$, $\mu_2 \in (0, \mu_1]$ можно выбрать так, что

$$Q(x, y, \mu) \leq (\lambda_2^0 / 2)y \text{ при } |x| \leq d, \quad 0 < y \leq d, \quad \mu \in (-\mu_2, \mu_2). \quad (5)$$

Линейная часть функции $P(x, y, 0)$ равна $\lambda_1^0 x$. Поэтому можно считать, что $P(-d, y, 0) > 0$ при всех $y \in [-d, d]$. Фиксировав d , мы можем выбрать $\mu_3 \in (0, \mu_2]$ так, что

$$P(-d, y, \mu) > 0 \text{ при всех } y \in [-d, d], \quad \mu \in (-\mu_3, \mu_3). \quad (6)$$

Вследствие (1) $P(0, \cdot, \mu)$ – четная функция, и потому

$$P(0, y, \mu) = P(0, 0, \mu) + y^2 [P''_{yy}(0, 0, 0) + R(y, \mu)], \quad (7)$$

где $R \in C^1$, $R(0, 0) = 0$. Отсюда, из (2) и (3) следует, что уравнение $P(0, y, \mu) = 0$ имеет решения только при $\mu \geq 0$. При $y \geq 0$ оно равносильно уравнению $y\sqrt{-P''_{yy}(0, 0, 0) + R(y, \mu)} = \sqrt{P(0, 0, \mu)}$.

Перепишем его в виде

$$y\sqrt{-P''_{yy}(0, 0, 0) - \nu} + R_1(y, \nu) = 0, \quad (8)$$

где $\nu = \sqrt{\mu}$, а $R_1(y, \nu)$ – C^1 -функция, определенная в некоторой окрестности точки $(0, 0)$, $R_1(0, 0) = (R_1)'_y(0, 0) = (R_1)'_\nu(0, 0) = 0$. По теореме о неявной функции найдутся такое число $\mu_4 \in (0, \mu_3]$, что для любого $\nu \in (-\sqrt{\mu_4}, \sqrt{\mu_4})$ уравнение (8) имеет решение

$$y = \hat{y}(\nu) = \nu \sqrt{-P'_\mu(0, 0, 0) / P''_{yy}(0, 0, 0) + o(\nu)}.$$

Выбрав μ_4 достаточно малым, получим

$$0 < \hat{y}(\sqrt{\mu}) \leq K\sqrt{\mu} < d/2 \text{ при } \mu \in (0, \mu_4), \quad (9)$$

где $K = 2\sqrt{-P'_\mu(0, 0, 0) / P''_{yy}(0, 0, 0)}$. Следовательно, при $\mu \in [0, \mu_4]$ $\hat{y}(\sqrt{\mu})$ – решение уравнения $P(0, y, \mu) = 0$. Ввиду (2) и (7) можно считать $P'_y(0, y, \mu) < 0$ при $y \in (0, d]$, $\mu \in [0, \mu_4)$. Поэтому

$$\text{sgn } P(0, y, \mu) = \text{sgn}(\hat{y}(\sqrt{\mu}) - y) \text{ при всех } y \in (0, d], \quad \mu \in [0, \mu_4). \quad (10)$$

Пусть $d/2 < d_1 < d$. Обозначим множество точек из $V_\delta(O) \cap G_L$ с координатами $(x, y) \in [-d, 0] \times (0, d_1]$ символом Π , с координатами $(x, y) \in (-d, 0) \times \{d_1\}$ символом l_1 и с координатами $(x, y) \in \{-d\} \times (0, d_1)$ символом l_2 . Ввиду (5) и (6) d_1 можно считать выбранным так, что траектория L_0^+ пересекает границу Π в единственной точке, принадлежащей одной из дуг l_1 или l_2 , трансверсально этой дуге. Для определенности, пусть эта точка принадлежит l_1 и имеет координаты $x = u_0$, $y = d_1$. Случай, когда точка принадлежит l_2 , рассматривается аналогично.

При достаточно малом μ_4 поле X_μ^{ks} , $\mu \in (-\mu_4, \mu_4)$, имеет грубое седло $S(\mu)$ с координатами $x_2 = 0$, $x_1 = \hat{x}_1(\mu)$, $\hat{x}_1(\cdot) \in C^r$, $\hat{x}_1(0) = x_0$ и характеристическими показателями $\lambda_1^S(\mu) > 0$ и $\lambda_2^S(\mu) < 0$, C^{r-1} -гладко зависящими от μ .

Пусть G_ε^0 – дуга G^0 , задаваемая в координатах (x, y) неравенством $0 < y \leq \varepsilon$. Поскольку сепаратриса L_0^+ не содержит особых точек, то из [14, п. 13.8] следует, что при достаточно малых ε и μ_4 траектория поля X_μ , $\mu \in (-\mu_4, \mu_4)$, начинающаяся в точке G_ε^0 с координатой $y = v \in (0, \varepsilon]$, пересекает дугу l_1 в точке с координатой $x = \psi(v, \mu)$, где

$$x = \psi(v, \mu) = \hat{u}(\mu) + c(\mu)v^{\gamma(\mu)} + \rho(v, \mu), \tag{11}$$

$$\hat{u}(\cdot), c(\cdot) \in C^1, \hat{u}(0) = u_0, \gamma(\mu) = -\frac{\lambda_2^S(\mu)}{\lambda_1^S(\mu)} > 0, |\rho(v, \mu)| \leq v^{\gamma(\mu)+\alpha}, |\rho'_v(v, \mu)| \leq v^{\gamma(\mu)+\alpha-1}, 0 < \alpha < 1. \tag{12}$$

Доопределим $\psi(v, \mu)$ при $v = 0$, положив $\psi(0, \mu) := \hat{u}(\mu)$. Из (11) и (12) получаем, что ε и $\bar{\mu} \in (0, \mu_4]$ можно выбрать столь малыми, что

$$\psi(v, \mu) \in (-d, 0) \text{ для всех } v \in [0, \varepsilon], \mu \in (-\bar{\mu}, \bar{\mu}). \tag{13}$$

Из (5), (6), (10), (9) и свойств функции соответствия по траекториям между дугами без контакта [15, с. 81] следует, что положительная полутраектория поля X_μ^L , $\mu \in (0, \mu_4)$, начинающаяся в точке дуги l_1 с координатами $x = u \in (-d, 0)$, $y = d_1$ трансверсально пересекает дугу $x = 0$ в точке с координатой $y = \varphi(u, \mu)$, где $\varphi \in C^r$, $\varphi'_u(u, \mu) > 0$, $0 < \varphi(u, \mu) < \hat{\eta}(\sqrt{\mu}) \leq K\sqrt{\mu}$.

Выберем $0 < \bar{\mu} < \varepsilon^2 / K^2$. Тогда

$$0 < \varphi(u, \mu) < \varepsilon \text{ при всех } u \in (-d, 0), \mu \in (0, \bar{\mu}). \tag{14}$$

Из (13) и (14) получаем, что при $\mu \in (0, \bar{\mu})$ определена функция $f(\cdot, \mu) := \varphi(\psi(\cdot, \mu), \mu)$, отображающая $[0, \varepsilon]$ в $(0, \varepsilon)$. Она имеет хотя бы одну устойчивую неподвижную точку

$$v_0(\mu) \in (0, K\sqrt{\mu}) \subset (0, \varepsilon). \tag{15}$$

Поскольку $f(v, \mu)$ при $v \in (0, \varepsilon)$ является функцией последования по траекториям поля X_μ на G_ε^0 , то через точку G_ε^0 с координатой $y = v_0(\mu)$ проходит единственная траектория Γ_μ^+ , причем она орбитно устойчива. Поскольку число ε можно выбрать произвольно, то из (14) следует, что

$$\lim_{\mu \rightarrow 0^+} \Gamma_\mu^+ = \Gamma_0^+.$$

При $\mu \in (-\bar{\mu}, 0]$ из (4) вытекает, что поле X_μ имеет в Π особую точку O_μ , к которой ω -предельны все траектории, начинающиеся в Π .

Построим простые замкнутые кривые γ_μ^+ , γ_μ^- и γ_μ^{ext} , $\mu \in (-\bar{\mu}, \bar{\mu})$, следующим образом. Кривая γ_μ^+ состоит из дуги траектории поля X_μ между точками $A_1^+ \in G_\varepsilon^0$ с координатой $\eta = \varepsilon$ и точкой $A_2^+ \in l_1$, а также дуги $\partial\Pi$ между этими точками (рис. 2). Кривая $\gamma_\mu^- = I(\gamma_\mu^+)$. Мы можем выбрать точки B_1^+ в верхней полуплоскости и точку B_1^0 на оси x так, чтобы отрезок $[B_1^0 B_1^+]$ был трансверсален траекториям векторных полей X_μ^S при всех $\mu \in (-\bar{\mu}, \bar{\mu})$, а положительные полутраектории поля X_μ , начинающиеся в точках $[B_1^0 B_1^+] \setminus B_1^0$, пересекали трансверсально дугу l_1 . Пусть $\widehat{B_1^+ B_2^+}$ – дуга полутраектории траектории, начинаю-

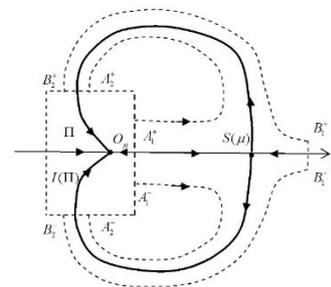


Рис. 2. Окрестность U_μ

щейся в точке B_1^+ , с концом $B_2^+ \in l_1$. Составим γ_μ^{ext} из дуг $[B_1^0 B_1^+]$, $[B_1^0 B_1^-] = I[B_1^0 B_1^-]$, $\overline{B_1^- B_2^-} = I(\overline{B_1^+ B_2^+})$, а также из дуги границы $\Pi \cup I(\Pi)$ между точками B_2^+ и $B_2^- = I(B_2^+)$.

Множество $\gamma_\mu^+ \cup \gamma_\mu^+ \cup \gamma_\mu^{\text{ext}}$ является границей ∂U_μ области U_μ . Область U_0 является окрестностью полицикла Γ_0 . Расстояние между Γ_0 и ∂U_0 – положительная величина, которую обозначим ρ_0 . Считая $\bar{\mu}$ достаточно малым, будем иметь расстояние между ∂U_μ и Γ_0 большим $\rho_0 / 2$ при всех $\mu \in (-\bar{\mu}, \bar{\mu})$. Но тогда U_μ – окрестность Γ_0 .

Пусть U – $\rho_0 / 2$ -окрестность Γ_0 . Она содержится в U_μ , $\mu \in (-\bar{\mu}, \bar{\mu})$. При $\mu \in (-\bar{\mu}, 0]$ все положительные полутраектории, начинающиеся в U_μ , отличные от седла $S(\mu)$, ω -предельны к O_μ и потому в U нет периодических траекторий векторных полей X_μ , $\mu \in (-\bar{\mu}, 0]$. Поскольку

$\lim_{\mu \rightarrow 0^+} \Gamma_\mu^+ = \Gamma_0^+$, то можно считать, что при выбранном $\bar{\mu}$ $\Gamma_\mu^\pm \subset U$ для $\mu \in (0, \bar{\mu})$. Других периодических траекторий в U_μ , а потому и в U нет.

4. Случай (Б). Как и в случае (А) векторное поле \bar{X}_μ^L , $\mu \in (0, \mu_1)$ имеет грубый устойчивый узел O_μ с координатами $x = \xi(\mu) > 0$, $y = 0$. Для $d \in (0, \delta)$ определено множество

$$K_d^\mu := \{(x, y) \in V_\delta(O) : -d \leq x < \xi(\mu), 0 \leq y \leq \xi(\mu) - x\}.$$

Поскольку $\text{diag}(\lambda_1(\mu), \lambda_2(\mu))$ – матрица линейной части поля в точке O_μ , а по условию (Б)

$$\frac{\lambda_2(0)}{\lambda_1(0)} = \frac{\lambda_2^0}{\lambda_1^0} > 1, \text{ то, выбрав достаточно малые } \mu_2 \in (0, \mu_1] \text{ и } d, \text{ можно считать, что при } \mu \in (0, \mu_2)$$

$$P(x, y, \mu) > 0 \text{ для } (x, y) \in K_d^\mu, Q(x, y, \mu) / P(x, y, \mu) < -1 \text{ для } (x, y) \in K_d^\mu, y = \xi(\mu) - x. \quad (16)$$

Рассмотрим в K_d^μ дифференциальное уравнение

$$y' = R(x, y, \mu), \text{ где } R(x, y, \mu) := Q(x, y, \mu) / P(x, y, \mu).$$

Ввиду (16) оно имеет решение $Y(x, u, \mu)$, $-d \leq x < \xi(\mu)$, удовлетворяющее начальному условию $Y(-d, u, \mu) = v$. Вследствие (1) $Y(-d, 0, \mu) \equiv 0$. Дуга $y = Y(x, u, \mu)$, $-d \leq x < 0$ – пересечение с K_d^μ траектории поля X_μ^L . Поэтому $\varphi(\cdot, \mu) := Y(0, \cdot, \mu)$ является функцией соответствия по траекториям векторных полей X_μ^L и X_μ между дугами $l_-^\mu := \{(x, y) \in K_d^\mu : x = -d\}$ и $l_0^\mu := \{(x, y) \in K_d^\mu : x = 0, 0 \leq y \leq \xi(\mu)\}$.

Ввиду (3) найдутся числа α_L и α_R такие, что

$$1 < \alpha_L < \lambda_2^0 / \lambda_1^0 < \alpha_R, \alpha_L > \alpha_R(1 - \gamma_0). \quad (17)$$

Аналогично лемме из [5] доказывается, что μ_2 и d можно считать столь малыми, что для всех $-d \leq x < 0$, $\mu \in (0, \mu_2)$.

$$\varphi(u, \mu) \geq [\xi(\mu)]^{\alpha_R}, [\xi(\mu)]^{\alpha_R} \leq \varphi'_u(u, \mu) \leq [\xi(\mu)]^{\alpha_L}. \quad (18)$$

Как и в случае (А) при достаточно малом $\mu_3 \in (0, \mu_2]$ поле X_μ^{kS} , $\mu \in (-\mu_3, \mu_3)$, имеет грубое седло $S(\mu)$ с характеристическими показателями $\lambda_1^S(\mu) > 0$ и $\lambda_2^S(\mu) < 0$, C^{r-1} -гладко зависящими от μ .

Поскольку сепаратриса L_0^+ входит в точку O по направлению оси x , то число d можно считать выбранным так, что L_0^+ пересекает дугу l_-^0 в ее внутренней точке. Так как L_0^+ не содержит особых точек, то числа $\varepsilon > 0$ и $\mu_4 \in (0, \mu_3]$ можно выбрать так, что траектория поля X_μ ,

$\mu \in (0, \mu_4)$, начинающаяся в точке дуги l_0^μ с координатой $y = v \in (0, \xi(\mu)]$ пересекает дугу l_-^μ в точке с координатой $x = \psi(v, \mu)$, где ψ удовлетворяет условиям (11) и (12).

Для любого $\mu \in (0, \mu_4)$ определена функция последования $f(\cdot, \mu) := \varphi(\psi(\cdot, \mu), \mu)$ и функция расхождения $d(v, \mu) := f(v, \mu) - v$, производная которой

$$d'_v(v, \mu) = \varphi'_u(\psi(v, \mu), \mu) \psi'_v(v, \mu) - 1. \quad (19)$$

Из (11) получаем

$$\psi'_v(v, \mu) = v^{\gamma(\mu)-1} \gamma(\mu) c(\mu) + \rho'_v(v, \mu). \quad (20)$$

По условию (Б) $\gamma(0) = \gamma_0 \neq 1$. Если $\gamma(0) > 1$, то из (20) и (12) следует, что μ_4 можно считать столь малым, что $0 < \psi'_v(v, \mu) \leq 1$ для всех $\mu \in (0, \mu_4)$, $v \in (0, \xi(\mu)]$. Отсюда, из (18), (4) и (19) получаем, что при некотором $\bar{\mu} \in (0, \mu_4]$ $d'_v(v, \mu) < 0$ для всех $\mu \in (0, \bar{\mu})$, $v \in (0, \xi(\mu)]$. Поскольку $d(0, \mu) > 0$, $d(\xi(\mu), \mu) < 0$, то $d(\cdot, \mu)$ имеет единственный нуль $v_0(\mu) \in (0, \xi(\mu))$. Соответственно, дугу l_0^μ пересекает единственная периодическая траектория Γ_μ^+ ; она устойчивая и гиперболическая.

В случае $\gamma(0) < 1$, выбрав μ_4 достаточно малым, при $\mu \in (0, \mu_4)$ будем иметь $0 < 1 - \gamma(\mu) < 1$

и $v_*(\mu) := \frac{1}{(2c(0))^{1-\gamma(\mu)} [\xi(\mu)]^{1-\gamma(\mu)}} \in (0, \xi(\mu))$. Из (17)–(20) получаем, что при некотором $\bar{\mu} \in (0, \mu_4]$

$$d(v, \mu) \geq [\xi(\mu)]^{\alpha_R} - [\xi(\mu)]^{\frac{\alpha_L}{1-\gamma(\mu)}} > 0 \text{ для всех } v \in (0, v_*(\mu)), \mu \in (0, \bar{\mu}).$$

$$d'_v(v, \mu) \leq [\xi(\mu)]^{\alpha_L} 2c(0)\gamma(0)(v_*(\mu))^{\gamma(\mu)-1} - 1 \leq \gamma(0) - 1 < 0 \text{ для всех } v \in [v_*(\mu), \xi(\mu)], \mu \in (0, \bar{\mu}).$$

Из этих неравенств следует, что $d(\cdot, \mu)$ имеет единственный нуль $v_0(\mu)$; он принадлежит интервалу $(v_*(\mu), \xi(\mu))$ и $d'_v(v_0(\mu), \mu) < 0$. Тем самым, дугу l_0^μ пересекает единственная периодическая траектория Γ_μ^+ ; она устойчивая и гиперболическая.

Окрестность U выбирается так же, как и в случае (А).

Литература

1. Филиппов, А.Ф. Дифференциальные уравнения с разрывной правой частью / А.Ф. Филиппов. – М.: Наука, 1985. – 224 с.
2. Piecewise Smooth Dynamical Systems / M. di Bernardo, Ch.J. Budd, A.R. Caprney, P. Kowalczyk. – Appl. Math. Sci., Vol. 163. London: Springer-Verlag, 2008. – 482 p.
3. Guardia, M. Generic Bifurcations of Low Codimension of Planar Filippov Systems / M. Guardia, T.M. Seara, M.A. Teixeira // J. of Differential Equations. – 2011. – Vol. 250, no. 4. – P. 1967–2023.
4. Simpson D.J.W. A Compendium of Hopf-like Bifurcations in Piecewise-Smooth Dynamical Systems / D.J.W. Simpson // Physics Letters A. – 2018. – Vol. 382, no. 35. – P. 2439–2444.
5. Ройтенберг, В.Ш. О рождении замкнутых траекторий из двух петель сепаратрис сшитого седло-узла, проходящих через развилку / В.Ш. Ройтенберг // Вестник Адыгейского государственного университета. Серия: Естественно-математические и технические науки. – 2023. – № 3. – С. 11–20.
6. Жолондек, Х. О версальности одного семейства симметричных векторных полей на плоскости / Х. Жолондек // Математический сборник. – 1983. – Т. 120(162), № 4. – С. 473–499.
7. Golubitsky, M. Singularities and Groups in Bifurcation Theory / M. Golubitsky, D. Shaeffer, I. Stewart. – NY.: Springer-Verlag, 1985. – 466 p.
8. Николаев, Е.В. Бифуркации предельных циклов дифференциальных уравнений, допускающих инволютивную симметрию / Е.В. Николаев // Математический сборник. – 1995. – Т. 186, № 4. – С. 143–160.
9. Шноль, Э.Э. Правильные многогранники и бифуркации симметричных положений равновесия обыкновенных дифференциальных уравнений / Э.Э. Шноль // Математический сборник. – 2000. – Т. 191, № 8. – С. 141–157.

10. Ройтенберг, В.Ш. Бифуркации полицикла, образованного двумя петлями сепаратрис негрубого седла динамической системы с центральной симметрией / В.Ш. Ройтенберг // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2021. – Т. 13, №3. – С. 39–46.

11. Ройтенберг, В.Ш. О бифуркациях сепаратрисных контуров векторных полей на плоскости с инволютивной симметрией / В.Ш. Ройтенберг // Прикладная математика & Физика. – 2024. – Т. 56, № 1. – С. 5–12.

12. Ройтенберг, В.Ш. О бифуркациях периодической траектории «восьмерка» кусочно-гладкого векторного поля с симметрией / В.Ш. Ройтенберг // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 3. – С. 98–113.

13. Фихтенгольц, Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. Том 1 / Г.М. Фихтенгольц. – Т. 1. – М., СПб.: Физматлит, Нев. диалект, 2001. – 679 с.

14. Методы качественной теории в нелинейной динамике. Часть 2 / Л.П. Шильников, А.Л. Шильников, Д.В. Тураев, Л. Чуа. – Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», ИКИ, 2019. – 548 с.

15. Качественная теория динамических систем второго порядка / А.А. Андронов, Е.А. Леонтович, И.И. Гордон, А.Г. Майер. – М.: Наука, 1966. – 568 с.

Поступила в редакцию 2 октября 2025 г.

Сведения об авторе

Ройтенберг Владимир Шлеймович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра «Высшая математика и физика», Ярославский государственный технический университет, г. Ярославль, Российская Федерация, e-mail: vroitenberg@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1293-7998>.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2026, vol. 18, no. 1, pp. 26–33*

DOI: 10.14529/mmph260103

ON BIFURCATIONS OF CERTAIN SEPARATRIX CONTOURS OF A PIECEWISE-SMOOTH DYNAMICAL SYSTEM WITH SYMMETRY

V.Sh. Roitenberg

Yaroslavl State Technical University, Yaroslavl, Russian Federation

E-mail: vroitenberg@mail.ru

Abstract. This article considers a one-parameter family of piecewise-smooth vector fields that are invariant under reflection from the x -axis on a plane with Cartesian coordinates (x, y) . The switching line passes through the origin O , transversally to the x -axis. For a zero value of the parameter, let the vector field of the family in the left half-neighborhood of the switching line coincide with a smooth vector field that has the O point as a rough stable node, and in its right half-neighborhood it coincides with a smooth vector field without singular points. Let this field also have a rough saddle S on the x -axis such that the open arc of the x -axis between the O and S points is an incoming separatrix of the saddle, and the two symmetric outgoing separatrices of the saddle do not contain any singular points and lead to the O point. The article demonstrates that if there is no singular point in the left semi-neighborhood of the switching line for the positive values of the parameter, then a unique, stable, periodic trajectory arises from each of the two symmetrical contours formed by the separatrices. Under certain additional conditions, the emerging periodic trajectory is unique and hyperbolic.

Keywords: *piecewise-smooth vector field; symmetry; invariance; singular point; separatrix contour; bifurcation, periodic trajectory.*

References

1. Filippov A.F. *Differentsial'nye uravneniya s razryvnoy pravoy chast'yu* (Differential Equations with Discontinuous Right-Hand Side). Moscow, Nauka Publ., 1985, 224 p. (in Russ.).

2. di Bernardo M., Budd Ch.J., Capneys A.R., Kowalczyk P. *Piecewise smooth dynamical systems*. Appl. Math. Sci. V. 163. London: Springer-Verlag, 2008, 482 p. DOI: 10.1007/978-1-84628-708-4
3. Guardia M., Seara T.M., Teixeira M.A. Generic Bifurcations of Low Codimension of Planar Filippov Systems. *J. of Differential Equations*, 2011, Vol. 250, no. 4, pp. 1967–2023. DOI: 10.1016/j.jde.2010.11.0163.
4. Simpson D.J.W. A Compendium of Hopf-Like Bifurcations in Piecewise-Smooth Dynamical Systems. *Physics Letters A*, 2018, vol. 382, no. 35, pp. 2439–2444. DOI: 10.1016/j.physleta.2018.06.004
5. Roitenberg V.Sh. On the Generation of Closed Trajectories from Two Separatrix Loops of a Sewn Saddle-Node Passing Through a Fork. *Bulletin of Adyge State University. Series: Natural-Mathematical and Technical Sciences*, 2023, Iss. 3 (326), pp. 11–20. (in Russ). DOI: 10.53598/2410-3225-2023-3-326-11-20.
6. Zholondek H. On the Versality of a Family of Symmetric Vector Fields on the Plane. *Mathematics of the USSR-Sbornik*, 1984, Vol. 48, Iss. 2, pp. 463–492. DOI: 10.1070/SM1984v048n02ABEH002686
7. Golubitsky M., Shaeffer D., Stewart I. *Singularities and Groups in Bifurcation Theory*, NY.: Springer-Verlag, 1985, 466 p. DOI: 10.1007/978-1-4612-5034-0
8. Nikolaev E.V. Bifurcations of Limit Cycles of Differential Equations Admitting an Involution Symmetry. *Sbornik: Mathematics*, 1995, Vol. 186, Iss. 4, pp. 611–627. DOI: 10.1070/SM1995v186n04ABEH000033
9. Shnol' È.È. Regular Polyhedra and Bifurcations of Symmetric Equilibria of Ordinary Differential Equations. *Sbornik: Mathematics*, 2000, Vol. 191, Iss. 8, pp. 1243–1258. DOI: 10.1070/sm2000v191n08ABEH000503
10. Roitenberg V.Sh. Bifurcations of a Polycycle Formed by Two Separatrix Loops of a Non-Rough Saddle of a Dynamical System with Central Symmetry. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Mathematics. Mechanics. Physics"*, 2021, Vol. 13, no. 3, pp. 39–46. (in Russ.). DOI: 10.14529/mmph210305.
11. Roitenberg V.Sh. On Bifurcation of Separatrix Contours of Planar Vector Fields with Involution Symmetry. *Applied Mathematics & Physics*, 2024, Vol. 56, no. 1, pp. 5–12. (in Russ.) DOI: 10.52575/2687-0959-2024-56-1-5-12
12. Roitenberg V.Sh. On Bifurcations of the “Figure-Eight” Periodic Trajectory of a Piecewise Smooth Vector Field with Symmetry. *University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*, 2020, no. 3, pp. 98–113. (in Russ.). DOI 10.21685/2072-3040-2020-3-8.
13. Fikhtengol'ts G.M. *Kurs differentsial'nogo i integral'nogo ischisleniya. Tom 1* (Differential and Integral Calculus Course). Moscow, Saint Petersburg, Fizmatlit Publ., Nev. dialekt Publ., 2001, Vol. 1, 679 p. (in Russ.).
14. Shilnikov L.P., Shilnikov A.L., Turaev, D., Chua L.O. *Methods of Qualitative Theory in Nonlinear Dynamics: Part 2*, World Sci. Ser. Nonlinear Sci. Ser. A Monogr. Treatises, Vol. 5, River Edge, N.J.: World Sci., 2001. DOI: 10.1142/4221
15. Andronov A.A., Leontovich E.A., Gordon I.I., Maier A.G. *Qualitative Theory of Second-Order Dynamic Systems*. Halsted Press [A division of John Wiley & Sons] and Israel Program for Scientific Translations, New York-Toronto, Ont. and Jerusalem-London, 1973, 548 p.

Received October 2, 2025

Information about the author

Roitenberg Vladimir Shlyemovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Higher Mathematics and Physics, Yaroslavl State Technical University, Yaroslavl, Russian Federation. e-mail: vroitenberg@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1293-7998>.

ЗАДАЧА ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С УСЛОВИЯМИ ПЕРИОДИЧНОСТИ И С УПРАВЛЕНИЕМ ПРИ РЕШЕНИИ

Р.К. Тагиев, А.К. Мамедова

Бакинский государственный университет, г. Баку,

Азербайджанская Республика

E-mail: r.tagiyev@list.ru, amamedova0209@mail.ru

Аннотация. Задачи оптимального управления для эллиптических уравнений при классических граничных условиях изучены достаточно полно. Однако эти задачи при условиях периодичности исследованы существенно слабее. В настоящей статье рассматривается задача оптимального управления для эллиптического уравнения с условиями периодичности. Управляющая функция является коэффициент при решении эллиптического уравнения и принадлежит пространству Лебега с конечным индексом суммируемости. Решение краевой задачи для эллиптического уравнения определяется как обобщенное решение из пространства Соболева. Исследованы вопросы корректности рассматриваемой задачи оптимального управления, получена формула для градиента целевого функционала и установлено необходимое условие для оптимальности управления.

Ключевые слова: оптимальное управление; эллиптическое уравнение; условие периодичности; корректность задачи; необходимое условие оптимальности.

Введение

Задачи оптимального управления для эллиптических уравнений при классических граничных условиях изучены в работах [1–6] и др. Однако эти задачи при граничных условиях периодичности исследованы существенно слабее [7, 8]. Задачи оптимального управления для эллиптических уравнений с периодическими краевыми условиями встречаются в различных областях, таких как инженерия, физика, медицина и другие. Эти задачи обычно связаны с управлением или оптимизацией физических процессов, и периодические краевые условия используются для моделирования повторяющихся процессов или условий. Они также находят применение в обратных задачах, например, медицинской визуализации и геофизической разведке, а также в оптимальном проектировании форм и управлении распределением нагрузок. [9, 10].

В настоящей работе изучается задача оптимального управления для эллиптического уравнения с условиями периодичности. Исследованы вопросы корректности постановки рассматриваемой задачи, получена формула для градиента целевого функционала и установлено необходимое условие оптимальности.

1. Постановка задачи и его корректность

Пусть $\Omega = \{x = (x_1, \dots, x_n) \in R^n : 0 < x_i < l_i, (i = \overline{1, n})\}$ - параллелепипед в R_n . Рассмотрим следующую задачу оптимального управления для эллиптического уравнения: требуется минимизировать функционал

$$J(v) = \int_{\Omega} |u(x, v) - u_0(x)|^2 dx \quad (1)$$

на множестве

$$V = \{v = v(x) \in L_s(\Omega) : \mu_1 \leq v(x) \leq \mu_2 \text{ п.в. на } \Omega\} \quad (2)$$

при условиях, что $u = u(x) = u(x, v)$ является решением краевой задачи

$$-\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) + v(x)u = f(x), \quad x \in \Omega, \quad (3)$$

$$u|_{x_i=0} = u|_{x_i=l_i}, \quad i = \overline{1, n}, \quad (4)$$

$$k(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \Big|_{x_i=0} = k(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \Big|_{x_i=l_i}, \quad i = \overline{1, n}. \quad (5)$$

Здесь $s > 2$ при $n = 2$ и $s \geq n$ при $n \geq 3$, $\mu_1, \mu_2 > 0$ – заданные числа, $k(x), f(x), u_0(x)$ – заданные измеримые функции удовлетворяющие следующие условия:

$$0 < \xi \leq k(x) \leq \mu, \quad x \in \Omega, \quad f(x), u_0(x) \in L_2(\Omega), \quad (6)$$

где $\nu, \mu > 0$ – заданные числа.

Обозначения используемых в работе функциональных пространств соответствуют принятым в [11, с. 23]. Ниже положительные постоянные, не зависящие от оцениваемых величин, обозначим через M .

Обозначим через $\hat{W}_2^1(\Omega)$ подпространство пространства $W_2^1(\Omega)$, состоящее из элементов $W_2^1(\Omega)$ удовлетворяющих условия периодичности (4). Пусть $v = v(x) \in V$ фиксированное управление. Обобщённым решением из $W_2^1(\Omega)$ краевой задачи (3)–(5) назовем функцию $u(x) = u(x, v)$ из $\hat{W}_2^1(\Omega)$, удовлетворяющую интегральному тождеству

$$\int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^n k(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial \eta}{\partial x_i} + v(x) u \eta \right) dx = \int_{\Omega} f(x) \eta dx \quad (7)$$

при $\forall \eta = \eta(x) \in \hat{W}_2^1(\Omega)$.

Теорема 1. Краевая задача (3)–(5) при каждом заданном $v = v(x) \in V$ однозначно разрешима в $W_2^1(\Omega)$ и верна априорная оценка

$$\|u\|_{2, \Omega}^{(1)} \leq M \|f\|, \quad (8)$$

где $M > 0$ не зависит от f .

Доказательство. Введем в $\hat{W}_2^1(\Omega)$ новое скалярное произведение

$$[u, w] = \int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^n k(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial w}{\partial x_i} + v(x) u w \right) dx. \quad (9)$$

В силу предположения $0 < \xi \leq k(x) \leq \mu, 0 < \mu_1 \leq v(x) \leq \mu_2, x \in \Omega$, норма $\|u\|_1 \equiv \sqrt{[u, u]}$ эквивалентна исходной норме $\|u\|_{2, \Omega}^{(1)}$ пространства $\hat{W}_2^1(\Omega)$ [12, с.149]. Поэтому тождество (7) можно переписать в виде

$$[u, \eta] = (f, \eta). \quad (10)$$

При фиксированном f из $L_2(\Omega)$ выражение (f, η) определяет линейный функционал по η на $\hat{W}_2^1(\Omega)$. Кроме того, так как

$$|(f, \eta)| \leq \|f\| \|\eta\| \leq M \|f\| \|\eta\|_1,$$

то этот функционал ограничен и его норма не превосходит $M \|f\|$, где постоянна $M > 0$ не зависит от f и η . Тогда, по теореме Рисса [12, с.75], существует единственная функция $F \in \hat{W}_2^1(\Omega)$ для которого $[u, \eta] = [F, \eta]$ при всех $\eta \in \hat{W}_2^1(\Omega)$, и эта функция удовлетворяет неравенству $\|F\|_{2, \Omega}^{(1)} \leq M \|f\|$. Следовательно, в $\hat{W}_2^1(\Omega)$ существует единственная функция $u = F$, удовлетворяющая тождеству (10) или (7). Теорема 1 доказана.

Теорема 2. Пусть выполнены условия (6). Тогда задача (1)–(5) корректно поставлена в слабой топологии пространства $L_s(\Omega)$, т. е. множество оптимальных управлений $V_* = \{v_* \in V : J(v_*) = \inf \{J(v) : v \in V\}\}$ не пусто и любая минимизирующая последовательность $\{v_m\} \subset V$ функционала $J(v)$ слабо в $L_s(\Omega)$ сходится к множеству V_* .

Доказательство. Покажем, что функционал $J(v)$ слабо в $L_s(\Omega)$ непрерывен на множестве V . Пусть последовательная $\{v_m\} \subset V$ такова что

$$v_m \rightarrow v \text{ слабо в } L_s(\Omega), \quad (11)$$

где $v \in V$ фиксированный элемент.

Обозначим $u_m = u_m(x) = u_m(x, v_m)$. Тогда, из оценки (8) при $u = u_m$, следует, что последовательность $\{u_m\}$ равномерно ограничена в $W_2^1(\Omega)$. В силу теоремы вложения [11, с.83], не ограничивая общности, можно считать, что

$$u_m \rightarrow u \text{ слабо в } W_2^1(\Omega) \text{ и сильно в } L_s(\Omega), \quad (12)$$

где $u = u(x)$ – некоторая функция из $W_2^1(\Omega)$.

Полагая в (7) $v = v_m, u = u_m$ получим тождества

$$\int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^n k(x) \frac{\partial u_m}{\partial x_i} \frac{\partial \eta}{\partial x_i} + v_m(x) u_m \eta \right) dx = \int_{\Omega} f(x) \eta dx, \\ (m = 1, 2, \dots), \quad \forall \eta = \eta(x) \in \hat{W}_2^1(\Omega). \quad (13)$$

Нетрудно видеть, что

$$\left| \int_{\Omega} v_m u_m \eta dx - \int_{\Omega} v u \eta dx \right| = \left| \int_{\Omega} v_m (u_m - u) \eta dx + \int_{\Omega} (v_m - v) u \eta dx \right| \leq \mu_2 \|u_m - u\| \|\eta\| + \left| \int_{\Omega} (v_m - v) u \eta dx \right|. \quad (14)$$

Используя теоремы вложения [11, с.83] и условия $s > 2$ при $n = 2, s \geq n$ при $n \geq 3$ можно показать, что $u \eta \in L_{s/(s-1)}(\Omega)$. Тогда из (11), (12), (14) следует что,

$$\left| \int_{\Omega} v_m u_m \eta dx - \int_{\Omega} v u \eta dx \right| \rightarrow 0, \text{ при } m \rightarrow \infty. \quad (15)$$

Теперь переходя к пределу в (13) и учтя соотношения (11), (12), (15) получаем, что функция $u(x)$ удовлетворяет тождеству (7), т. е. $u(x) = u(x, v)$.

Таким образом, соотношение (12) справедливо с функцией $u = u(x, v)$ и в частности

$$u(x, v_m) \rightarrow u(x, v) \text{ сильно в } L_s(\Omega). \quad (16)$$

Тогда из (1) и (16) следует, что $J(v_m) \rightarrow J(v)$ при $m \rightarrow \infty$ т.е. функционал $J(v)$ слабо непрерывен на V . Кроме того, так как множество V определяемое равенством (2) замкнуто, ограничено и выпукло на рефлексивном банаховом пространстве $L_s(\Omega)$ оно слабо компактно [13, с.51]. Поэтому, утверждения теоремы 2 следует из теоремы Вейерштрасса [13, с. 49]. Теорема 2 доказана.

3. Дифференцируемость целевого функционала и необходимое условие оптимальности.

Пусть $\psi(x) = \psi(x, v) \in \hat{W}_2^1(\Omega)$ является обобщенным решением из $W_2^1(\Omega)$ сопряженной краевой задачи:

$$-\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k(x) \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) + v(x) \psi = 2[u(x, v) - u_0(x)], \quad x \in \Omega, \quad (17)$$

$$\psi|_{x_i=0} = \psi|_{x_i=l_i}, \quad i = \overline{1, n}, \quad (18)$$

$$k(x) \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \Big|_{x_i=0} = k(x) \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \Big|_{x_i=l_i}, \quad i = \overline{1, n}, \quad (19)$$

Обобщенное решение задачи (17)–(19) удовлетворяет интегральному тождеству

$$\int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^n k(x) \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \frac{\partial \eta}{\partial x_i} + v(x) \psi \eta \right) dx = 2 \int_{\Omega} [u(x, v) - u_0(x)] \eta dx, \quad \forall \eta = \eta(x) \in \hat{W}_2^1(\Omega). \quad (20)$$

В силу теоремы 1 краевая задача (17)–(19) однозначно разрешима в $W_2^1(\Omega)$ и справедлива оценка

$$\|\psi\|_{2,\Omega}^{(1)} \leq 2M \|u(x, v) - u_0(x)\|.$$

Отсюда и из (8) следует, что

$$\|\psi\|_{2,\Omega}^{(1)} \leq 2M (M \|f\| + \|u_0(x)\|). \quad (21)$$

Теорема 3. Пусть выполнены условия теоремы 2. Тогда функционал (1) непрерывно дифференцируем на множестве V по норме $L_s(\Omega)$ и его градиент в точке $v \in V$ имеет вид

$$J'(v) = u(x, v)\psi(x, v), \quad x \in \Omega. \quad (22)$$

Доказательство. Пусть $v \in V$ – фиксированное управление, $\Delta v \in L_s(\Omega)$ – его приращение такое, что $v + \Delta v \in V$. Обозначим $\Delta u = \Delta u(x) = u(x, v + \Delta v) - u(x, v)$, $x \in \Omega$. Из (7) следует, что функция $\Delta u \in \hat{W}_2^1(\Omega)$ удовлетворяет интегральному тождеству

$$\int_{\Omega} \left[\sum_{i=1}^n k(x) \frac{\partial \Delta u}{\partial x_i} \frac{\partial \eta}{\partial x_i} + (v(x) + \Delta v(x)) \Delta u \eta \right] = - \int_{\Omega} \Delta v(x) u \eta dx, \quad \forall \eta = \eta(x) \in \hat{W}_2^1(\Omega). \quad (23)$$

Кроме того, в силу (8) для Δu верна оценка:

$$\|\Delta u\|_{2,\Omega}^{(1)} \leq M \|\Delta v u\|.$$

Тогда, используя неравенство (1.7') из [14, с.75] и ограниченность вложения $W_2^1(\Omega) \rightarrow L_{2s/(s-2)}(\Omega)$ получаем

$$\|\Delta u\|_{2,\Omega}^{(1)} \leq M \|\Delta v\|_{s,\Omega} \|u\|_{\frac{2s}{s-2},\Omega} \leq M \|\Delta v\|_{s,\Omega} \|u\|_{2,\Omega}^{(1)}. \quad (24)$$

Приращение $\Delta J(v) = J(v + \Delta v) - J(v)$ функционала (1) представим в виде

$$\Delta J(v) = 2 \int_{\Omega} [u(x, v) - u_0(x)] \Delta u(x) dx + \|\Delta u\|^2. \quad (25)$$

В тождестве (20) положим $\eta = \Delta u$, в (23) $\eta = \psi$, вычтем полученные равенства и придем к равенству

$$2 \int_{\Omega} [u(x, v) - u_0(x)] \Delta u(x) dx = \int_{\Omega} (u\psi + \Delta u\psi) \Delta v dx.$$

Отсюда и из (25), получим

$$\Delta J(v) = \int_{\Omega} u\psi \Delta v dx + R, \quad (26)$$

где

$$R = \|\Delta u\|^2 + \int_{\Omega} \Delta u\psi \Delta v dx. \quad (27)$$

Используя неравенство (1.8) из [14, с.75], ограниченность вложения $W_2^1(\Omega) \rightarrow L_{2s/(s-1)\Omega}$ и оценки (24), имеем

$$\left| \int_{\Omega} \Delta u\psi \Delta v dx \right| \leq \|\Delta u\|_{\frac{2s}{s-1},\Omega} \|\psi\|_{\frac{2s}{s-1},\Omega} \|\Delta v\|_{s,\Omega} \leq M \|\Delta u\|_{2,\Omega}^{(1)} \|\psi\|_{2,\Omega}^{(1)} \|\Delta v\|_{s,\Omega} \leq M \|u\|_{2,\Omega}^{(1)} \|\psi\|_{2,\Omega}^{(1)} (\|\Delta v\|_{s,\Omega})^2. \quad (28)$$

Кроме того, используя неравенство Коши–Буняковского и оценки (24), имеем

$$|R| \leq M \|u\|_{2,\Omega}^{(1)} \left(M \|u\|_{2,\Omega}^{(1)} + \|\psi\|_{2,\Omega}^{(1)} \right) (\|\Delta v\|_{s,\Omega})^2. \quad (29)$$

Тогда из (26), (29) следует, что функционал $J(v)$ (5) дифференцируем и его градиент имеет вид (22).

Покажем, что отображение $v \rightarrow J'(v)$ непрерывно действует из V в $L_{s'}(\Omega)$, где $L_{s'}(\Omega)$ – сопряженное пространство к $L_s(\Omega)$, $s' = s / (s - 1)$. Пусть

$$\Delta \psi = \psi(x, v + \Delta v) - \psi(x, v), \quad \psi = \psi(x) = \psi(x, v).$$

Из (17)–(19) следует, что $\Delta \psi$ является обобщенным решением из $W_2^1(\Omega)$ краевой задачи

$$-\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k(x) \frac{\partial \Delta \psi}{\partial x_i} \right) + (v + \Delta v) \Delta \psi = 2\Delta u(x, v), \quad x \in \Omega, \quad (30)$$

$$\Delta \psi|_{x_i=0} = \Delta \psi|_{x_i=l_i}, \quad i = \overline{1, n}, \quad (31)$$

$$k(x) \frac{\partial \Delta \psi}{\partial x_i} \Big|_{x_i=0} = k(x) \frac{\partial \Delta \psi}{\partial x_i} \Big|_{x_i=l_i}, \quad i = \overline{1, n}, \quad (32)$$

Рассуждая аналогично выводу оценки (21) и используя оценки (24), можно показать, что для решения задачи (30)–(32) верна оценка

$$\|\Delta \psi\|_{2, \Omega}^{(1)} \leq 2M^2 \|\Delta v\|_{s, \Omega} \|u\|_{2, \Omega}^{(1)}. \quad (33)$$

Используя неравенство (1.7') из [14, с.75] и оценки (24), (33), и рассуждая аналогично работе [15] можно показать, что

$$\|J'(v + \Delta v) - J'(v)\|_{s, \Omega} \leq M \left[\|u\|_{2, \Omega}^{(1)} + \|\psi\|_{2, \Omega}^{(1)} + \|\Delta v\|_{s, \Omega} \right] \|\Delta v\|_{s, \Omega}.$$

Отсюда следует, что $v \rightarrow J'(v)$ есть непрерывное отображение из V в $L_s(\Omega)$. Теорема 2 доказана.

С помощью формулы градиента (22) и теоремы 5 из [13, с. 28] можно установить необходимое условие оптимальности управления в задаче.

Теорема 4. Пусть выполнены условия теоремы 2 и $v_* = v_*(x) \in V$ - решение задачи (1)–(6), т. е. оптимальное управление. Тогда выполняется неравенство

$$\int_{\Omega} u(x, v_*) \psi(x, v_*) [v(x) - v_*(x)] dx \geq 0, \quad \forall v = v(x) \in V.$$

Литература

1. Литвинов, В.Г. Оптимизация в эллиптических граничных задачах с приложениями к механике / В.Г. Литвинов. – М.: Наука, 1987. – 366 с.
2. Алексеев, Г.В. Идентификация младшего коэффициента для стационарного уравнения конвекции-диффузии-реакции / Г.В. Алексеев, Е.А. Калинина // Сиб. журн. индуст. математики. – 2007. – Т. 10, № 1. – С. 3–16.
3. Лионс, Ж.-Л. Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными / Ж.-Л. Лионс. – М.: Наука, 1972. – 414 с.
4. Тагиев, Р.К. Об оптимальном управлении коэффициентами эллиптического уравнения / Р.К. Тагиев // Дифференц. уравнения. – 2011. – Т. 47, № 6. – С. 871–879.
5. Тагиев, Р.К. Оптимальное управление коэффициентами квазилинейного эллиптического уравнения / Р.К. Тагиев // Автоматика и телемеханика. – 2010. – № 9. – С. 19–32.
6. Тагиев, Р.К. Вариационная постановка одной обратной задачи для параболического уравнения с интегральными условиями / Р.К. Тагиев, Ш.И. Магеррамли // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2020. – Т. 12, № 3. – С. 34–40.
7. Taghiyev, R.K. An Optimal Control Problem for an Elliptic Equation with Periodicity Conditions / R.K. Taghiyev, A.K. Mammadova // Baku State University Journal of Mathematics and Computer Sciences. – 2024. – Vol. 1, no. 4. – P. 39–48.
8. Mammadova, A.K. Optimal Control Problem for a Second-Order Linear Ordinary Differential Equation with Periodic Boundary Conditions / A.K. Mammadova // XXVII Republican Scientific Conference of Doctoral Students and Young Researchers dedicated to the “Year of Solidarity for a Green World”, Azerbaijan, Sumgayit, December 10–11, 2024. – P. 160–164.
9. Troeltzsch, F. Optimal Control of Partial Differential Equations: Theory, Methods and Applications / F. Troeltzsch. – American Mathematical Society, Graduate Studies in Mathematics, 2010. – 399 p.
10. Isakov, V. Partial Inverse Problems for Differential Equations / V. Isakov. – Springer Cham, 2017. – 406 p.

11. Ладыженская, О.А. Краевые задачи математической физики / О.А. Ладыженская. – М.: Наука, 1973. – 408 с.

12. Михайлов, В.П. Уравнения с частными производными / В.П. Михайлов. – М.: Наука, 1976. – 391 с.

13. Васильев, Ф.П. Методы решения экстремальных задач: задачи минимизации в функциональных пространствах, регуляризация, аппроксимация / Ф.П. Васильев. – М.: Наука, 1981. – 400 с.

14. Ладыженская, О.А. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа / О.А. Ладыженская, В.А. Солонников, Н.Н. Уралцева. – М.: Наука, 1967. – 736 с.

15. Тагиев, Р.К. Вариационный метод решения одной коэффициентной обратной задачи для параболического уравнения с интегральными условиями / Р.К. Тагиев, Ш.И. Магеррамлы // Итоги науки и техники. Современная математика и ее приложения. Тематические обзоры. – 2023. – Т. 224. – С. 133–141.

Поступила в редакцию 29 апреля 2025 г.

Сведения об авторах

Тагиев Рафиг Каландар оглы – доктор математических наук, профессор, заведующий кафедрой «Оптимизация и управления», Бакинский государственный университет, Баку, Азербайджанская Республика, e-mail: r.tagiyev@list.ru.

Мамедова Айтадж Канан кызы – докторант, кафедра «Оптимизация и управления», Бакинский государственный университет, Баку, Азербайджанская Республика, e-mail: amamedova0209@mail.ru.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2026, vol. 18, no. 1, pp. 34–40

DOI: 10.14529/mmph260104

OPTIMAL CONTROL PROBLEM FOR AN ELLIPTIC EQUATION WITH PERIODICITY CONDITIONS AND CONTROL AT SOLUTION

R.K. Tagiyev, A.K. Mammadova

Baku State University, Baku, Republic of Azerbaijan
E-mail: r.tagiyev@list.ru, amamedova0209@mail.ru

Abstract. Optimal control problems for elliptic equations with classical boundary conditions have been thoroughly studied. However, these problems with periodicity conditions are less well-researched. This paper focuses on the optimal control problem for an elliptic equation with periodicity conditions. The control function is the quotient at the solution to the elliptic equation and belongs to the Lebesgue space with a finite summability index. The solution to the boundary value problem for the elliptic equation is defined as a generalized solution from the Sobolev space. The paper examines the correctness of the considered optimal control problem, derives a formula for the gradient of the target functional, and determines a necessary condition for control optimality.

Keywords: *optimal control; elliptic equation; periodicity condition; correctness of the problem; necessary condition of optimality.*

References

1. Litvinov V.G. *Optimizatsiya v ellipticheskikh granichnykh zadachakh s prilozheniyami k mekhanike* (Optimization in Elliptic Boundary Value Problems with Applications to Mechanics). Moscow: Nauka Publ., 1987, 366 p. (in Russ.).

2. Alekseev G.V., Kalinina E.A. Identification of the Lower Coefficient for the Stationary Convection-Diffusion-Reaction Equation. *Sib. Zh. Ind. Mat.*, 2007, Vol. 10, no. 1, pp. 3–16. (in Russ.).

3. Lions J.L. *Contrôle Optimal de Systèmes Gouvernés par des Équations aux Dérivées Partielles*. Paris: Dunod, Gauthier-Villars, 1968, 426 p. (in Fr.).

4. Tagiev R.K. On the Optimal Control of the Elliptic Equation Coefficients. *Differentsial'nye uravneniya*, 2011, Vol. 47, no. 6, pp. 871–879. (in Russ.).
5. Tagiev P.K. Optimal Control of the Coefficients of Quasilinear Elliptic Equation. *Automation and Remote Control*, 2010, Vol. 71, Iss. 9, pp. 1757–1769. DOI: 10.1134/S000511791009002X.
6. Tagiev R.K., Magerramli S.I. Variational Formulation of one Inverse Problem for Parabolic Equation with Integral Conditions. *Vestnik of South Ural State University Ser. Mathematics, Mechanics. Physics*, 2020, Vol. 12, no 3, pp. 34–40. (in Russ.). DOI: 10.14529/mmph200305
7. Taghiyev R.K., Mammadova A.K. An Optimal Control Problem for an Elliptic Equation with Periodicity Conditions. *Baku State University Journal of Mathematics and Computer Sciences*, 2024, Vol. 1, no 4, pp. 39–48.
8. Mammadova A.K. Optimal Control Problem for a Second-Order Linear Ordinary Differential Equation with Periodic Boundary Conditions. *XXVII Republican Scientific Conference of Doctoral Students and Young Researchers dedicated to the “Year of Solidarity for a Green World”*, Azerbaijan, Sumgayit, December 10–11, 2024, pp. 160–164.
9. Tröltzsch F. *Optimal Control of Partial Differential Equations: Theory, Methods and Applications*. American Mathematical Society, Graduate Studies in Mathematics, 2010, 399 p.
10. Isakov V. *Partial Inverse Problems for Differential Equations*. Springer Cham, 2017, 406 p. DOI: 10.1007/978-3-319-51658-5
11. Ladyzhenskaya O.A. *Kraevye zadachi matematicheskoy fiziki* (Boundary Value Problems of Mathematical Physics). Moscow, Nauka, 1973, 408 p. (in Russ.).
12. Mikhaylov V.P. *Uravneniya s chastnymi proizvodnymi* (Equations with Partial Derivatives). Moscow: Nauka Publ., 1976, 392 p. (in Russ.).
13. Vasil'ev F.P. *Metody resheniya ekstremal'nykh zadach: Zadachi minimizatsii v funktsion. prostranstvakh, regularizatsiya, approksimatsiya* (Methods for Solving Extreme Problems: Minimization Tasks in Functions. Spaces, Regularization, Approximation). Moscow, Nauka Publ., 1981, 400 p. (in Russ.).
14. Ladyzhenskaya O.A., Solonnikov V.A., Ural'tseva N.N. *Lineynye i kvazilineynye uravneniya parabolicheskogo tipa* (Linear and Quasilinear Equations of Parabolic Type). Moscow, Nauka Publ., 1967, 736 p. (in Russ.).
15. Tagiyev R.K., Maharramli Sh.I. Variational Method for Solving a Coefficient Inverse Problem for a Parabolic Equation with Integral Conditions. *Itogi Nauki i Tekhniki. Sovremennaya Matematika i ee Prilozheniya. Tematicheskie Obzory*, 2023, Vol. 224, pp. 133–141. (in Russ.). DOI: 10.36535/0233-6723-2023-224-133-141

Received April 29, 2025

Information about the authors

Tagiyev Rafiq Kalandar oglu is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Department of Optimization and Management, Baku State University, Baku, Republic of Azerbaijan, e-mail: r.tagiyev@list.ru.

Mammadova Aytadzh Kanan kyzy is Doctoral Candidate, Department of Optimization and Management, Baku State University, Baku, Republic of Azerbaijan, e-mail: amamedova0209@mail.ru.

ТОЧНОЕ АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ НЕКОТОРОГО КЛАССА НЕЛИНЕЙНЫХ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ МЕМБРАННОЙ ЭЛЕКТРОХИМИИ

Н.О. Чубырь

*Кубанский государственный университет, г. Краснодар, Российская Федерация
e-mail: chubyr-natalja@mail.ru*

Аннотация. При математическом моделировании процессов переноса в электромембранных системах в виде краевых задач для систем уравнений Нернста–Планка–Пуассона возникают задачи, содержащие малый параметр при старшей производной, то есть сингулярно-возмущенные задачи. При малых плотностях тока эти задачи можно решать различными методами, например, методом погранслоевых функций. Однако при больших плотностях тока известные методы асимптотического решения необходимо модифицировать, так как решение вырожденной задачи не существует на всем интервале. Для выявления структуры асимптотического решения, например, асимптотической шкалы, в таких случаях используют модельные задачи, допускающие точные аналитические решения. Кроме того, точное решение служит тестом для приближенных аналитических решений, например, асимптотических, а также численных решений. Точное решение дифференциальных уравнений имеет важное значение, так как позволяет исследовать задачу с исчерпывающей полнотой. Наиболее эффективным методом решения нелинейных уравнений высокого порядка является метод понижения порядка, позволяющее находить частное решение. В работе предлагается метод понижения порядка для некоторого класса нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Приведены примеры конкретных нелинейных уравнений и их точных решений.

Ключевые слова: нелинейные дифференциальные уравнения; точное решение; понижение порядка.

Введение

Для глубокого понимания качественных характеристик различных природных явлений и процессов используют точные решения нелинейных дифференциальных уравнений. Они позволяют иллюстрировать сложные нелинейные эффекты, помогая раскрыть их механизмы [1]. Также частные точные решения широко используются для проверки корректности и точности численных, асимптотических и приближенных аналитических методов [1, 2]. Кроме того, точные решения являются основой для проверки и улучшения специализированных компьютерных программ, таких как Mathematica, Maple и др.

Нелинейные дифференциальные уравнения редко разрешимы в элементарных функциях, и их анализ требует специальных методов. Не существуют общих методов для нахождения точных решений, поэтому каждый раз используются уникальные способы, которые имеют малую область использования [3–7]. Наиболее эффективным методом решения нелинейных уравнений высокого порядка является метод понижения порядка, позволяющее находить частное решение. В данной работе описаны точные решения некоторого класса нелинейных дифференциальных уравнений, которые не допускают понижения порядка уравнения с использованием известных методов, например, таких которые путем замены понижают порядок в уравнениях, не содержащих независимой переменной x или не содержащих искомой функции y , в однородных уравнениях (обобщенная однородность) или в уравнениях, допускающие понижение порядка специальной подстановкой. Аналогичные уравнения встречаются в электрохимии. Так, например, при аналитическом решении модельной задачи стационарного переноса ионов соли для 1:1 электролита в сечение канала обессоливания с учетом пространственного заряда и реакции диссоциации/рекомбинации с учетом зависимости коэффициента равновесия от величины пространственного заряда [8], которая описывается расширенной системой уравнений Нернста–Планка–Пуассона, в области погранслоя у анионообменной мембраны приходим к решению уравнения для безразмерного потенциала электрического поля φ :

$$\varepsilon \frac{d^3 \varphi}{dx^3} = \left(\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^2 - \frac{a}{2\varepsilon} k_{w_0} x^2 + b_0 \varphi - \gamma_1 x + \gamma_2 \right) \frac{d\varphi}{dx} - \frac{a}{\varepsilon} k_{w_0} x + b_0 \frac{d\varphi}{dx} - \gamma_1,$$

где $\varepsilon > 0$ – малый параметр, k_{w_0} – коэффициент равновесия реакции диссоциации молекул воды, a, b_0 – безразмерные параметры, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – константы интегрирования [9]. Обобщение уравнения такого типа рассматриваются в данной работе.

Методы и результаты

Рассмотрим нелинейное обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\frac{d^n \varphi}{dx^n} = \left(\frac{1}{2} \left(\frac{d^{n-2} \varphi}{dx^{n-2}} \right)^2 + u \right) \frac{d^{n-2} \varphi}{dx^{n-2}} + \frac{d}{dx}(u), \quad (1)$$

Где u непрерывно дифференцируемая функция, в общем случае, зависящая от x и φ .

Не сложно видеть, что любое гладкое решение уравнения

$$\frac{d^{n-1} \varphi}{dx^{n-1}} = \frac{1}{2} \left(\frac{d^{n-2} \varphi}{dx^{n-2}} \right)^2 + u \quad (2)$$

является решением уравнения (1).

Действительно, продифференцируем уравнения (2) по x , тогда получим

$$\frac{d^n \varphi}{dx^n} = \left(\frac{d^{n-2} \varphi}{dx^{n-2}} \right) \frac{d^{n-1} \varphi}{dx^{n-1}} + \frac{d}{dx}(u).$$

Подставим вместо $\frac{d^{n-1} \varphi}{dx^{n-1}}$ из уравнения (2) правую часть, тогда после ряда преобразований, получим

$$\frac{d^n \varphi}{dx^n} = \left(\frac{1}{2} \left(\frac{d^{n-2} \varphi}{dx^{n-2}} \right)^2 + u \right) \left(\frac{d^{n-2} \varphi}{dx^{n-2}} \right) + \frac{d}{dx}(u)$$

ч. т. д.

Рассмотрим некоторые частные случаи.

1. Пусть в уравнении (1) $n = 3$

а) $u(x)$ гладкая функция, например, $u(x) = \frac{A}{2} x^2 + Cx + D$. Рассмотрим уравнение типа (1)

$$\frac{d^3 \varphi}{dx^3} = \left(\frac{1}{2} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^2 + \frac{A}{2} x^2 + Cx + D \right) \frac{d\varphi}{dx} + Ax + C. \quad (3)$$

Из первого утверждения следует, что любое решение следующего нелинейного уравнения второго порядка:

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^2 + \frac{A}{2} x^2 + Cx + D \quad (4)$$

является решением уравнения (3).

Можно показать, что уравнение (4) допускает точное решение с использованием функций Эйри [8]. Действительно, сделаем в уравнении (4) замену $\varphi = -2 \ln \psi$, тогда

$$\frac{d\varphi}{dx} = -2 \frac{\psi_x}{\psi}, \quad \varphi_x = -2 \frac{\psi_x}{\psi}, \quad \varphi_{xx} = 2 \left(\frac{\psi_x}{\psi} \right)^2 + \frac{A}{2} x^2 + Cx + D.$$

Таким образом, получаем линейное дифференциальное уравнение с переменными коэффициентами

$$2 \frac{d^2 \psi}{dx^2} = - \left(\frac{A}{2} x^2 + Cx + D \right) \psi$$

или

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = - (Ax^2 + 2Cx + 2D) \psi$$

Это уравнение приводится к уравнению Вебера–Эрмита, которое имеет решение с использованием функций параболического цилиндра. В частности, если $A = 0$, то решение уравнение выражается через функции Эйри $\psi = C_1 Ai\left(\frac{2D + 2Cx}{(-2C)^{2/3}}\right) + C_2 Bi\left(\frac{2D + 2Cx}{(-2C)^{2/3}}\right)$, где $Ai(x)$ и $Bi(x)$ функции Эйри соответственно первого и второго рода.

б) пусть теперь u гладкая функция, зависящая от x и неизвестной функции φ , например, $u(x) = \frac{A}{2}x^2 + Cx + D + B\varphi$, то есть рассматривается уравнение

$$\frac{d^3\varphi}{dx^3} = \left(\frac{1}{2} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^2 + \frac{A}{2}x^2 + Cx + D + B\varphi \right) \frac{d\varphi}{dx} + Ax + C + B \frac{d\varphi}{dx}. \quad (5)$$

Из утверждения выше следует, что любое решение следующего нелинейного уравнения второго порядка:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^2 + \frac{A}{2}x^2 + Cx + D + B\varphi \quad (6)$$

является решением уравнения (5).

Пусть $A \neq 0, B \neq 0$, тогда уравнение (6) имеет частное решение вида $\varphi = \alpha x^2 + \beta x + \gamma$. Для нахождения коэффициентов подставим функцию $\varphi = \alpha x^2 + \beta x + \gamma$ в исходное уравнение.

$$2\alpha = \frac{1}{2}(2\alpha x + \beta)^2 + \frac{A}{2}x^2 + Cx + D + B(\alpha x^2 + \beta x + \gamma).$$

Упростив и приравняв коэффициенты при одинаковых степенях x , получим систему уравнений

$$0 = 2\alpha^2 + \frac{A}{2} + B\alpha, \quad 0 = 2\alpha\beta + C + B\beta, \quad 2\alpha = \frac{1}{2}\beta^2 + D + B\gamma.$$

а) из первого уравнения получаем, что при условии $B^2 - 4A = 0$ имеем единственное решение $\alpha = -\frac{B}{4}$, из второго уравнения $\beta = \frac{C}{B}$, а из последнего $\gamma = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{C^2}{B^3} + \frac{D}{B}$, и, соответственно,

$$\varphi = -\frac{B}{4}x^2 + \frac{C}{B}x + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{C^2}{B^3} + \frac{D}{B}.$$

б) при условии $B^2 - 4A > 0$ получим два решения для α : $\alpha = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4A}}{4}$.

Подставим их во второе уравнение системы и найдем β : $\beta = -\frac{2C}{3B \pm \sqrt{B^2 - 4A}}$.

И из третьего найдем γ : $\gamma = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4A} - 2D}{2B} - \frac{2C^2}{9B^3 \pm 6B^2\sqrt{B^2 - 4A} + B^3 - 4AB}$

Подставляя найденные коэффициенты в $\varphi = \alpha x^2 + \beta x + \gamma$ получим частное решение.

В случае, когда в уравнении (6) $A = 0$ и $C = 0$ уравнение имеет вид

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^2 + D + B\varphi$$

и допускает еще одно понижение порядка заменой $\frac{d\varphi}{dx} = z(\varphi)$,

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{d}{dx} z(\varphi) = \frac{dz}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dx} = z \frac{dz}{d\varphi} = \frac{1}{2} \frac{dz^2}{d\varphi}.$$

Получаем уравнение

$$\frac{1}{2} \frac{dz^2}{d\varphi} = \frac{1}{2} z^2 + D + B\varphi$$

или

$$\frac{dy}{d\varphi} = y + 2B\varphi, \quad (7)$$

где $y(\varphi) = z^2(\varphi) + 2D$.

Решая линейное уравнение (7) получим: $y = -2B\varphi - 2B + \tilde{C}e^\varphi$.

Вернемся к замене $z^2(\varphi) + 2D = -2B\varphi - 2B + \tilde{C}e^\varphi$, то есть получим уравнение первого порядка

$$\frac{d\varphi}{dx} = \pm \sqrt{-2B\varphi - 2B - 2D + C_2 e^\varphi}.$$

Замечание 1. Очевидно, уравнение (4) в отличие от уравнения (5) допускает понижение порядка также и заменой $\frac{d\varphi}{dx} = z(\varphi)$.

2. Пусть в уравнение (1) $n = 2$, тогда уравнение (1) имеет вид

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \left(\frac{1}{2}\varphi^2 + u\right)\varphi + \frac{d}{dx}(u). \quad (8)$$

И, соответственно, уравнение (2)

$$\frac{d\varphi}{dx} = \frac{1}{2}\varphi^2 + u. \quad (9)$$

Если $u(x) = \frac{A}{2}x^2 + Cx + D$, то уравнение (2) сводится к уравнению Эйри [10].

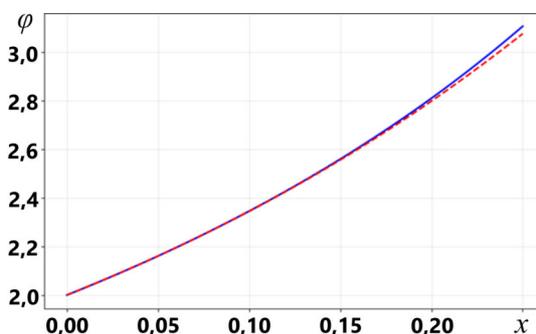
Если $u(x) = \frac{A}{2}x^2 + Cx + D + B\varphi$, то уравнение (2) имеет различные решение в соответствии со значениями коэффициентов, наиболее сложный случай, где все коэффициенты не равны нулю, можно свести к уравнению Риккати.

Произведем сравнение графиков решений исходной и упрощенной задачи, полагая $A = 4$, $C = 2$, $D = 1$, то есть уравнение (8) примет вид

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \left(\frac{1}{2}\varphi^2 + 2x^2 + 2x + 1\right)\varphi + 4x + 2, \text{ причем для этого}$$

уравнения ставится задача Коши с условиями $\varphi(0) = 2$, $\frac{d\varphi(0)}{dx} = 3$, а для соответствующего урав-

нения (10) $\frac{d\varphi}{dx} = \frac{1}{2}\varphi^2 + 2x^2 + 2x + 1$ задача Коши с условием $\varphi(0) = 2$. Графики решений даны на рисунке.



Сравнение графиков решений $\varphi(x)$ исходной задачи: сплошная линия – численное решение уравнения (9), пунктирная линия – аналитическое решение уравнения (10)

Заключение

В работе найдены точные решения некоторых классов нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений, к которым не применимы известные методы понижения порядка, приведены конкретные примеры дифференциальных уравнений и их точных решений, которые полезны для теоретического анализа и понимания поведения решения. Предложенные точные решения могут быть использованы в качестве тестов при численном решении краевых задач для нелинейных уравнений, а также служить основой для приближенных аналитических решений. Уравнения данного вида встречаются при аналитическом решении математических моделей в электрохимии, что и привело к необходимости исследования данных уравнений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 24-19-00648.

Литература

1. Mathematical Modeling of Electrodialysis of a Dilute Solution with Accounting for Water Dissociation-Recombination Reactions / A.V. Kovalenko, V.V. Nikonenko, N.O. Chubyr, M.Kh. Urtenov // Desalination. – 2023. – Vol. 550. – P. 116398.
2. Полянин, А.Д. Построение решений нелинейных уравнений математической физики с помощью точных решений более простых уравнений / А.Д. Полянин // Вестник НИЯУ МИФИ. – 2024. – Т. 13, № 2. – С. 66–75.
3. Полянин, А.Д. Точные решения нелинейных консервативно-диффузионных методов гиперболического типа с запаздыванием / А.Д. Полянин, В.Г. Сорокин // Вестник НИЯУ МИФИ. – 2014. – Т. 3, № 2. – С. 141–146.
4. Буданов, В.М. Метод построения периодических решений нелинейных дифференциальных уравнений / В.М. Буданов // Дифференциальные уравнения. – 2024. – Т. 60, № 5. – С. 590–603.
5. Полянин, А.Д. Построение точных решений нелинейных дифференциальных уравнений методом расщепления / А.Д. Полянин, Л.В. Линчук // Вестник национального исследовательского ядерного университета «МИФИ». – 2020. – Т. 9, № 1. – С. 32–44.
6. Байраш, Р.А. Обыкновенные дифференциальные уравнения четного порядка с интегральными условиями / Р.А. Байраш, А.Л. Скубачевский // Доклады российской академии наук. Математика, информатика, процессы управления. – 2025. – Т. 522, № 1. – С. 7–10.
7. Полянин, А.Д. Переопределенные системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений с параметрами и их приложения / А.Д. Полянин // Вестник национального исследовательского ядерного университета «МИФИ». – 2016. – Т. 5, № 2. – С.122–136.
8. Асимптотическое решение краевой задачи для стационарной расширенной системы уравнений Нернста–Планка и Пуассона / Н.О. Чубырь, А.В. Коваленко, М.Х. Уртенов, З.М. Лайпанова // Перспективы науки. – 2024. – № 2 (173). – С. 72–81
9. Математическое моделирование влияния зависимости константы скорости диссоциации/рекомбинации на перенос ионов соли в диффузионном слое у ионообменной мембраны / Р.Р. Назаров, А.В. Коваленко, Р.А. Бостанова, М.Х. Уртенов // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Физико-математические науки». – 2025. – Т. 29, № 1. – С. 109–128.
10. Корнев, Б.Г. Введение в теорию Бесселевых функций / Б.Г. Корнев. – М.: Наука, 1971. – 287 с.

Поступила в редакцию 21 июля 2025 г.

Сведения об авторе

Чубырь Наталья Олеговна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики, Кубанский государственный университет, г. Краснодар, Российская Федерация, e-mail: chubyr-natalja@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-3535-0361>.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2026, vol. 18, no. 1, pp. 41–46*

DOI: 10.14529/mmph260105

AN EXACT ANALYTICAL SOLUTION TO A CERTAIN CLASS OF NONLINEAR ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS OF MEMBRANE ELECTROCHEMISTRY

N.O. Chubyr

*Kuban State University, Krasnodar, Russian Federation
e-mail: chubyr-natalja@mail.ru*

Abstract. Various boundary value problems with a small parameter at the highest derivative, i.e. singularly perturbed boundary value problems, arise in the mathematical modeling of transfer processes in electromembrane systems in the form of boundary value problems for systems of Nernst–Planck–

Poisson equations. At low current densities, these problems can be solved by various order reduction methods for a certain class of nonlinear ordinary differential equations. In some cases, general solutions to the equations can be found or they can be reduced using certain methods, for example, the boundary layer function method. However, at high current densities, the known methods of asymptotic solution should be modified, as the solution to the degenerate problem does not exist on the entire interval. To address this issue, model problems that admit exact analytical solutions are used to identify the structure of the asymptotic solution, i. e. the asymptotic scale and other parameters. Besides, the exact solution of differential equations is crucial, as it allows for a thorough and complete analysis of the problem. The exact solution also acts as a benchmark for methods of approximate analytical solutions, for example, asymptotic, as well as numerical methods of solutions. The most effective method for solving high-order nonlinear equations is the order reduction method, which allows finding a particular solution. This paper proposes a method of order reduction for a specific class of nonlinear ordinary differential equations and gives examples of specific nonlinear equations and their exact solutions.

Keywords: nonlinear differential equations; exact solution; order reduction.

References

1. Kovalenko A.V., Nikonenko V.V., Chubyr N.O., Urtenov M.Kh. Mathematical Modeling of Electrolysis of a Dilute Solution with Accounting for Water Dissociation-Recombination Reactions. *Desalination*, 2023, Vol. 550, p. 116398. DOI: 10.1016/j.desal.2023.116398
2. Polyanin A.D. Constructing Solutions to Nonlinear Equations of Mathematical Physics using Exact Solutions to Simpler Equations. *Vestnik NIYAU MIFI*, 2024, Vol. 13, no. 2, pp. 66–75. DOI:10.26583/vestnik.2024.318
3. Polyanin A.D., Sorokin V.G. Tochnye resheniya nelinejnyh konservativno-diffuzionnyh metodov giperbolicheskogo tipa s zapazdyvaniem (Exact Solutions of Nonlinear Conservative Diffusion Methods of Hyperbolic Type with Delay). *Vestnik NIYAU MIFI*, 2014, Vol. 3, no. 2, pp. 141–146. DOI: 10.1134/S2304487X14020163
4. Budanov V.M. Method for Constructing Periodic Solutions of Nonlinear Differential Equations. *Differential Equations*, 2024, Vol. 60, no. 5, pp. 590–603. DOI: 10.31857/S0374064124050022
5. Polyanin A.D., Linchuk L.V. Construction of Exact Solutions of Nonlinear Differential Equations by the Splitting Method. *Vestnik nacional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI"*, 2020, Vol. 9, no. 1, pp. 32–44. DOI: 10.1134/S2304487X20010071
6. Bayrash R.A., Skubachevskii A.L. Ordinary Differential Equations of Even Order with Integral Conditions. *Doklady Rossijskoj Akademii Nauk. Matematika, informatika, processy upravleniya*, 2025, Vol. 522, no. 1, pp. 7–10. DOI: 10.31857/S2686954325020024
7. Polyanin, A.D. Pereopredelennye sistemy nelinejnyh obyknovennyh differencial'nyh uravnenij s parametrami i ih prilozheniya (Redefined Systems of Nonlinear Ordinary Differential Equations with Parameters and their Applications). *Vestnik nacional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI"*, 2016, Vol. 5, no. 2, pp. 122–136. DOI: 10.1134/S2304487X16010119
8. Chubyr N.O., Kovalenko A.V., Urtenov M.H., Lajpanova Z.M. Asimptoticheskoe reshenie kraevoj zadachi dlya stacionarnoj rasshirennoj sistemy uravnenij Nernsta–Planka i Puassona (Asymptotic Solution of a Boundary Value Problem for a Stationary Extended System of Nernst–Planck and Poisson Equations). *Science Prospects*, 2024, no. 2(173), pp. 72–81. (in Russ.).
9. Nazarov R.R., Kovalenko A.V., Bostanov R.A., Urtenov M.H. Mathematical Modeling of the Influence of Dissociation/Recombination Rate Constant Dependence on Salt Ion Transport in the Diffusion Layer Near an Ion-Exchange Membrane. *Journal of Samara State Technical University, Ser. Physical and Mathematical Sciences*, 2025, Vol. 29, no. 1, pp. 109–128. DOI: 10.14498/vsgtu2101
10. Korenev B.G. *Vvedenie v teoriyu Besselevykh funkcij* (Introduction to the Theory of Bessel Functions). Moscow, Nauka Publ., 1971, 287 p. (in Russ.).

Received July 21, 2025

Information about the author

Chubyr Natalia Olegovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Applied Mathematics, Kuban State University, Krasnodar, Russian Federation, e-mail: chubyr-natalja@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-3535-0361>.

ТОЧНОЕ КВАДРАТИЧНОЕ ПОЛИНОМИАЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ ОПИСАНИЯ НЕОДНОРОДНОГО ТЕЧЕНИЯ КУЭТТА– ПУАЗЕЙЛЯ В БЕСКОНЕЧНОМ ГОРИЗОНТАЛЬНОМ СЛОЕ С ПРОНИЦАЕМЫМИ ГРАНИЦАМИ

К.В. Губарева¹, Е.Ю. Просвиряков^{2,3}, А.В. Еремин¹

¹ Самарский государственный технический университет, г. Самара, Российская Федерация

² Институт машиноведения, г. Екатеринбург, Российская Федерация

³ Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Российская Федерация

E-mail: r.kristina2017@mail.ru

Аннотация. Исследуется установившееся течение вязкой несжимаемой жидкости в плоском канале с проницаемыми параллельными стенками. В отличие от классических постановок, на верхней границе задаются не только значение скорости, но и её первые два пространственных градиента. Такой подход позволяет моделировать течения с локальной неоднородностью вдоль канала. Нижняя стенка неподвижна и удовлетворяет условию прилипания. Учитывается постоянный градиент давления произвольного знака и равномерный нормальный поток через обе границы. Задача решена аналитически в безразмерной форме, где определяющую роль играют число Рейнольдса, число Рейнольдса на основе скорости проницаемости и безразмерный градиент давления. Проведён асимптотический анализ в предельных случаях слабой и сильной проницаемости. На основе структуры точного решения получена оценка толщины пограничного слоя при инъекции. Результаты подтверждены численным моделированием для реальных жидкостей и демонстрируют переход от вязко-доминированного к конвективно-доминированному режиму течения.

Ключевые слова: течение Куэтта–Пуазейля; проницаемые границы; аналитическое решение; число Рейнольдса; пограничный слой; градиент давления; нормальный поток; неоднородные граничные условия.

Введение

Исследование ламинарных течений вязкой несжимаемой жидкости между параллельными пластинами служит классической моделью для изучения фундаментальных закономерностей гидродинамики. Такие эталонные решения, как течение Куэтта (сдвиговое течение, вызванное движением стенки) и течение Пуазейля (напорное течение, обусловленное градиентом давления) [1, 2], на протяжении более века используются для верификации численных методов и построения более сложных моделей.

Однако в реальных технических и природных системах границы потока часто являются проницаемыми [3–7]. В таких приложениях, как системы охлаждения с пористыми элементами, микрофлюидные устройства для разделения компонентов или процессы фильтрации, сквозной поток через стенки играет ключевую роль в формировании структуры течения. Учет проницаемости качественно меняет картину течения: в отличие от чисто вязкого механизма переноса, характерного для непроницаемых каналов, нормальный поток вносит конвективную составляющую. Это приводит к формированию тонких пограничных слоёв, резкой неоднородности полей скорости и открывает возможности для управления течением, что широко используется в технологиях активного контроля пограничного слоя и теплообмена.

Большинство существующих моделей течений в каналах с проницаемыми стенками опирается на простые граничные условия прилипания, что ограничивает их применимость случаями, когда граница движется как единое целое [3, 8]. В то же время, на практике часто возникают ситуации, требующие учета неоднородности профиля скорости на границе, например, при сопряжении с внешним потоком, имеющим поперечные градиенты, или при локальном изменении свойств поверхности.

В настоящей работе предлагается обобщенная постановка задачи, в которой на верхней проницаемой границе задаются не только значение скорости, но и её первые два пространственных градиента [9–12]. Такой подход позволяет моделировать течения с локальной неоднородностью, не усложняя геометрию расчетной области. Нижняя стенка считается неподвижной и непроницаемой (условие прилипания). Модель учитывает постоянный градиент давления произвольного знака и равномерный нормальный поток (инжекцию или отсос) через обе стенки.

Целью работы является получение точного аналитического решения сформулированной краевой задачи, выявление определяющих безразмерных параметров и анализ структуры течения. Особое внимание уделено асимптотическому поведению решения и количественной оценке толщины пограничного слоя при интенсивной инъекции.

Актуальность исследования обусловлена его приложениями в области микрофлюидики и теплообмена. Например, в биохимических анализаторах с полупроницаемыми мембранами или в системах охлаждения турбинных лопаток с пористыми покрытиями гидродинамическое поле существенно зависит от сквозного потока, и классические модели оказываются неприменимы.

Таким образом, вклад данной работы заключается в построении замкнутого аналитического решения для обобщенной модели течения с проницаемыми границами, учитывающей неоднородные кинематические условия и градиент давления. В отличие от большинства известных решений, ограниченных однородными граничными условиями, предложенная постановка охватывает более широкий класс практических задач. На основе решения строго выводятся ключевые безразмерные параметры подобия: число Рейнольдса Re , число Рейнольдса проницаемости Re_w и безразмерный градиент давления S . Это позволяет провести универсальный анализ перехода от вязко-доминированного к конвективно-доминированному режиму течения. Полученные результаты могут служить как для верификации численных методов, так и для проектирования технических систем с управляемыми проницаемыми поверхностями.

Постановка задачи и аналитическое решение

Рассматривается установившееся (стационарное) течение ньютоновской несжимаемой жидкости в плоском канале, образованном двумя бесконечными параллельными пластинами, расположенными на фиксированном расстоянии h друг от друга (рис. 1) [13, 14]. Пластины обладают свойством проницаемости, что означает возможность сквозного прохождения жидкости через них в направлении, нормальном к их поверхности. Такая постановка широко используется в теории течений с инъекцией или отсосом и находит применение в задачах охлаждения пористых поверхностей, микрофлюидики и фильтрации.

Вдоль канала, то есть в направлении оси x , поддерживается постоянный градиент давления. Это означает, что давление p является линейной функцией координаты x :

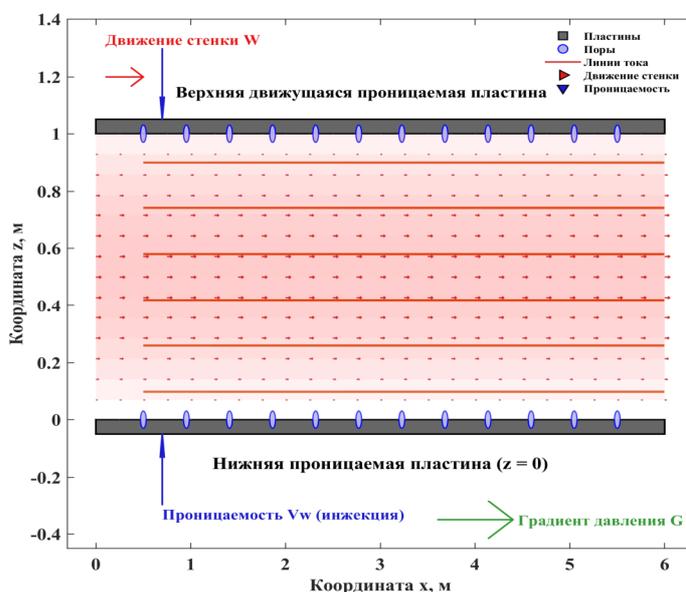


Рис. 1. Схема течения с проницаемыми границами

$$\frac{dp}{dx} = G, \quad (1)$$

где G – заданная константа, имеющая размерность паскаль на метр (Па/м). Важно подчеркнуть, что знак величины G не фиксирован априори. Если $G < 0$, то давление убывает вдоль направления течения, что соответствует благоприятному градиенту давления и способствует ускорению потока. Если же $G > 0$, то давление возрастает вдоль течения – это неблагоприятный градиент, который может приводить к замедлению потока, образованию зон обратного течения или даже к

отрыву пограничного слоя при достаточной интенсивности. Случай $G = 0$ соответствует отсутствию перепада давления, и движение обусловлено исключительно движением границ и проницаемостью.

Выбор системы координат осуществляется следующим образом: ось x направлена вдоль пластин, совпадая с основным направлением течения; ось z направлена перпендикулярно пластинам, причем нижняя пластина расположена в плоскости $z = 0$, а верхняя – в плоскости $z = h$. Ось y вводится для описания возможной слабой пространственной неоднородности течения вдоль канала; в рамках данного анализа она рассматривается как поперечная координата, отсчитываемая от некоторого фиксированного продольного сечения. Таким образом, течение считается двумерным в плоскости (x, z) , но продольная компонента скорости может иметь слабую зависимость от координаты y .

Предполагается, что нормальная компонента скорости постоянна по всему объему:

$$V_z = V_w = \text{const}, \quad (2)$$

где V_w – скорость проницаемости, имеющая размерность м/с. Положительное значение $V_w > 0$ соответствует инжекции (втеканию жидкости в канал через обе пластины), отрицательное $V_w < 0$ – отсосу (вытеканию жидкости из канала). Поперечная компонента скорости отсутствует:

$$V_y = 0. \quad (3)$$

Продольная компонента скорости V_x представляется в виде разложения по степеням координаты y до второго порядка включительно:

$$V_x = U(z) + yu_1(z) + \frac{y^2}{2}u_2(z). \quad (4)$$

Такая форма разложения является естественным обобщением одномерного профиля и позволяет учесть линейные и квадратичные градиенты скорости вдоль канала. Функции $U(z)$, $u_1(z)$ и $u_2(z)$ являются неизвестными и подлежат определению из уравнений движения и граничных условий. Размерности этих функций следующие: $[U] = \text{м/с}$, $[u_1] = \text{с}^{-1}$, $[u_2] = \text{м}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, что обеспечивает корректную размерность всех слагаемых в правой части уравнения (4).

Граничные условия формулируются на основе физической постановки задачи. На нижней пластине ($z = 0$) предполагается, что жидкость полностью прилипает к неподвижной стенке. Это классическое условие прилипания (*no-slip condition*) означает, что продольная скорость обращается в нуль для любого значения y . Подстановка $z = 0$ в (4) и приравнивание нулю коэффициентов при всех степенях y дает:

$$U(0) = 0, u_1(0) = 0, u_2(0) = 0. \quad (5)$$

На верхней пластине ($z = h$) задается конкретный профиль скорости, который не обязательно соответствует простому условию прилипания. Вместо этого предписываются значения самой скорости и ее первых двух градиентов по y . Это может моделировать, например, сопряжение с внешним течением, имеющим ненулевые поперечные градиенты, или движение стенки с пространственно изменяющейся скоростью. Математически это выражается в виде:

$$U(h) = W, u_1(h) = A, u_2(h) = B, \quad (6)$$

где W – характерная скорость (м/с), A – параметр линейного градиента (с^{-1}), B – параметр квадратичного градиента ($\text{м}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$). В частном случае $A = 0$, $B = 0$ эти условия сводятся к классическому прилипанию на движущейся стенке со скоростью W .

Уравнение неразрывности для несжимаемой жидкости имеет вид:

$$\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z} = 0. \quad (7)$$

Подстановка предположений (2)–(4) в это уравнение показывает, что $\partial V_z / \partial z = 0$ (поскольку $V_z = \text{const}$), $\partial V_y / \partial y = 0$ (поскольку $V_y = 0$), и $\partial V_x / \partial x = 0$ (поскольку в разложении (4) явная зависимость от x отсутствует, а y рассматривается как локальный параметр). Следовательно, уравнение неразрывности выполняется тождественно во всем объеме канала.

Уравнение движения вдоль оси x для стационарного течения вязкой несжимаемой жидкости (уравнение Навье–Стокса без временной производной) записывается как [15, 16]:

$$\rho \left(V_x \frac{\partial V_x}{\partial x} + V_y \frac{\partial V_x}{\partial y} + V_z \frac{\partial V_x}{\partial z} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 V_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V_x}{\partial z^2} \right). \quad (8)$$

С учетом предположений (2)–(4) и того, что $\partial V_x/\partial x = 0$, $V_y = 0$, уравнение (8) существенно упрощается. Левая часть (инерционные члены) сводится к одному слагаемому:

$$\rho V_z \frac{\partial V_x}{\partial z} = \rho V_w \frac{\partial V_x}{\partial z}, \quad (9)$$

поскольку V_x зависит от z только через функции $U(z)$, $u_1(z)$, $u_2(z)$. Правая часть уравнения (8) также упрощается: вторая производная по x равна нулю, а производные по y и z легко вычисляются из разложения (4):

$$\frac{\partial^2 V_x}{\partial y^2} = u_2(z), \quad \frac{\partial^2 V_x}{\partial z^2} = U''(z) + y u_1''(z) + \frac{y^2}{2} u_2''(z), \quad (10)$$

где штрихи обозначают дифференцирование по z . Градиент давления задан соотношением (1), поэтому $-\partial p/\partial x = -G$.

Подставляя (9) и (10) в (8), получаем:

$$\rho V_w \left(U'(z) + y u_1'(z) + \frac{y^2}{2} u_2'(z) \right) = -G + \mu \left(U'' + y u_1'' + \frac{y^2}{2} u_2'' + u_2 \right), \quad (11)$$

Поскольку это равенство должно выполняться для любого y , приравняем коэффициенты при одинаковых степенях y в левой и правой частях. Приравнявая коэффициенты при y^0 , y^1 и y^2 , получаем систему из трех независимых обыкновенных дифференциальных уравнений:

при y^0 :

$$\rho V_w U' = -G + \mu(U'' + u_2); \quad (12)$$

при y^1 :

$$\rho V_w u_1' = \mu u_1''; \quad (13)$$

при y^2 :

$$\rho V_w u_2' = \mu u_2''. \quad (14)$$

Эта система, дополненная граничными условиями (5) и (6), полностью определяет искомые функции $U(z)$, $u_1(z)$ и $u_2(z)$. Уравнения (13) и (14) являются линейными однородными уравнениями второго порядка с постоянными коэффициентами и имеют идентичную структуру. Уравнение (12) является линейным неоднородным, причем его правая часть зависит от функции $u_2(z)$, которая находится из уравнения (14).

Перейдем к решению системы уравнений (12)–(14) в безразмерной форме [17, 18]. Целью такого перехода является выявление основных физических параметров, определяющих структуру течения, и приведение задачи к универсальному виду, не зависящему от конкретных размерных величин. Для этого вводится набор характерных масштабов, основанных на геометрии канала и кинематических условиях на верхней стенке.

В качестве масштаба длины выбирается расстояние между пластинами h , в качестве масштаба скорости – величина W , заданная в граничном условии (6). Масштаб давления естественным образом определяется из вязкого члена в уравнении Навье–Стокса и равен $\mu W/h$. На основе этих масштабов вводятся следующие безразмерные переменные:

$$\zeta = \frac{z}{h}, \quad \tilde{U} = \frac{U}{W}, \quad \tilde{u}_1 = \frac{u_1 h}{W}, \quad \tilde{u}_2 = \frac{u_2 h^2}{W}. \quad (15)$$

Безразмерная координата ζ изменяется в интервале от 0 до 1, что соответствует нижней и верхней пластинам соответственно. Введенные безразмерные функции $\tilde{U}(\zeta)$, $\tilde{u}_1(\zeta)$, $\tilde{u}_2(\zeta)$ теперь являются величинами порядка единицы, что удобно для численного анализа и физической интерпретации.

Переход к безразмерным переменным в уравнениях (13) и (14) требует замены производных. Поскольку $d/dz = (1/h)d/d\zeta$, то $u_i' = (W/(h^i))\tilde{u}_i'/h = (W/(h^{i+1}))\tilde{u}_i'$ и $u_i'' = (W/(h^{i+2}))\tilde{u}_i''$, где штрихи в правой части обозначают дифференцирование по ζ . Подстановка этих соотношений в уравнения (13) и (14) и сокращение общих множителей приводит к одинаковой безразмерной форме для обоих уравнений:

$$\tilde{u}_i'' - \text{Re}_w \tilde{u}_i', \quad i = 1, 2, \quad (16)$$

где введено безразмерное число, играющее ключевую роль в задачах с проницаемыми границами. Это число Рейнольдса, основанное на скорости проницаемости:

$$\text{Re}_w = \frac{V_w h}{\nu}, \quad \nu = \frac{\mu}{\rho}. \quad (17)$$

Здесь ν – кинематическая вязкость жидкости ($\text{м}^2/\text{с}$), а Re_w физически представляет собой отношение конвективного переноса импульса, обусловленного нормальным потоком через стенки, к диффузионному переносу, обусловленному вязкостью. При $\text{Re}_w \ll 1$ вязкие силы доминируют, и течение распределено по всему сечению канала. При $|\text{Re}_w| \gg 1$ конвективный перенос локализует течение в тонких слоях вблизи границ.

Граничные условия (5) и (6) в безразмерной форме принимают следующий вид. На нижней стенке ($\zeta = 0$):

$$\tilde{U}(0) = 0, \quad \tilde{u}_1(0) = 0, \quad \tilde{u}_2(0) = 0. \quad (18)$$

На верхней стенке ($\zeta = 1$) вводятся безразмерные параметры, характеризующие заданные градиенты скорости:

$$a = \frac{Ah}{W}, \quad b = \frac{bh^2}{W}, \quad (19)$$

что позволяет записать условия как:

$$\tilde{U}(1) = 1, \quad \tilde{u}_1(1) = a, \quad \tilde{u}_2(1) = b. \quad (20)$$

Параметры a и b являются безразмерными и описывают относительную интенсивность линейного и квадратичного градиентов скорости по сравнению с основной скоростью W .

Рассмотрим теперь решение уравнения (16). Это линейное однородное дифференциальное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами. его характеристическое уравнение имеет корни $r = 0$ и $r = \text{Re}_w$, поэтому общее решение записывается в виде:

$$\tilde{u}_i(\zeta) = C_i + D_i e^{\text{Re}_w \zeta}, \quad (21)$$

где C_i и D_i – константы интегрирования, подлежащие определению из граничных условий (18) и (20).

Применяя условие $\tilde{u}_i(0) = 0$, получаем:

$$C_i = -D_i. \quad (22)$$

Подстановка этого результата в (21) дает:

$$\tilde{u}_i(\zeta) = D_i (e^{\text{Re}_w \zeta} - 1). \quad (23)$$

Далее, используя условие на верхней стенке $\tilde{u}_i(1) = K_i$, где $K_1 = a$ и $K_2 = b$, находим:

$$D_i = \frac{K_i}{e^{\text{Re}_w} - 1}. \quad (24)$$

Окончательно, подставляя (24) в (23), получаем явные выражения для безразмерных профилей:

$$\tilde{u}_1(\zeta) = a \frac{e^{\text{Re}_w \zeta} - 1}{e^{\text{Re}_w} - 1}, \quad (25)$$

$$\tilde{u}_2(\zeta) = b \frac{e^{\text{Re}_w \zeta} - 1}{e^{\text{Re}_w} - 1}, \quad (26)$$

Эти формулы представляют собой точные аналитические решения для коэффициентов разложения продольной скорости. Их структура – экспоненциальная, что является прямым следствием наличия нормального потока через проницаемые границы. В пределе $\text{Re}_w \rightarrow 0$ с использованием разложения $e^x \approx 1 + x$ эти выражения переходят в линейные зависимости $\tilde{u}_i(\zeta) = K_i \zeta$, что соответствует классическому случаю отсутствия проницаемости. При больших положительных значениях Re_w профили становятся резко неоднородными, концентрируясь вблизи верхней стенки.

Для приведения уравнения (12) к безразмерному виду необходимо ввести еще один ключевой безразмерный параметр, характеризующий влияние перепада давления. Из уравнения (12):

$$\rho V_w U' = -G + \mu(U'' + u_2),$$

выразим все члены через безразмерные переменные (15). Учитывая, что $U' = (W/h)\tilde{U}'$ и $U'' = (W/h^2)\tilde{U}''$, а также подставляя $u_2 = (W/h^2)\tilde{u}_2$, получаем после деления всего уравнения на $\mu W/h^2$:

$$\frac{\rho V_w h}{\mu} \tilde{U}' = -\frac{G h^2}{\mu W} + \tilde{U}'' + \tilde{u}_2.$$

Первый коэффициент в левой части является числом Re_w , определенным в (17). Второй коэффициент в правой части – это безразмерный градиент давления, который удобно определить со знаком «минус», чтобы положительное значение параметра соответствовало движению, вызванному падением давления вдоль течения. Таким образом, вводим:

$$S = \frac{h^2}{\mu W} (-G). \quad (27)$$

Этот параметр S является безразмерным и может принимать любые вещественные значения. При $G < 0$ (давление падает вдоль x) имеем $S > 0$; при $G > 0$ (давление растет) – $S < 0$; при отсутствии градиента давления ($G = 0$) – $S = 0$. С учетом этого определения безразмерная форма уравнения (12) принимает окончательный вид:

$$\tilde{U}'' - Re_w \tilde{U}' = -S - \tilde{u}_2(\zeta). \quad (28)$$

Правая часть этого уравнения полностью определена, поскольку функция $\tilde{u}_2(\zeta)$ уже найдена и задается формулой (26). Для упрощения записи введем вспомогательную константу:

$$C = \frac{b}{e^{Re_w} - 1}, \quad (29)$$

что позволяет переписать (26) в компактной форме:

$$\tilde{u}_2(\zeta) = C(e^{Re_w \zeta} - 1). \quad (30)$$

Подстановка (30) в правую часть уравнения (28) дает:

$$-S - \tilde{u}_2(\zeta) = -S - C e^{Re_w \zeta} + C = -(S - C) - C e^{Re_w \zeta}. \quad (31)$$

Таким образом, уравнение (28) представляет собой линейное неоднородное дифференциальное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами и правой частью, состоящей из константы и экспоненциальной функции. Его общее решение строится как сумма общего решения однородного уравнения и частного решения неоднородного.

Однородное уравнение, соответствующее (28), имеет вид $\tilde{U}'' - Re_w \tilde{U}' = 0$ и, как и ранее, имеет общее решение:

$$\tilde{U}_h(\zeta) = D_1 + D_2 e^{Re_w \zeta}, \quad (32)$$

где D_1 и D_2 – новые константы интегрирования.

Для нахождения частного решения $\tilde{U}_p(\zeta)$ воспользуемся методом неопределенных коэффициентов [19]. Правая часть (31) состоит из двух слагаемых: константы $-(S - C)$ и экспоненты $-C e^{Re_w \zeta}$. Для константного слагаемого частное решение ищем в виде линейной функции $\alpha \zeta$, поскольку константа является решением однородного уравнения (корень $r = 0$). Подстановка $\alpha \zeta$ в левую часть (28) дает $-Re_w \alpha$, что должно равняться $-(S - C)$. Отсюда:

$$\alpha = \frac{S - C}{Re_w}. \quad (33)$$

Для экспоненциального слагаемого $-C e^{Re_w \zeta}$ стандартный анзац $\beta e^{Re_w \zeta}$ не подходит, так как $e^{Re_w \zeta}$ также является решением однородного уравнения (корень $r = Re_w$). В этом случае частное решение следует искать в виде $\beta \zeta e^{Re_w \zeta}$. Вычислим его производные:

$$\frac{d}{d\zeta} (\beta \zeta e^{Re_w \zeta}) = \beta e^{Re_w \zeta} + \beta Re_w \zeta e^{Re_w \zeta},$$

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}(\beta\zeta e^{\text{Re}_w \zeta}) = 2\beta \text{Re}_w e^{\text{Re}_w \zeta} + \beta \text{Re}_w^2 \zeta e^{\text{Re}_w \zeta}.$$

Подстановка в левую часть (28):

$$[2\beta \text{Re}_w e^{\text{Re}_w \zeta} + \beta \text{Re}_w^2 \zeta e^{\text{Re}_w \zeta}] - \text{Re}_w[\beta e^{\text{Re}_w \zeta} + \beta \text{Re}_w \zeta e^{\text{Re}_w \zeta}] = \beta \text{Re}_w e^{\text{Re}_w \zeta}.$$

Это должно равняться $-C e^{\text{Re}_w \zeta}$, откуда:

$$\beta \text{Re}_w = -C, \quad \beta = -\frac{C}{\text{Re}_w}. \quad (34)$$

Собирая оба вклада, получаем частное решение:

$$\tilde{U}_p(\zeta) = \frac{S-C}{\text{Re}_w} \zeta - \frac{C}{\text{Re}_w} \zeta e^{\text{Re}_w \zeta}. \quad (35)$$

Полное общее решение уравнения (28) есть сумма (32) и (35):

$$\tilde{U}(\zeta) = D_1 + D_2 e^{\text{Re}_w \zeta} + \frac{S-C}{\text{Re}_w} \zeta - \frac{C}{\text{Re}_w} \zeta e^{\text{Re}_w \zeta}. \quad (36)$$

Теперь необходимо определить константы D_1 и D_2 из граничных условий (18) и (20) для функции \tilde{U} . Первое условие $\tilde{U}(0) = 0$ дает:

$$D_1 = -D_2. \quad (37)$$

Подставим это соотношение в (36):

$$\tilde{U}(\zeta) = D_2(e^{\text{Re}_w \zeta} - 1) + \frac{S-C}{\text{Re}_w} \zeta - \frac{C}{\text{Re}_w} \zeta e^{\text{Re}_w \zeta}. \quad (38)$$

Второе граничное условие $\tilde{U}(1) = 1$ приводит к уравнению:

$$1 = D_2(e^{\text{Re}_w} - 1) + \frac{S-C}{\text{Re}_w} - \frac{C}{\text{Re}_w} e^{\text{Re}_w}. \quad (39)$$

Решая это уравнение относительно D_2 , получаем:

$$D_2 = \frac{1 - \frac{S-C}{\text{Re}_w} + \frac{C}{\text{Re}_w} e^{\text{Re}_w}}{e^{\text{Re}_w} - 1} = \frac{1 + \frac{S}{\text{Re}_w} + \frac{C}{\text{Re}_w} (e^{\text{Re}_w} - 1)}{e^{\text{Re}_w} - 1}. \quad (40)$$

Вспоминая определение константы C из (29), замечаем, что $C(e^{\text{Re}_w} - 1) = b$. Это позволяет существенно упростить выражение (40):

$$D_2 = \frac{1 + \frac{S}{\text{Re}_w} + \frac{b}{\text{Re}_w}}{e^{\text{Re}_w} - 1} = \frac{1 + \frac{S+b}{\text{Re}_w}}{e^{\text{Re}_w} - 1}. \quad (41)$$

Соответственно, из (37):

$$D_1 = \frac{1 + \frac{S+b}{\text{Re}_w}}{e^{\text{Re}_w} - 1}. \quad (42)$$

Таким образом, функция $\tilde{U}(\zeta)$ полностью определена формулами (36), (41) и (42). В совокупности с (25) и (26) это завершает построение полного аналитического решения задачи в безразмерной форме.

Проведем анализ полученного решения в предельных случаях. Начнем с предела малых чисел Рейнольдса, $\text{Re}_w \rightarrow 0$, который соответствует ситуации слабой проницаемости или высокой вязкости [20, 21]. В этом случае все экспоненциальные функции раскладываются в ряд Тейлора:

$$e^{\text{Re}_w \zeta} = 1 + \text{Re}_w \zeta + \frac{(\text{Re}_w \zeta)^2}{2} + \frac{(\text{Re}_w \zeta)^3}{6} + O(\text{Re}_w^4),$$

$$e^{\text{Re}_w} - 1 = \text{Re}_w + \frac{\text{Re}_w^2}{2} + \frac{\text{Re}_w^3}{6} + O(\text{Re}_w^4).$$

Подстановка этих разложений в (25) и (26) с точностью до первого порядка по Re_w дает:

$$\tilde{u}_1(\zeta) = a \left[\zeta + \frac{Re_w}{2} (\zeta^2 - \zeta) + O(Re_w^2) \right], \quad (43)$$

$$\tilde{u}_2(\zeta) = b \left[\zeta + \frac{Re_w}{2} (\zeta^2 - \zeta) + O(Re_w^2) \right]. \quad (44)$$

Для основного профиля $\tilde{U}(\zeta)$ в пределе $Re_w \rightarrow 0$ уравнение (28) переходит в уравнение Пуазейля с дополнительным источником:

$$\tilde{U}_0''(\zeta) = -S - b\zeta. \quad (45)$$

Двукратное интегрирование этого уравнения с учетом граничных условий $\tilde{U}_0(0) = 0$, $\tilde{U}_0(1) = 1$ приводит к полиномиальному решению третьей степени:

$$\tilde{U}_0(\zeta) = \left(1 + \frac{S}{2} + \frac{b}{2} \right) \zeta - \frac{S}{2} \zeta^2 - \frac{b}{6} \zeta^3. \quad (46)$$

Этот результат полностью согласуется с классической теорией течения Куэтта–Пуазейля, обобщенной на случай квадратичной неоднородности на верхней стенке.

Теперь рассмотрим противоположный предел больших положительных чисел Рейнольдса [22, 23], $Re_w \rightarrow +\infty$, который описывает режим сильной инжекции. В этом случае $e^{Re_w} \gg 1$, и для $\zeta < 1$ справедливо приближение:

$$\frac{e^{Re_w \zeta} - 1}{e^{Re_w} - 1} \approx \frac{e^{Re_w \zeta}}{e^{Re_w}} = e^{-Re_w(1-\zeta)}. \quad (47)$$

Следовательно, профили (25) и (26) приобретают вид:

$$\tilde{u}_1(\zeta) \approx a e^{-Re_w(1-\zeta)}, \quad \tilde{u}_2(\zeta) = b e^{-Re_w(1-\zeta)}. \quad (48)$$

Эти функции экспоненциально малы во всем объеме канала, за исключением тонкой области вблизи верхней стенки, где $1-\zeta = O(1/Re_w)$. Аналогичное поведение демонстрирует и профиль $\tilde{U}(\zeta)$, который стремится к нулю при $\zeta < 1$ и быстро нарастает до единицы вблизи $\zeta = 1$.

Характерная толщина области, в которой происходит этот резкий переход, определяется из условия, что аргумент экспоненты в (47) имеет порядок единицы:

$$Re_w(1-\zeta) = O(1). \quad (49)$$

Переходя к размерным переменным с помощью $\zeta = z/h$, получаем:

$$Re_w \frac{h-z}{h} = O(1), \quad h-z = O\left(\frac{h}{Re_w}\right). \quad (50)$$

Таким образом, толщина пограничного слоя у верхней стенки оценивается как:

$$\delta \sim \frac{h}{Re_w}. \quad (51)$$

Эта оценка является прямым следствием структуры точного аналитического решения и не требует дополнительных гипотез. Она справедлива при $Re_w \gg 1$ и описывает локализацию течения в тонком слое у верхней пластины в случае инжекции ($V_w > 0$). В случае отсоса ($V_w < 0$, $Re_w \rightarrow -\infty$) аналогичный пограничный слой формируется у нижней стенки, и его толщина также оценивается как $\delta \sim h/|Re_w|$.

Полученное решение является строгим аналитическим результатом для поставленной краевой задачи с учетом постоянного градиента давления произвольного знака, проницаемости границ и неоднородных кинематических условий на верхней стенке. Оно применимо для анализа течений в каналах с проницаемыми поверхностями, возникающих в задачах фильтрации, теплообмена и микрофлюидики.

Методика численного моделирования

Численное моделирование выполнено на основе полученного аналитического решения [24, 25]. Для верификации решения и визуализации пространственной структуры течения проведены расчеты для трех реальных ньютоновских жидкостей: воды, глицерина и этиленгликоля при температуре 20 °С. Физические свойства жидкостей (плотность ρ и динамическая вязкость μ) взяты из справочных данных.

Геометрические и кинематические параметры задачи зафиксированы следующим образом: расстояние между пластинами $h = 10$ мм, скорость верхней стенки $W = 0,5$ см/с, параметры градиента скорости $A = 0,1$ с⁻¹ и $B = 0,002$ м⁻¹·с⁻¹, скорость проницаемости $V_w = 0,2$ см/с (инжекция), градиент давления $G = -5$ Па/м.

Расчетная область дискретизирована с использованием неравномерной сетки по координате z , сгущенной вблизи верхней стенки ($z = h$) для точного разрешения тонкого пограничного слоя при больших значениях Re_w . По координате y использована равномерная сетка на интервале $[-10, 10]$ см. Для каждой жидкости вычисляются безразмерные параметры $Re = Wh/\nu$, $Re_w = V_w h/\nu$, $a = Ah/W$, $b = Bh^2/W$ и $S = h^2(-G)/(\mu W)$.

Поле продольной скорости $V_x(y, z)$ вычисляется по формуле (4) с подстановкой аналитических выражений для $U(z)$, $u_1(z)$ и $u_2(z)$. На основе этого поля численно определяются производные $\partial V_x/\partial z$ и $\partial V_x/\partial y$ с использованием центральных разностей второго порядка точности, что позволяет рассчитать поля завихренности и напряжений сдвига. Все вычисления выполнены в среде MATLAB R2023b с двойной точностью. Для предотвращения численной неустойчивости при $|Re_w| < 10^{-12}$ используется предельный полиномиальный вариант решения (46) [26].

Результаты и их обсуждение

Для верификации полученного аналитического решения и исследования влияния физических свойств жидкости на структуру течения был проведен расчетный эксперимент. Результаты демонстрируют качественно различное поведение течения в зависимости от соотношения между вязкостью жидкости и интенсивностью проницаемости.

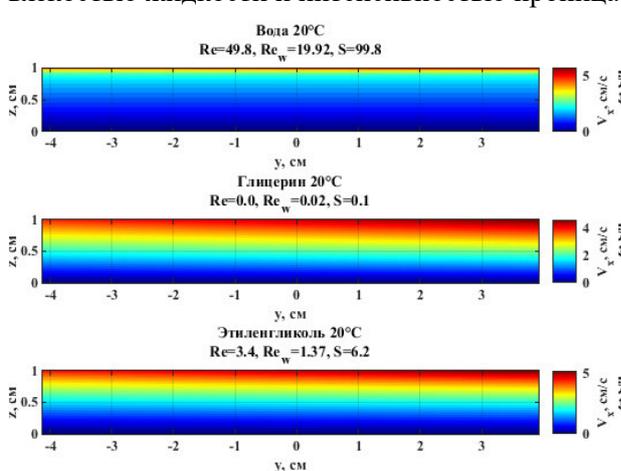


Рис. 2. Поля продольной компоненты скорости V_x для различных жидкостей

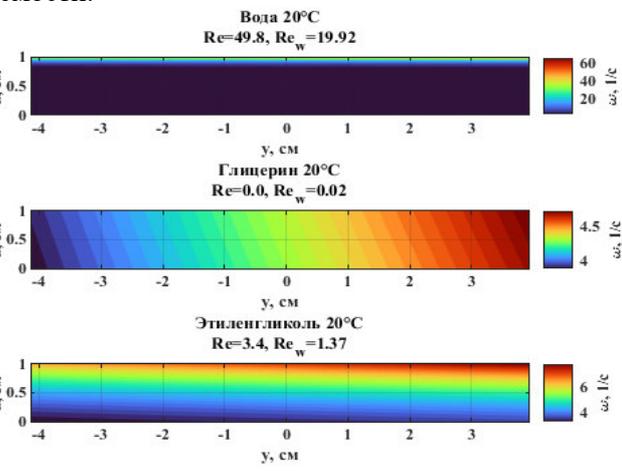


Рис. 3. Поля завихренности ω для различных жидкостей

На рис. 2 представлены поля продольной компоненты скорости V_x для всех трех жидкостей. Несмотря на идентичные граничные условия и геометрию, профили существенно различаются. Вода, обладающая наименьшей вязкостью, демонстрирует наиболее выраженную неоднородность вблизи верхней стенки, что является следствием высокого значения $Re_w = 19,92$. Напротив, глицерин с его высокой вязкостью ($\mu = 1,49$ Па·с) характеризуется почти линейным профилем скорости по всему сечению канала ($Re_w = 0,027$), что указывает на доминирование вязких сил. Этиленгликоль занимает промежуточное положение. Полученные результаты находятся в качественном соответствии с выводами асимптотического анализа.

Структура течения более полно раскрывается при анализе поля завихренности $\omega = \partial V_x/\partial z$, представленного на рис. 3. Для воды наблюдается резкий пик завихренности в тонком слое у

верхней стенки, что подтверждает наличие конвективно-доминированного пограничного слоя. У глицерина распределение завихренности практически однородно, что типично для течений, управляемых вязкостью. Этиленгликоль вновь демонстрирует переходный характер. Сравнение этих полей с профилями скорости позволяет сделать вывод о том, что именно градиент скорости, а не ее абсолютное значение, определяет локальную динамику вязкого трения.

Этот вывод подтверждается и распределением напряжений сдвига $\tau = \mu \partial V_x / \partial z$, показанным на рис. 4. Несмотря на то, что градиент скорости у воды максимален, ее низкая вязкость приводит к умеренным напряжениям. В то же время, глицерин, несмотря на малый градиент скорости, создает значительно более высокие напряжения сдвига из-за своей высокой вязкости. Это подчеркивает важность комплексного учета обоих факторов: как кинематики течения, так и реологических свойств жидкости – при оценке сил трения в каналах с проницаемыми стенками.

Полная картина течения, включающая вклад нормальной компоненты скорости $V_z = V_w$, отражена в модулях полной скорости $|\vec{V}|$, изображенных на рис. 5. Видно, что для всех жидкостей

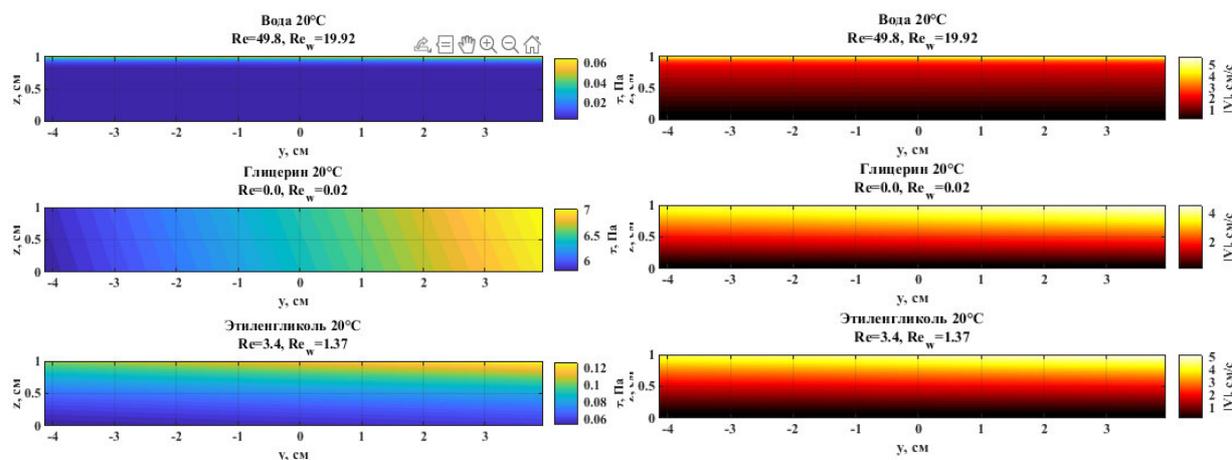


Рис. 4. Поля напряжений сдвига τ для различных жидкостей

Рис. 5. Поля модулей полной скорости $|\vec{V}|$ для различных жидкостей

нормальная компонента вносит заметный вклад, особенно в области, удаленной от верхней стенки. Для воды, где продольная скорость в ядре канала мала, модуль полной скорости определяется в основном проницаемостью, что приводит к почти однородному полю. Для глицерина, напротив, высокая продольная скорость в центре канала доминирует над нормальной компонентой. Это демонстрирует сложное взаимодействие между движением стенки, градиентом давления и проницаемостью.

Для количественного сравнения профилей на рис. 6 приведены зависимости продольной скорости V_x от координаты z в центральном сечении канала ($y = 0$). Четко видна тенденция: с увеличением числа Рейнольдса Re профиль становится все более «наполненным», стремясь к равномерному распределению. Глицерин ($Re = 0,034$) имеет почти треугольный профиль, характерный для чистого течения Куэтта, в то время как вода ($Re = 49,8$) демонстрирует почти плоский профиль в ядре потока с резким падением до нуля у нижней стенки. Этот переход от вязко-доминированного к конвективно-доминированному режиму является основной особенностью исследуемой задачи.

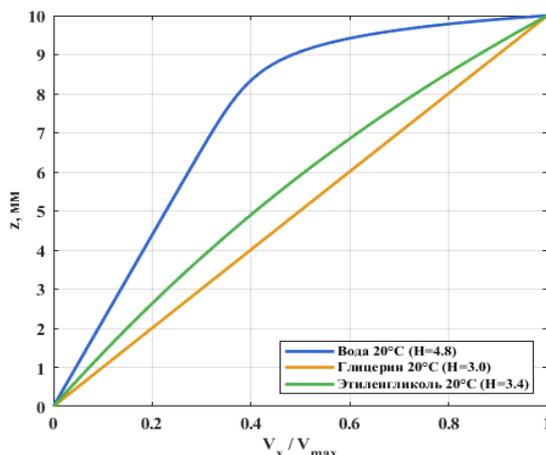


Рис. 6. Профили продольной скорости V_x ($y = 0$) для различных жидкостей

Обобщенная картина режимов течения представлена на карте режимов на рис. 7, где по осям отложены числа Рейнольдса Re и Re_w [29, 30]. Жидкости маркированы в соответствии с их физическими свойствами. Карта наглядно демонстрирует, что глицерин находится в области ламинарного, диффузионно-доминированного течения, в то время как вода расположена в зоне ламина-

нарного, но конвективно-доминированного режима. Эта визуализация подтверждает, что для полного описания течения в каналах с проницаемыми стенками недостаточно одного числа Рейнольдса; необходимо учитывать и число Re_w , характеризующее интенсивность проницаемости.

Для более глубокого анализа структуры пограничного слоя были рассчитаны его интегральные характеристики: толщина вытеснения δ^* и толщина импульса θ . На рис. 8, а) (слева) показаны нормированные профили скорости, а на рис. 8, б) (справа) – соответствующие интегральные толщины. Форма профиля для глицерина близка к линейной, что дает высокое значение формы $H = \delta^*/\theta \approx 2,5$, характерное для ламинарных течений с малым градиентом давления. Профиль для воды значительно более «наполненный», что приводит к снижению H до значения около 1,2, что типично для течений с благоприятным градиентом давления или сильной инжекцией.

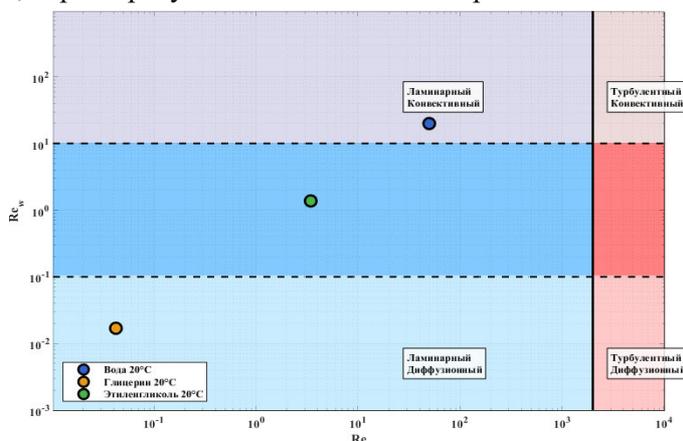


Рис. 7. Карта режимов течения в координатах Re и Re_w

Особое внимание было уделено верификации асимптотической оценки толщины пограничного слоя $\delta \sim h/Re_w$. На рис. 9 представлены результаты специализированного анализа для воды

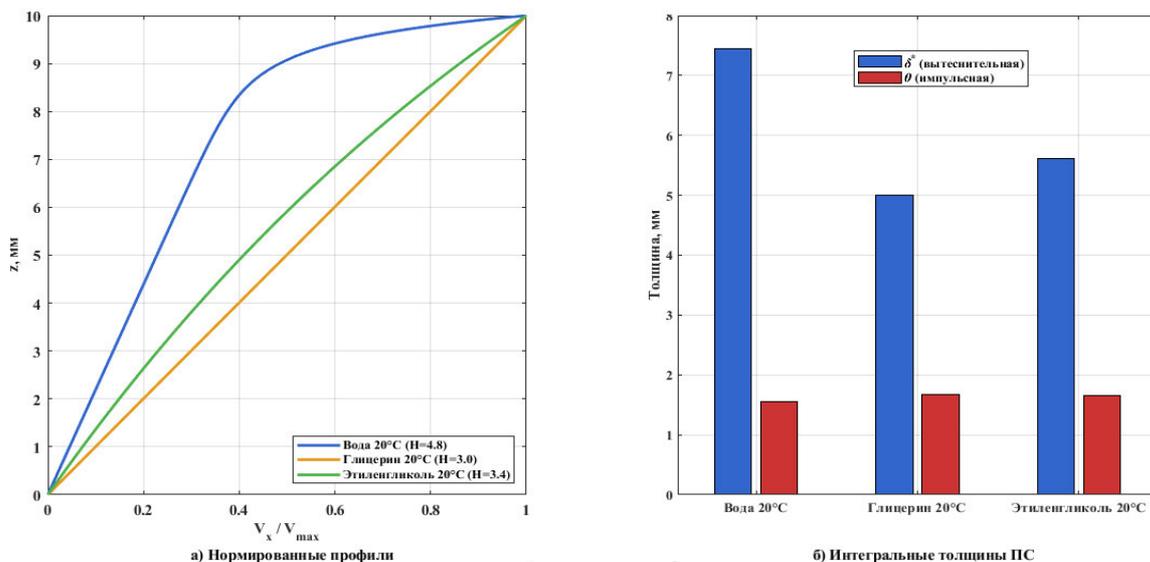


Рис. 8. Нормированные профили скорости и интегральные толщины пограничного слоя для различных жидкостей

при различных значениях Re_w . На рис. 9, а видно, как с ростом Re_w профиль скорости все более локализуется вблизи верхней стенки. Рис. 9, б показывает, что численно определенная толщина слоя δ_{99} (расстояние, на котором скорость достигает 99 % своего максимума) с высокой точностью следует асимптотической зависимости $\delta = 1/Re_w$. Рис. 9, в демонстрирует, что относительная ошибка этой оценки стремится к нулю при $Re_w \rightarrow \infty$, что является прямым подтверждением корректности проведенного асимптотического анализа.

Таким образом, проведенный численный эксперимент полностью подтверждает все ключевые положения аналитического решения [27, 28]. Полученные результаты демонстрируют, что структура течения в каналах с проницаемыми стенками определяется не только вязкостью и скоростью движения границ, но и интенсивностью нормального потока, которая контролирует локализацию течения. Введение числа Рейнольдса Re_w , основанного на скорости проницаемости, оказывается необходимым для описания перехода от диффузионного к конвективному режиму. Эти выводы имеют важное значение для прикладных задач в области микрофлюидики, фильтрации и

теплообмена, где управление течением через проницаемые поверхности является ключевым технологическим приемом.

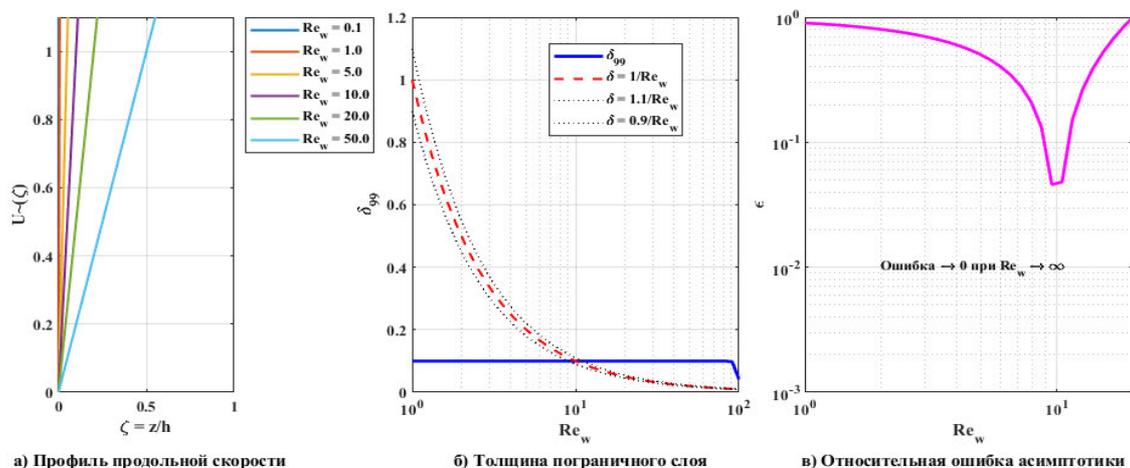


Рис. 9. Анализ пограничного слоя для воды: профили скорости, толщина слоя и относительная ошибка асимптотики

Заключение

В настоящей работе предложена и исследована модель установившегося течения вязкой несжимаемой жидкости в плоском канале с проницаемыми стенками, учитывающая одновременное влияние движения границ, нормального сквозного потока и постоянного градиента давления. В отличие от классических постановок, на верхней границе задан не только профиль скорости, но и его первые два пространственных градиента, что позволяет описывать более широкий класс практических течений, включая сопряжение с внешними потоками или локальные неоднородности.

Аналитическое решение задачи получено в замкнутой форме и выражено через три безразмерных параметра: число Рейнольдса Re , число Рейнольдса на основе скорости проницаемости Re_w и безразмерный градиент давления S . Такая параметризация позволяет единообразно описывать как вязко-доминированные, так и конвективно-доминированные режимы. Особое внимание уделено асимптотическому поведению решения: в пределе слабой проницаемости восстанавливается полиномиальный профиль, характерный для обобщенного течения Куэтта–Пуазейля, тогда как при сильной инжекции течение локализуется в тонком пограничном слое у верхней стенки.

На основе структуры точного решения строго выведена оценка толщины этого слоя, пропорциональная h/Re_w , что подтверждено численным анализом для реальных жидкостей. Полученные результаты демонстрируют, что для адекватного описания течений в каналах с проницаемыми поверхностями недостаточно традиционного числа Рейнольдса; необходимо дополнительно учитывать интенсивность нормального потока через параметр Re_w . Данная модель может служить теоретической основой для проектирования и оптимизации технических систем, где управление течением осуществляется именно через проницаемые границы.

Литература

1. Couette, M. Études sur le Frottement des Liquids / M. Couette // Ann. Chim. Phys., 1890, Vol. 21, P. 433–510.
2. Stokes, G.G. On the Effect of the Internal Friction of Fluid on the Motion of Pendulums / G.G. Stokes // Camb. Philo. Trans. – Cambridge: Printed at the Pitt Press, by John W. Parker, 1851. – Vol. 9. – P. 8–106.
3. Berman A.S. Laminar Flow in Channels with Porous Walls / A.S. Berman // J. Appl. Phys. – 1953. – Vol. 24, Iss. 9. – P. 1232–1235.

4. Yuan, S.W. Further Investigation of Laminar Flow in Channels with Porous Walls / S.W. Yuan // *J. Appl. Phys.* – 1956. – Vol. 27, Iss. 3. – P. 267–269.
5. Yuan, S.W. Laminar Pipe Flow with Injection and Suction through Porous Wall / S.W. Yuan, A.B. Finkelstein // *Trans. ASME.* – 1956. – Vol. 78, Iss. 4. – P. 719–724.
6. Sellars, J.R. Laminar Flow in Channels with Porous walls at High Suction Reynolds Numbers / J.R. Sellars // *J. Appl. Phys.* – 1955. – Vol. 26, Iss. 4. – P. 489–490.
7. Регирер, С.А. О приближенной теории течения вязкой несжимаемой жидкости в трубах с пористыми стенками / С.А. Регирер // *Изв. вузов. Матем.* – 1962. – № 5. – С. 65–74.
8. Wang, C.Y. Exact Solutions of the Steady-State Navier–Stokes Equations / C.Y. Wang // *Annu. Rev. Fluid Mech.* – 1991. – Vol. 23. – P. 159–177.
9. Аристов, С.Н. Неоднородные течения Куэтта / С.Н. Аристов, Е.Ю. Просвиряков // *Нелинейная динамика.* – 2014. – Т. 10, Вып. 2. – С. 177–182.
10. Горулева, Л.С. Неоднородное сдвиговое течение Куэтта–Пуазейля при движении нижней границы горизонтального слоя / Л.С. Горулева, Е.Ю. Просвиряков // *Химическая физика и мезоскопия.* – 2021. – Т. 23, № 4. – С. 403–411.
11. Горулева, Л.С. Однонаправленное установившееся неоднородное течение типа Куэтта с квадратичным профилем скорости по горизонтальной координате / Л.С. Горулева, Е.Ю. Просвиряков // *Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures.* – 2022. – Iss. 3. – P. 47–60.
12. Горулева, Л.С. Точные решения уравнений навье–стокса для описания неоднородных изобарических вертикально завихренных течений жидкости в областях с проницаемыми границами / Л.С. Горулева, Е.Ю. Просвиряков // *Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures.* – 2023. – Iss. 1. – P. 41–53.
13. Drazin, P.G., Riley N. *The Navier–Stokes Equations: A Classification of Flows and Exact Solutions.* – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2006. – 208 p.
14. Пухначев, В.В. Симметрии в уравнениях Навье–Стокса / В.В. Пухначев // *Успехи механики.* – 2006. – Т. 4, № 1. – С. 6–76.
15. Wang C.Y. Exact Solutions of the Unsteady Navier–Stokes Equations / C.Y. Wang // *Appl. Mech. Rev.* – 1989. – Vol. 42, Iss. 11S. – P. S269–S282.
16. Полянин, А.Д. Методы разделения переменных и точные решения нелинейных уравнений математической физики / А.Д. Полянин, А.И. Журов. – М.: ИПМех РАН, 2020. – 384 с.
17. Аристов, С.Н. Точные решения уравнений Навье–Стокса с линейной зависимостью компонент скорости от двух пространственных переменных / С.Н. Аристов, Д.В. Князев, А.Д. Полянин // *Теоретические Основы Химической Технологии.* – 2009. – Т. 43, № 5. – С. 547–566.
18. Aristov, S.N. Viscous Flow between Two Moving Parallel Disks. Exact Solutions and Stability Analysis / S.N. Aristov, I.M. Gitman // *J. Fluid Mech.* – 2002. – Vol. 464. – P. 209–215.
19. Zubarev, N.M. Exact Solutions for Layered Three-Dimensional Nonstationary Isobaric Flows of a Viscous Incompressible Fluid / N.M. Zubarev, E.Y. Prosviryakov // *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* – 2019. – Vol. 60, no. 6. – P. 1031–1037.
20. Privalova, V.V. Nonlinear Gradient Flow of a Vertical Vortex Fluid in a Thin Layer / V.V. Privalova, E.Yu. Prosviryakov, M.A. Simonov // *Rus. J. Nonlin. Dyn.* – 2019. – Vol. 15, Iss. 3. – P. 271–283.
21. Привалова, В.В. Нелинейное изобарическое течение вязкой несжимаемой жидкости в тонком слое с проницаемыми границами / В.В. Привалова, Е.Ю. Просвиряков // *Вычислительная механика сплошных сред.* – 2019. – Т. 12, № 2. – С. 230–242.
22. Burmasheva, N.V. Exact Solutions to Navier–Stokes Equations Describing a Gradient Nonuniform Unidirectional Vertical Vortex Fluid Flow / N.V. Burmasheva, E.Yu. Prosviryakov // *Dynamics.* – 2022. – Vol. 2, Iss. 2. – P. 175–186.
23. Towards Understanding the Algorithms for Solving the Navier-Stokes equations / S.V. Ershkov, E.Yu. Prosviryakov, N.V. Burmasheva, V. Christianto // *Fluid Dynamics Research.* – 2021. – Vol. 53, no. 4. – P. 044501.
24. Губарева, К.В. Численное решение задачи теплопроводности в пористой пластине с топологией трижды периодических минимальных поверхностей / К.В. Губарева, А.В. Еремин // *Advanced Engineering Research (Rostov-on-Don).* – 2025. – Т. 25, № 1. – С. 23–31.

25. Губарева, К.В. Исследование процесса теплопереноса в пористой среде со структурой ТПМП Фишера – Коха S / К.В. Губарева, А.В. Еремин // *Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures*. – 2024. – no. 4. – P. 70–82.

26. Mohammad, M. An Advanced Algorithm for Solving Incompressible Fluid Dynamics: from Navier–Stokes to Poisson Equations / M. Mohammad, A. Trunev // *Eur. Phys. J. Spec. Top.* – 2025. – Vol. 234. – P. 2191–2208.

27. Shankar, B.M. Stability of Plane Poiseuille and Couette Flows of Navier–Stokes–Voigt Fluid / B.M. Shankar, I.S. Shivakumara // *Acta Mechanica*. – 2023. – Vol. 234. – P. 4589–4609.

28. Transient Dispersion of a Reactive Solute in an Oscillatory Couette Flow through an Anisotropic Porous Medium / D Das., K. Mondal, N. Poddar, P. Wang // *Phys. Fluids*. – 2024. – Vol. 36. – P. 023610.

29. Málek, J. On Determining Navier's Slip Parameter at a Solid Boundary in Flows of a Navier–Stokes Fluid / J. Málek, K. Rajagopal // *Phys. Fluids*. – 2024. – Vol. 36. – P. 017114.

30. Bogoyavlenskij, O. The New Effect of Oscillations of the Total Angular Momentum Vector of Viscous Fluid / O. Bogoyavlenskij // *Phys. Fluids*. – 2022. – Vol. 34. – P. 083108.

Поступила в редакцию 4 ноября 2025 г.

Сведения об авторах

Губарева Кристина Владимировна – кандидат технических наук, доцент кафедры промышленной теплоэнергетики, Самарский государственный технический университет, г. Самара, Российская Федерация, e-mail: r.kristina2017@mail.ru.

Просвиряков Евгений Юрьевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры информационных технологий и систем управления ИРИТ-РтФ, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, заведующий сектором, главный научный сотрудник, Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова УрО РАН, Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: evgen_pros@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0002-2349-7801>

Еремин Антон Владимирович – доктор технических наук, доцент, проректор по научной работе, заведующий кафедрой «Промышленная теплоэнергетика» Самарский государственный технический университет, г. Самара, Российская Федерация, e-mail: a.v.eremin@list.ru.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2026, vol. 18, no. 1, pp. 47–62*

DOI: 10.14529/mmph260106

EXACT QUADRATIC POLYNOMIAL SOLUTION FOR DESCRIBING INHOMOGENEOUS COUETTE–POISEUILLE FLOW IN AN INFINITE HORIZONTAL LAYER WITH PERMEABLE BOUNDARIES

K.V. Gubareva¹, E.Yu. Prosviryakov^{2,3}, A.V. Eremin¹

¹ *Samara State Technical University, Samara, Russian Federation*

² *Ural Federal University, Ekaterinburg, Russian Federation*

³ *Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation*

E-mail: r.kristina2017@mail.ru

Abstract. The paper investigates steady flow of a viscous incompressible fluid in a plane channel with permeable parallel walls. In contrast to classical formulations, not only the velocity value but also its first two spatial gradients are specified at the upper boundary. This approach enables modeling flows with local inhomogeneity along the channel. The lower wall is stationary and satisfies the no-slip condition. A constant pressure gradient of arbitrary sign and a uniform normal flow through both boundaries are taken into account. The problem is solved analytically in dimensionless form, where the Reynolds number, the permeability-based Reynolds number, and the dimensionless pressure gradient play the de-

termining role. Asymptotic analysis is carried out for the limiting cases of weak and strong permeability. Based on the structure of the exact solution, an estimate for the boundary layer thickness under injection is derived. The results are verified by numerical simulations for real fluids and demonstrate the transition from a viscosity-dominated to a convection-dominated flow regime.

Keywords: Couette–Poiseuille flow; permeable boundaries, analytical solution; Reynolds number; boundary layer; pressure gradient, normal flow; inhomogeneous boundary conditions.

References

1. Couette M. Études sur le Frottement des Liquids. *Ann. Chim. Phys.*, 1890, Vol. 21, pp. 433–510.
2. Stokes G.G. On the Effect of the Internal Friction of Fluid on the Motion of Pendulums. *Camb. Philo. Trans.*, Cambridge: Printed at the Pitt Press, by John W. Parker, 1851, Vol. 9, pp. 8–106.
3. Berman A.S. Laminar Flow in Channels with Porous Walls. *J. Appl. Phys.*, 1953, Vol. 24, Iss. 9, pp. 1232–1235. DOI: 10.1063/1.1721476
4. Yuan S.W. Further Investigation of Laminar Flow in Channels with Porous Walls. *J. Appl. Phys.*, 1956, Vol. 27, Iss. 3, pp. 267–269. DOI: 10.1063/1.1722355.
5. Yuan S.W., Finkelstein A.B. Laminar Pipe Flow with Injection and Suction through Porous Wall. *Trans. ASME*, 1956, Vol. 78, Iss. 4, pp. 719–724. DOI: 10.1115/1.4013794
6. Sellars J.R. Laminar Flow in Channels with Porous Walls at high Suction Reynolds Numbers. *J. Appl. Phys.*, 1955, Vol. 26, Iss. 4, pp. 489–490. DOI: 10.1063/1.1722024
7. Regirer S.A. О приближенной теории течения вязкой несжимаемой жидкости в трубках с пористыми стенками (An Approximate Theory of the Flow of a Viscous Incompressible Fluid in Pipes with Porous Walls). *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Matematika*, 1962, no. 5, pp. 65–74. (in Russ.).
8. Wang C.Y. Exact Solutions of the Steady-State Navier–Stokes Equations. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 1991, Vol. 23, pp. 159–177. DOI: 10.1146/annurev.fl.23.010191.001111.
9. Aristov S.N., Prosviryakov E.Y. Inhomogeneous Couette flow, *Rus. J. Nonlin. Dyn.*, 2014, Vol. 10, no. 2, pp. 177–182. DOI: 10.20537/nd1402004
10. Goruleva L.S., Prosviryakov E.Yu. The Couette Poiseuille Inhomogeneous Shear Flow with the Motion of the Lower Boundary of the Horizontal Layer. *Chemical Physics and Mesoscopy*, 2021, Vol. 23, no. 4, pp. 403–411. DOI: 10.15350/17270529.2021.4.36.
11. Goruleva L.S., Prosviryakov E.Yu. Unidirectional Steady-State Inhomogeneous Couette Flow with a Quadratic Velocity Profile Along a Horizontal Coordinate. *Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures*, 2022, Iss. 3, pp. 47–60. (in Russ.). DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.047-060.
12. Goruleva L.S., Prosviryakov E.Yu. Exact Solutions to the Navier–Stokes Equations for Describing Inhomogeneous Isobaric Vertical Vortex Fluid Flows in Regions with Permeable Boundaries. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2023, Iss. 1, pp. 41–53. (in Russ.). DOI: 10.17804/2410-9908.2023.1.041-053.
13. Drazin P.G., Riley N. *The Navier–Stokes Equations: A Classification of Flows and Exact Solutions*. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2006, 208 p. DOI: 10.1017/CBO9780511526459
14. Pukhnachev V.V. Simmetrii v uravneniyakh Nav'e–Stoksa (Symmetries in the Navier–Stokes Equations). *Uspekhi mekhaniki*, 2006, Vol. 4, no. 1, pp. 6–76. (in Russ.).
15. Wang C.Y. Exact Solutions of the Unsteady Navier–Stokes Equations. *Appl. Mech. Rev.*, 1989, Vol. 42, Iss. 11S, pp. S269–S282. DOI: 10.1115/1.3152400.
16. Polyanin A.D., Zhyrov A.I. *Metody razdeleniya peremennykh i tochnye resheniya nelineynykh uravneniy matematicheskoy fiziki* (Methods of Separation of Variables and Exact Solutions to Nonlinear Equations of Mathematical Physics). Moscow, IPMekh RAN Publ., 2020, 384 p. (in Russ.).
17. Aristov S.N., Knyazev D.V., Polyanin A.D. Exact Solutions of the Navier–Stokes Equations with the Linear Dependence of Velocity Components on Two Space Variables. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2009, Vol. 43, no. 5, pp. 642–662. DOI: 10.1134/S0040579509050066.
18. Aristov S.N., Gitman I.M. Viscous Flow between Two Moving Parallel Disks. Exact Solutions and Stability Analysis. *J. Fluid Mech.*, 2002, Vol. 464, pp. 209–215. DOI: 10.1017/S0022112002001003.
19. Zubarev N.M., Prosviryakov E.Y. Exact Solutions for Layered Three-Dimensional Nonstationary Isobaric Flows of a Viscous Incompressible Fluid. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2019, Vol. 60, no. 6, pp. 1031–1037. DOI: 10.1134/S0021894419060075.

20. Privalova V.V., Prosviryakov E.Yu., Simonov M.A. Nonlinear Gradient Flow of a Vertical Vortex Fluid in a Thin Layer. *Rus. J. Nonlin. Dyn.*, 2019, Vol. 15, Iss. 3, pp. 271–283. DOI: 10.20537/nd190306.

21. Privalova V.V., Prosviryakov E.Y. Nonlinear Isobaric Flow of a Viscous Incompressible Fluid in a Thin Layer with Permeable Boundaries. *Computational Continuum Mechanics*, 2019, Vol. 12, Iss. 2, pp. 230–242. DOI: 10.7242/1999-6691/2019.12.2.20

22. Burmasheva N.V., Prosviryakov E.Yu. Exact Solutions to Navier–Stokes Equations Describing a Gradient Nonuniform Unidirectional Vertical Vortex Fluid Flow. *Dynamics*, 2022, Vol. 2, Iss. 2, pp. 175–186. DOI: 10.3390/dynamics2020009.

23. Ershkov S.V., Prosviryakov E.Yu., Burmasheva N.V., Christianto V. Towards Understanding the Algorithms for Solving the Navier–Stokes Equations. *Fluid Dynamics Research*, 2021, Vol. 53, no. 4, 044501. DOI: 10.1088/1873-7005/ac10f0

24. Gubareva K.V., Eremin A.V. Numerical Solution to the Problem of Thermal Conductivity in a Porous Plate with a Topology of Triply Periodic Minimal Surfaces. *Advanced Engineering Research (Rostov-on-Don)*, 2025, Vol. 25, no. 1, C. 23–31. DOI: 10.23947/2687-1653-2025-25-1-23-31.

25. Gubareva K.V., Eremin A.V. Studying the Heat Transfer Process in a Porous Medium with a Fischer–Koch S TPMS Structure. *Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures*, 2024, no. 4, pp. 70–82. DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4.070-082.

26. Mohammad M., Trunev A. An Advanced Algorithm for Solving Incompressible Fluid Dynamics: from Navier–Stokes to Poisson Equations. *The European Physical Journal Special Topics*, 2025, Vol. 234, pp. 2191–2208. DOI: 10.1140/epjs/s11734-024-01209-z

27. Shankar B.M., Shivakumara I.S. Stability of Plane Poiseuille and Couette Flows of Navier–Stokes–Voigt Fluid. *Acta Mechanica*, 2023, Vol. 234, pp. 4589–4609. DOI: 10.1007/s00707-023-03624-0.

28. Das D., Mondal K., Poddar N., Wang P. Transient Dispersion of a Reactive Solute in an Oscillatory Couette Flow through an Anisotropic Porous Medium. *Physics of Fluids*, 2024, Vol. 36, 023610. DOI: 10.1063/5.0184921.

29. Málek J., Rajagopal K. On Determining Navier's Slip Parameter at a Solid Boundary in Flows of a Navier–Stokes Fluid. *Physics of Fluids*, 2024, Vol. 36, 017114. DOI: 10.1063/5.0185585.

30. Bogoyavlenskij O. The New Effect of Oscillations of the Total Angular Momentum Vector of Viscous Fluid. *Physics of Fluids*, 2022, Vol. 34, 083108. DOI: 10.1063/5.0101870.

Received November 4, 2025

Information about the authors

Gubareva Kristina Vladimirovna is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor of the Department of Industrial Thermal Power Engineering, Samara State Technical University Samara, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-9845-8372>, e-mail: r.kristina2017@mail.ru.

Prosviryakov Evgenii Yurievich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Dept. of Information Technology and Automation, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russian Federation, Head of Sector, Sect. of Nonlinear Vortex Hydrodynamics, Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-2349-7801>, e-mail: evgen_pros@mail.ru.

Eremin Anton Vladimirovich is Dr. Sc. (Engineering), Associate Professor, Vice-Rector for Scientific Work, Head of the Department of Industrial Thermal Power Engineering, Samara State Technical University, Samara, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-2614-6329>, e-mail: a.v.eremin@list.ru.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК РАДИАЛЬНО-ОСЕВОЙ ТУРБИНЫ

А.А. Мартынов

АО СКБ «Турбина», г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: a.martynov@skb-turbina.ru

Аннотация. С использованием методов вычислительной газовой динамики проведено численное моделирование газодинамических характеристик радиально-осевой турбины агрегата наддува двигателя внутреннего сгорания. Исследовано влияние параметров расчётной сетки и выбора модели турбулентности на результаты численного моделирования. Сформулированы рекомендации по настройке расчётной модели, обеспечивающие наилучшее совпадение результатов численного моделирования с данными натурального эксперимента.

Ключевые слова: численное моделирование; вычислительная газовая динамика; газовая турбина.

Введение

Радиально-осевые турбины (рис. 1) находят широкое применение в агрегатах наддува двигателей внутреннего сгорания (ДВС), стационарных газотурбинных установках и вспомогательных газотурбинных двигателях небольшой мощности, в турбодетандерах, пневмостартерах.

Радиально-осевые турбины имеют следующие основные преимущества [1, 2].

1. При небольших мощностях коэффициент полезного действия (КПД) радиально-осевых турбин выше, чем у осевых.

2. Рабочие колеса радиально-осевых турбин проще в изготовлении и надёжнее благодаря простой конфигурации и малому числу лопаток.

3. В их ступени можно осуществить несколько больший тепलोперепад, т. к. при одинаковых напряжениях в рабочем колесе окружные скорости в радиально-осевых турбинах могут быть большими, чем в осевых.

Недостатками радиально-осевых турбин по сравнению с осевыми являются повышенные масса и размеры вращающегося рабочего колеса.

От газодинамической эффективности радиально-осевой турбины в значительной степени зависит эффективность установки, в состав которой она входит. В связи с этим при проектировании турбины важно иметь возможность достоверной оценки её газодинамических характеристик.

В настоящее время для расчёта газодинамических характеристик лопаточных машин широко применяются методы вычислительной газовой динамики (CFD). Для корректного использования данных методов требуется валидация соответствующих математических моделей, предполагающая в том числе выбор оптимальных настроек, обеспечивающих наилучшее совпадение результатов моделирования с данными натурального эксперимента.

В настоящей работе для численного исследования газодинамических характеристик выбрана радиально-осевая турбина агрегата наддува ДВС ТКР201 (рис. 1) [3], который применяется в составе двигателей внутреннего сгорания транспортного и энергетического назначения. Турбина имеет следующие параметры при номинальном режиме работы: степень понижения давления – 4, частота вращения рабочего колеса $n = 60\,000$ об/мин.

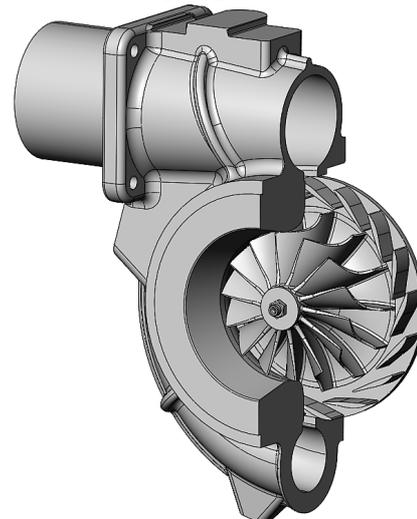


Рис. 1. Радиально-осевая турбина агрегата наддува ДВС

Описание математической модели течения

Математическая модель газовой динамики радиально-осевой турбины разработана с использованием коммерческого программного комплекса NUMECA, который является одним из наибо-

лее быстрых и точных CFD – программных комплексов, ориентированным на решение специализированных задач турбомашиностроения [4].

В расчётную модель включены газоподводящий канал (улитка), а также обладающие условием окружной периодичности один межлопаточный канал неподвижного соплового аппарата и один межлопаточный канал вращающегося рабочего колеса с притрактной полостью за колесом турбины (рис. 2).

Течение в радиально-осевой турбине описывается с использованием осреднённых по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS), которые должны быть замкнуты одной из моделей турбулентности [5].

В проведённых ранее исследованиях [6–11] для численного моделирования течения в радиально-осевой турбине применялись различные модели турбулентности. В работах [6, 7] для численных исследований принята модель $k-\epsilon$ без обоснования. В работах [8, 9, 10] принята модель SST, для которой отмечается завышение характеристик турбины относительно экспериментальных данных. В работе [11] принята модель Spalart–Allmaras, для которой также наблюдается завышение характеристик турбины относительно экспериментальных данных, при этом численное моделирование было проведено без учёта течения в полости за рабочим колесом.

Для уточнения модели турбулентности, обеспечивающей наилучшее совпадение результатов моделирования с данными натурного эксперимента, проведены численные исследования с использованием моделей Spalart–Allmaras, $k-\epsilon$, SST, нашедших широкое применение при моделировании течений в технических устройствах, в том числе в лопаточных машинах.

Все модели турбулентности используются в сочетании с расширенными функциями стенки (Extended Wall Function), что позволяет не разрешать сеткой область вязкого подслоя пограничного слоя и, соответственно, проводить расчёты на относительно грубых сетках. Расширенные функции стенки позволяют улучшить совпадение профиля параметров потока в области пограничного слоя с данными прямого численного моделирования уравнений Навье-Стокса (DNS) по сравнению со стандартными функциями стенки [12].

Численные исследования проведены как в стационарной постановке, так и с использованием нелинейного гармонического метода (NLH) – метода, который обеспечивает приблизительное нестационарное решение при умеренных затратах вычислительных ресурсов. Основная идея метода состоит в том, что возмущения потока, которые обуславливают его нестационарность, записываются относительно осреднённых во времени параметров течения и разложения Фурье во времени [12]. При этом с увеличением количества гармоник увеличивается также точность аппроксимации нестационарных параметров потока (рис. 3).

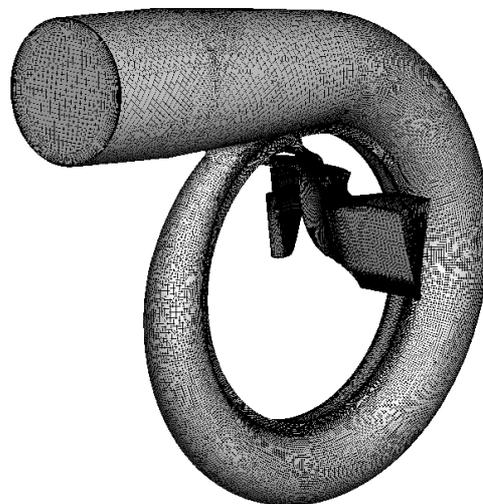


Рис. 2. Расчётная модель радиально-осевой турбины

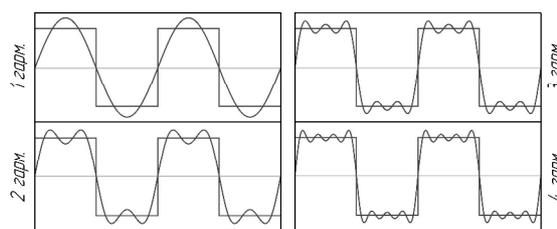


Рис. 3. Увеличение точности аппроксимации при увеличении количества гармоник

Выбор параметров расчётной сетки

В соответствии с рекомендациями [12] при использовании расширенных функций стенки первая ячейка в пристеночной области должна располагаться внутри вязкого подслоя ($y^+ < 5$), либо в логарифмическом подслое ($y^+ > 20$), где y^+ :

$$y^+ = \frac{y v^*}{\nu},$$

где y – расстояние от стенки до первого узла расчётной сетки, v^* – динамическая скорость, ν – кинематическая вязкость.

С целью повышения точности моделирования параметров потока в области вязкого подслоя было принято решение разместить пристеночную ячейку при $y^+ < 5$. Для исследования влияния высоты пристеночной ячейки h_1 на получаемую величину y^+ была проведена серия численных экспериментов, результаты которых изображены на рис. 4, 5.

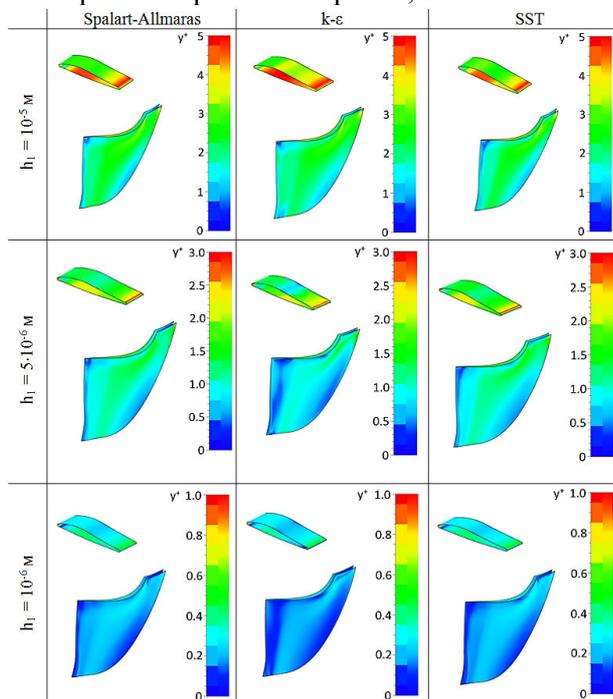


Рис. 4. y^+ в лопаточных венцах

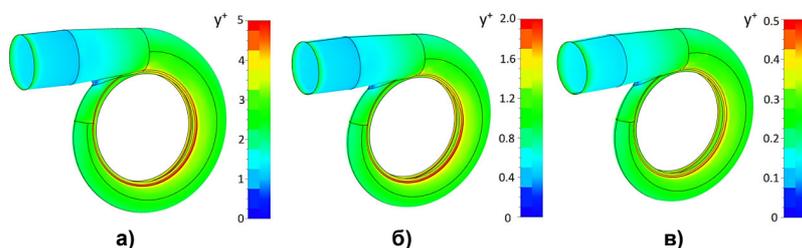


Рис. 5. y^+ в улитке: а) при $h_1 = 10^{-6}$ м; б) при $h_1 = 5 \cdot 10^{-6}$ м; в) при $h_1 = 10^{-6}$ м

Из рис. 4, 5 следует, что приемлемая величина y^+ обеспечивается при высоте пристеночной ячейки $h_1 = 5 \cdot 10^{-6}$ м.

Влияние количества элементов сетки на результаты расчёта течения в радиально-осевой турбине рассматривалось в работах [11, 13–16], однако в большинстве данных работ не приводилась информация о соответствующих величинах y^+ и, как следствие, рекомендуемый диапазон доста-

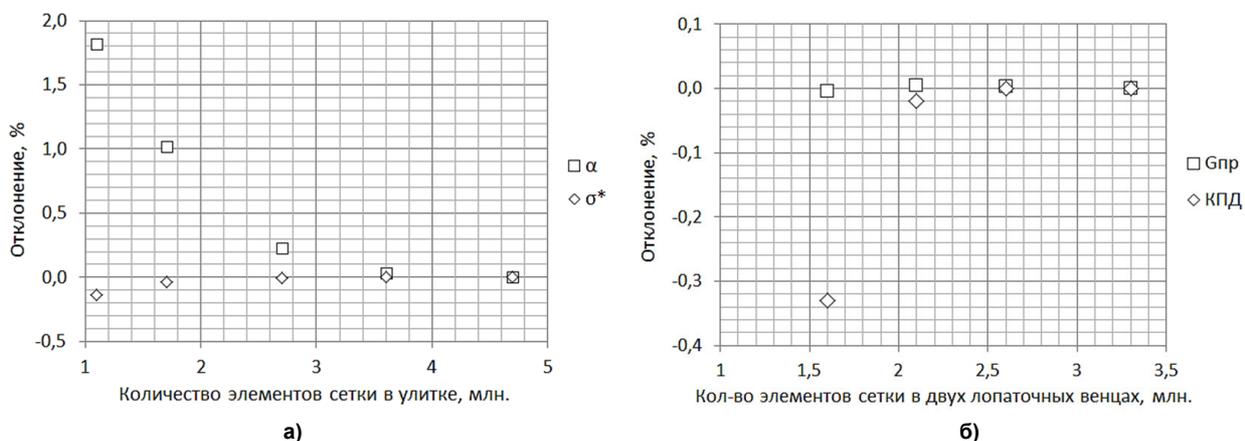


Рис. 6. Влияние количества элементов сетки на результаты моделирования: а) в улитке; б) в лопаточных венцах

точного количества элементов сетки оказался широким: (0,4;2,4) млн. ячеек. С целью исследования сеточной сходимости результатов проведено численное моделирование течения в турбине при номинальном режиме работы для различного количества элементов сетки и с учётом выбранной высоты пристеночной ячейки $h_1 = 5 \cdot 10^{-6}$ м (рис. 6 а, б).

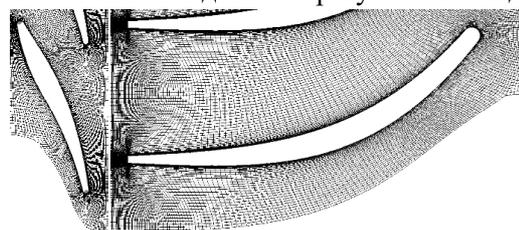
На рис. 6 а – угол потока на выходе из улитки, σ^* – коэффициент восстановления полного давления в улитке, КПД – адиабатический КПД турбины, $G_{пр}$ – пропускная способность турбины:

$$G_{пр} = \frac{G_{Г} \sqrt{T_{Г}^*}}{P_{Г}^*},$$

где $G_{Г}$ – расход газа на входе в турбину, кг/с, $T_{Г}^*$ – полная температура газа на входе в турбину, К, $P_{Г}^*$ – полное давление газа на входе в турбину, МПа.

Из рис. 6 следует, что $\approx 3,5$ млн элементов сетки в улитке и $\approx 2,4$ млн элементов сетки в лопаточных венцах являются достаточными по условию сеточной сходимости результатов моделирования.

Расчётная сетка построена с использованием входящих в состав программного комплекса NUMECA инструментов HEXPRESS/Hybrid и AutoGrid. Расчётная сетка в улитке (рис. 2) является гибридной гексадоминантной, в межлопаточных каналах (рис. 2, 7) – гексагональной блочно-структурированной, конформной на периодических поверхностях.

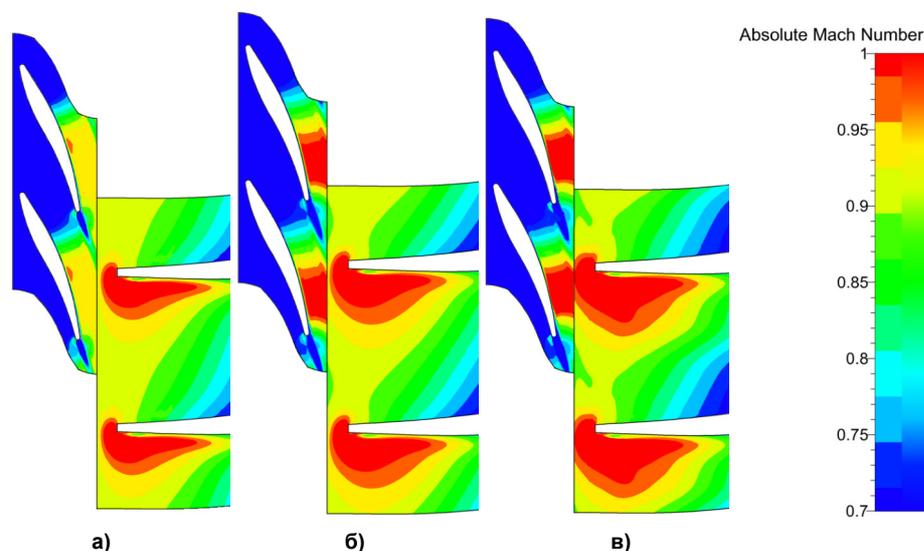


а) б)
Рис. 7. Расчётная сетка в межлопаточных каналах:
а) соплового аппарата; б) рабочего колеса

Взаимодействие ротор-статор

В связи с наличием возмущений параметров потока, возникающих между соседними лопаточными венцами, течение в лопаточных машинах имеет сложную структуру. Сложность моделирования течения связана также с тем, что в CFD программных комплексах осуществляется обработка и осреднение параметров потока на ротор-статор интерфейсах, располагающихся в непосредственной близости от входных и выходных кромок лопаточных венцов. В подобных конфигурациях расчётных моделей при сверхзвуковых скоростях потока могут возникать ошибочные нефизичные отражения ударных волн от поверхностей ротор-статор интерфейса [17].

Общим способом решения данной проблемы является использование стационарных неотражающих граничных условий, основанных на характеристическом анализе линеаризованных уравнений Эйлера [18]. Но, несмотря на то что данная методология основывается на линеаризации уравнений Эйлера, она также может быть применена к вязким потокам.



а) б) в)
Рис. 8. Число Маха в среднем сечении межлопаточных каналов:
а) поверхность смешения; б) неотражающее граничное условие; в) NLH

В рассматриваемой радиально-осевой турбине при номинальном режиме работы имеет место локальное сверхзвуковое течение в радиальном зазоре между сопловым аппаратом и рабочим колесом. Для исследования влияния обработки параметров потока на ротор-статор интерфейсе на структуру течения в межлопаточных каналах проведено численное моделирование для следующих вариантов постановки расчётной модели (рис. 8).

1. Стационарная постановка со стандартной поверхностью смещения с осреднением параметров потока на границе сопловой аппарат – рабочее колесо.

2. Стационарная постановка с неотражающим граничным условием с осреднением параметров потока на границе сопловой аппарат – рабочее колесо.

3. Расчёт с использованием нелинейного гармонического метода. В этом случае отсутствует осреднение параметров потока на границе сопловой аппарат – рабочее колесо и, как следствие, отсутствуют возможности для ошибочных нефизичных отражений ударных волн.

Из рис. 8 видно, что структура течения в межлопаточных каналах при использовании стандартной поверхности смещения и неотражающего граничного условия существенно отличаются. При этом результаты моделирования с неотражающим граничным условием близки к результатам, полученным с использованием нелинейного гармонического метода, принятого за эталон, и, как следствие, могут быть рекомендованы для проведения расчётов в стационарной постановке при наличии сверхзвукового течения в области ротор-статор интерфейса.

Течение в полости за рабочим колесом

В последнее время повышенное внимание уделяется влиянию течения в полости за вращающимся рабочим колесом на газодинамические характеристики лопаточной машины. Так в работах [19–21] проведено исследование влияния сопряжённого теплообмена в полости за рабочим колесом на газодинамические параметры центробежного компрессора.

В расчётную модель рассматриваемой радиально-осевой турбины также включена полость за вращающимся рабочим колесом. Проведено численное исследование влияния сопряжённого теплообмена с рабочим колесом и с окружающими корпусными деталями на газодинамические параметры радиально-осевой турбины (рис. 9). Теплообмен с корпусными деталями, контактирующими с полостью, учтён путём задания граничного условия температуры стенки.

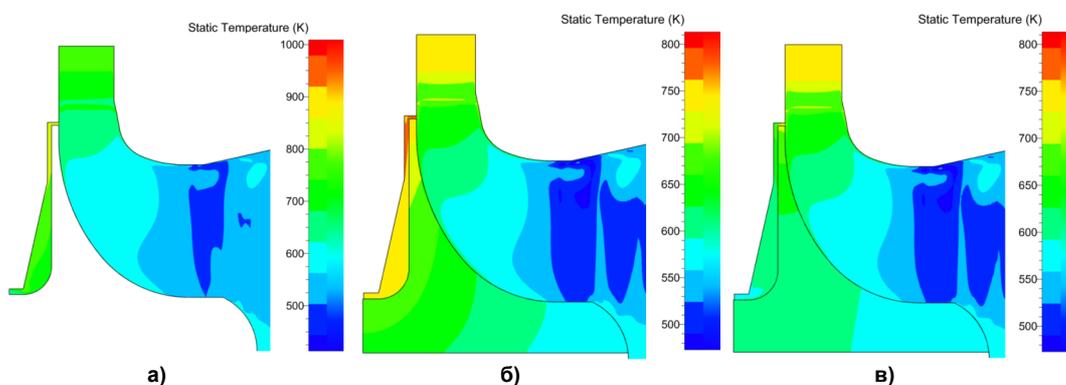


Рис. 9. Температура в полости за рабочим колесом: а) без учёта теплообмена; б) теплообмен с рабочим колесом; в) теплообмен с рабочим колесом и корпусом

Из рис. 9 видно, что температура в полости за колесом турбины существенно отличается в зависимости от постановки расчётной модели. Так при полной температуре газа на входе в турбину $T_r^* = 763$ К в расчётной модели без учёта теплообмена (рис. 8, а) наблюдается нефизичное завышение температуры в полости до ≈ 900 К. При учёте теплообмена с рабочим колесом температура в полости достигает 800 К (рис. 8 б), при дополнительном учёте теплообмена с окружающими корпусными деталями температура в полости составляет до 700 К (рис. 8, в). В зависимости от постановки расчётной модели изменяется также давление в полости за рабочим колесом, что оказывает влияние на величину осевого усилия, действующего на него. Результаты численных исследований сведены в табл. 1.

Механика

Из табл. 1 следует, что, учёт теплообмена в полости за рабочим колесом оказывает незначительное влияние на расчётную величину КПД турбины и существенное влияние на осевое усилие, действующее на рабочее колесо, и температуру рабочего колеса.

Таблица 1
Параметры турбины при различных вариантах моделирования течения в полости за рабочим колесом

Вариант расчётной модели	Отклонение КПД	Отклонение осевого усилия	Макс. температура колеса, К
Без учёта теплообмена	–	–	–
Теплообмен с рабочим колесом	–0,1 %	–3,2 %	755
Теплообмен с рабочим колесом и корпусными деталями	+0,2 %	–5,3 %	709

Сопоставление с экспериментом

Экспериментальные исследования радиально-осевой турбины проведены на установке, описанной в работе [22]. Результаты численного моделирования сопоставлены с данными натурального эксперимента для номинального режима работы радиально-осевой турбины (табл. 2). В расчётной модели теплообмен в полости с рабочим колесом и с окружающими корпусными деталями не учитывался.

Таблица 2
Сопоставление результатов численного моделирования с данными натурального эксперимента

Вариант расчётной модели	Отклонение КПД	Отклонение пропускной способности
Стационарный расчёт + неотражающее граничное условие + Spalart-Allmaras (Extended Wall Function)	–1,8 %	–0,5 %
Стационарный расчёт + неотражающее граничное условие + k-ε (Extended Wall Function)	–1,9 %	–0,55 %
Стационарный расчёт + неотражающее граничное условие + SST (Extended Wall Function)	–0,8 %	–0,4 %
NLH + SST (Extended Wall Function)	–0,4 %	–0,4 %

Из табл. 2 следует, что наилучшее совпадение с данными натурального эксперимента достигнуто для расчётной модели с использованием нелинейного гармонического метода и модели турбулентности SST (Extended Wall Function). Удовлетворительное совпадение также достигнуто для расчётной модели, включающей стационарную постановку, неотражающее граничное условие и модель турбулентности SST (Extended Wall Function).

Выводы

Проведены численные исследования влияния настроек численной модели на газодинамические характеристики радиально-осевой турбины агрегата наддува двигателя внутреннего сгорания.

Приемлемая для математической модели с расширенной функцией стенки величина y^+ достигнута при высоте пристеночной ячейки $h_1 = 5 \cdot 10^{-6}$ м в газоподводящем канале (улитке) и в лопаточных венцах.

Достаточными по условию сеточной сходимости количеством элементов являются $\approx 3,5$ млн элементов сетки в улитке и $\approx 2,4$ млн элементов сетки в лопаточных венцах.

Для получения корректной структуры потока при наличии областей сверхзвукового течения на поверхностях ротор-статор интерфейса при стационарной постановке расчётной модели с осреднением параметров потока на интерфейсе следует применять неотражающее граничное условие.

Учёт теплообмена между полостью, рабочим колесом и окружающими корпусными деталями оказывает незначительное влияние на расчётную величину КПД турбины и существенное влияние на осевое усилие, действующее на рабочее колесо, и температуру рабочего колеса.

Наилучшее совпадение с данными натурального эксперимента достигнуто для расчётной модели с использованием нелинейного гармонического метода и модели турбулентности SST (Extended Wall Function). Удовлетворительное совпадение также достигнуто для расчётной модели, включающей стационарную постановку, неотражающее граничное условие и модель турбулентности SST (Extended Wall Function).

Литература

1. Митрохин, В.Т. Выбор параметров и расчет центробежной турбины на стационарных и переходных режимах / В.Т. Митрохин. – М.: Машиностроение, 1974. – 227 с.
2. Шерстюк, А.Н. Радиально-осевые турбины малой мощности / А.Н. Шерстюк, А.Е. Зарянкин. – М.: Машиностроение, 1976. – 208 с.
3. Шестаков, Д.С. Создание высоконапорного агрегата наддува для семейства дизелей ДМ185 в рамках импортозамещения / Д.С. Шестаков, О.Г. Машков, А.А. Мартынов // Двигатель. – 2023. – № 1-3(145-147). – С. 20–24.
4. <http://numeca.com/product/fineturbo>
5. Современные подходы к моделированию турбулентности: учеб. пособие / А.В. Гарбарук, М.Х. Стрелец, А.К. Травин, М.Л. Шур. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2016. – 233 с.
6. Ali, L. The Number of Blade Effects on the Performance of a Mixed Turbine Rotor / L. Ali, H. Mohammed, H. Kamel // Engineering review. – 2017. – no. 37 (3). – P. 349–360.
7. Zhang, J. A 3D Inverse Design based Multidisciplinary Optimization on the Radial and Mixed-Inflow Turbines for Turbochargers / J. Zhang, M. Zangeneh // 11th International Conference on Turbochargers and Turbocharging. – London, 2014. – P. 399–410.
8. Investigation of Clearance Flows in Deeply Scalloped Radial Turbines / P. He, Z. Sun, H. Zhang *et al.* // Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy. – 2012. – Vol. 226, Iss. 8. – P. 951–962.
9. Zhang, J. Multidisciplinary and Multi-Point Optimization of Radial and Mixed-Inflow Turbines for Turbochargers using 3D Inverse Design Method / J. Zhang, M. Zangeneh // 14th International Conference on Turbochargers and Turbocharging. – 2020. – P. 263–277.
10. Yang, H. Design of a Radial Turbine for Wastegated Turbocharger / H. Yang, Q. Li, L. Hu // International Journal of Fluid Mechanics & Thermal Sciences. – 2020. – Vol. 6, Iss. 1. – pp. 19–26.
11. Zhu, C. Flow Characteristics and Loss Models of the Transonic Radial Turbine / C. Zhu, W. Zhuge, Y. Zhang // Applied Sciences. – 2022. – Vol. 12, no. 5. – p. 2453
12. NUMECA Theoretical manual FINE/Turbo v 13.1. – Brussels: NUMECA International, 2018. – 230 p.
13. Chelabi, M. Analysis of Three-Dimensional Accelerating Flow in a Mixed Turbine Rotor / M. Chelabi, H. Kamel, Y. Basova // Journal of Engineering Sciences. – 2021. – №8 (2). – 7 p.
14. Han, Z. Improved Thermodynamic and Aerodynamic Design Method and Off-Design Performance Analysis of a Radial Inflow Turbine for ORC System / Z. Han, X. Jia, P. Li // International Journal of Energy Research. – 2019. – no. 43. – 13 p.
15. Ketata, A. Numerical Study of a Vanned Mixed Flow Turbine Operating in Various Steady Flow Conditions / A. Ketata, Z. Driss // International Journal of Mechanics and Applications. – 2017. – Vol. 7, Iss. 1. – P. 24–30.
16. Design and Performance Analysis of Mixed Flow Turbine Rotors with Extended Blade Chord / T. Leonard, S. Spence, D. Filsinger, A. Starke // Proc. ASME Turbo Expo 2019: Turbomachinery Technical Conference and Exposition. Volume 2B: Turbomachinery. Phoenix, Arizona, USA. June 17–21, 2019. – 12 p.
17. NUMECA User manual FINE/Turbo v 13.1. – Brussels: NUMECA International, 2018. – 652 p.
18. Giles, M.B. Non-Reflecting Boundary Conditions for the Euler Equations / M.B. Giles // Technical report TR-88-1, MIT Computational Fluid Dynamics Laboratory. – 1988. – 47 p.
19. <https://www.numeca.de/en/case-studies-conjugate-heat-transfer/>
20. Муравейко, А.С. Влияние учёта теплообмена при расчётах центробежного компрессора на силы и моменты / А.С. Муравейко, Д.В. Ворошнин // 5-я международная конференция пользователей программных продуктов NUMECA и Concepts NREC. – СПб, 2019. – 19 с.

21. Хазов, Д.Е. Определение теплового состояния колеса центробежного компрессора вспомогательной силовой установки / Д.Е. Хазов, Н.А. Коробанова, Е.А. Балдина // *Материалы конференции: «Вычислительный эксперимент в аэроакустике и аэродинамике: труды 10-й российской конференции (16–21 сентября 2024 г., г. Светлогорск)»*. – Светлогорск, 2024. – С. 455–457.

22. Мартынов, А.А. Оценка параметров агрегата турбонадува поршневого транспортного двигателя на базе безмоторных испытаний / А.А. Мартынов, Б.А. Шароглазов, О.Г. Машков // *Транспорт Урала*. – 2015. – № 3(46). – С. 74–78.

Поступила в редакцию 10 января 2026 г.

Сведения об авторе

Мартынов Андрей Анатольевич – начальник отдела прочностных и газодинамических расчётов, АО СКБ «Турбина», г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: a.martynov@skb-turbina.ru.

*Bulletin of the South Ural State University
Series “Mathematics. Mechanics. Physics”
2026, vol. 18, no. 1, pp. 63–71*

DOI: 10.14529/mmph260107

MATHEMATICAL MODELING OF THE GAS DYNAMIC CHARACTERISTICS OF A RADIAL-AXIAL TURBINE

A.A. Martynov

JSC SKB Turbina, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: a.martynov@skb-turbina.ru

Abstract. Numerical simulation of the gas dynamic characteristics of a radial-axial turbine of an internal combustion engine boost unit has been performed using computational gas dynamics methods. The influence of the parameters of the computational grid and the choice of the turbulence model on the results of numerical modeling is investigated. Recommendations are formulated for setting up the computational model, ensuring the best match of the numerical simulation results with the data of the field experiment.

Keywords: numerical modeling; computational gas dynamics; gas turbine.

References

1. Mitrokhin V.T. *Vybor parametrov i raschet tsentrostremitel'noy turbiny na statsionarnykh i perekhodnykh rezhimakh* (Selection of Parameters and Calculation of Centripetal Turbine in Stationary and Transient Modes). Moscow: Mashinostroenie Publ., 1974, 227 p. (in Russ.).

2. Sherstyuk A.N., Zaryankin A.E. *Radial'no-osevye turbiny maloy moshchnosti* (Low-Power Radial-Axial Turbines). Moscow, Mashinostroenie Publ., 1976, 208 p. (in Russ.).

3. Shestakov D.S., Mashkov O.G., Martynov A.A. Sozdanie vysokonapornogo agregata nadduva dlya semeystva dizeley DM185 v ramkakh importozameshcheniya (Creation of a High-Pressure Boost Unit for the DM185 Family of Diesel Engines as Part of Import Substitution). *Dvigatel'*, 2023, no. 1-3(145-147), pp. 20–24. (in Russ.).

4. <http://numeca.com/product/fineturbo>

5. Garbaruk A.V., Strelets M.Kh., Travin A.K., Shur M.L. *Sovremennye podkhody k modelirovaniyu turbulentnosti: ucheb. posobie* (Modern Approaches to Turbulence Modeling: Textbook. Manual). St. Petersburg: Izd-vo Politekh. un-ta Publ., 2016, 234 p. (in Russ.).

6. Ali L., Mohammed H., Kamel H. The Number of Blade Effects on the Performance of a Mixed Turbine Rotor. *Engineering review*, 2017, no. 37 (3), pp. 349–360.

7. Zhang J., Zangeneh M. A 3D Inverse Design based Multidisciplinary Optimization on the Radial and Mixed-Inflow Turbines for Turbochargers. *11th International Conference on Turbochargers and Turbocharging*, London, 2014, pp. 399–410. DOI: 10.1533/978081000342.399

8. He P, Sun Z, Zhang H, Chen H, Tan C. Investigation of Clearance Flows in Deeply Scalloped Radial Turbines. *Proc. Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, 2012, Vol. 226, Iss. 8, pp. 951–962. DOI: 10.1177/0957650912460361.
9. Zhang J., Zangeneh M. Multidisciplinary and Multi-Point Optimization of Radial and Mixed-Inflow Turbines for Turbochargers using 3D Inverse Design Method. *14th Int. Conference on Turbochargers and Turbocharging*, 2020, pp. 263–277. DOI: 10.1201/9781003132172-19
10. Yang H., Li Q., Hu L. Design of a Radial Turbine for Wastegated Turbocharger. *International Journal of Fluid Mechanics & Thermal Sciences*, 2020, Vol. 6, Iss. 1, pp. 19–26. DOI: 10.11648/j.ijfmts.20200601.13
11. Zhu C, Zhuge W, Zhang Y. Flow Characteristics and Loss Models of the Transonic Radial Turbine. *Applied Sciences*, 2022, Vol. 12, no. 5, p. 2453. DOI: 10.3390/app12052453
12. NUMECA Theoretical manual FINE/Turbo v 13.1. – Brussels: NUMECA International, 2018, 230 p.
13. Chelabi M., Kamel H., Basova Y. Analysis of Three-Dimensional Accelerating Flow in a Mixed Turbine Rotor. *Journal of Engineering Sciences*, 2021, no. 8 (2), 7 p.
14. Han Z., Jia X., Li P. Improved Thermodynamic and Aerodynamic Design Method and Off-Design Performance Analysis of a Radial Inflow Turbine for ORC System. *International Journal of Energy Research*, 2019, no. 43, 13 p. DOI: 10.1002/er.4830
15. Ketata A., Driss Z. Numerical Study of a Vanned Mixed Flow Turbine Operating in Various Steady Flow Conditions. *International Journal of Mechanics and Applications*, 2017, Vol. 7, Iss. 1, pp. 24–30. DOI: 10.5923/j.mechanics.20170701.03
16. Leonard T, Spence S, Filsinger D, Starke A. Design and Performance Analysis of Mixed Flow Turbine Rotors with Extended Blade Chord. *Proc. ASME Turbo Expo 2019: Turbomachinery Technical Conference and Exposition*. Volume 2B: Turbomachinery. Phoenix, Arizona, USA. June 17–21, 2019. V02BT44A006. ASME. DOI: 10.1115/GT2019-90389
17. NUMECA User manual FINE/Turbo v 13.1. Brussels: NUMECA International, 2018, 652 p.
18. Giles, M.B. Non-Reflecting Boundary Conditions for the Euler Equations. Technical report TR-88-1, MIT Computational Fluid Dynamics Laboratory, 1988, 47 p.
19. <https://www.numeca.de/en/case-studies-conjugate-heat-transfer/>
20. Muraveyko A.S., Voroshnin D.V. Vliyaniye uchyeta teploobmena pri raschyetakh tsentrobezhnogo kompressora na sily i momenty (The effect of heat transfer accounting in the calculations of a centrifugal compressor on forces and torques). *5 mezhdunarodnaya konferentsiya pol'zovateley programmnykh produktov NUMECA i Concepts NREC (5th International NUMECA and Concepts NREC Software Users Conference)*, St. Petersburg, 2019, 19 p. (in Russ.).
21. Khazov D.E., Korobanova N.A., Baldina E.A. Thermal State Modelling of the Centrifugal Compressor Impeller of Auxiliary Power Unit. *Proc. 10th Russian Conference "Computational Experiment in Aeroacoustics and Aerodynamics"* (September 16–21, 2024, Svetlogorsk), Svetlogorsk, 2024, pp. 455–457. (in Russ.).
22. Sharoglazov B.A., Mashkov O.G., Martynov A.A. Evaluation of Turbocharging Unit Parameters in a Piston Vehicle Engine Through Motorless Tests. *Transport Urala*, 2015, no. 3(46), pp. 74–78. (in Russ.).

Received January 10, 2026

Information about the author

Martynov Andrey Anatolyevich is Head of the Department of Strength and Gas Dynamic Calculations, JSC SKB Turbina, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: a.martynov@skb-turbina.ru.

CAD/CAE NUMERICAL MODELING OF FIBER-REINFORCED 3D WOVEN COMPOSITE PARTS AND THEIR MACHINING PROCESS

E.I. Shchurova, I.A. Shchurov

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: shchurovaei@susu.ru, shchurovia@susu.ru

Abstract. Edge tools, such as drills, milling cutters, and turning tools, are increasingly used in the manufacture of parts made of 3D woven fiber-reinforced composite materials. The cutting process of non-rigid workpieces, such as turbine blades, is accompanied by noticeable elastic displacements which reduce the machining accuracy. To calculate cutting forces, chip formation should be simulated in the cutting zone, which significantly depends on the orientation of the workpiece fibers relative to the wedge of the cutting tool. Since workpiece deformations should be calculated selectively at separate points of the toolpath, the corresponding fragments of the workpiece with the specific fiber arrangement should be determined for cutting modelling. For this purpose, we need to develop a finite element model of the entire workpiece taking into account fibers and boundary layers and calculate the stress-strain state in the cutting zone during chip formation in the selected workpiece fragments. This research allowed solving these issues. We obtained mathematical relations for voxel modeling of the specified composite parts and calculation of their finite elements and developed computer programs to obtain the necessary geometric and physical models of chip formation mechanics. The calculations confirmed that the proposed numerical solutions are sufficient enough to be used by industrial production technologists to predict the accuracy of processing small-sized composite parts.

Keywords: finite-element modelling; voxel modelling; fiber-reinforced composite; 3D woven structure; edge cutting machining; chip formation.

Introduction

Fiber-reinforced composite materials (FRCM) are increasingly used to produce parts of complex spatial shapes [1, 2]. Among such materials we can highlight 3D woven composites: materials with orthogonal 3D structure, axial-radial-circular, axial-cross, radial-spiral structures and others. For example, the material with orthogonal structure called «Sepcarb Material» is described in the published research of the manufacture of Propulsion Nozzles [1]. In this part, straight fibers are arranged alternately along three coordinate axes. Fiber diameters for various composites are indicated in another paper and vary from 5 to 140 μm [2]. The development of these materials is inextricably linked with the calculation of material strength parameters. Such calculations are often performed using numerical simulations based on both macro- and micro models. Micro models, in turn, contain models of the fibers and matrices themselves. In recent decades models which describe boundary layers between fibers and matrix have been developed [3]. It is common knowledge that the idealized description of fibers and layers as solid and hollow cylinders does not correspond to real composites. Microphotographs of fibers show their cross-sectional shapes that are different from circles and non-smooth fiber surfaces with many micro protrusions [3]. These fiber features affect the nature of the composite samples destruction. If a crack appears in the composite when it is stretched, then the crack propagates through the composite matrix along a certain plane. However, the fibers of this composite can break at some distance from this plane [3, 4]. All these features of destruction must be considered in chip formation modeling during machining composite workpieces with turning tools, drills, milling cutters and other cutting tools [5].

As is known, modeling of composite plastic deformation and fracture is a typical task when studying the impact of a sharp indenter, which penetrates an armor, vehicle crash tests, and simulation of machining of composite workpieces using edge tools. In all these cases, the best adequacy is provided by the use of micro models of composites. Therefore, a large number of publications reflect various methods of FRCM micro simulation. On this basis, such composite modeling programs as the TexGen program, created at the University of Nottingham, have been developed and even are distributed free of charge [6, 7]. However, this modeling has one significant drawback – it is necessary to use a large num-

ber of partition sub-regions. If the fiber has a diameter of 10 μm , and the boundary layer has a thickness of 1 μm , then the size of the subregion cannot exceed 1 μm . Even for a part with dimensions of 1 mm, 10^9 subregions must be applied. In particular, one of the publications characterizes fragments of a composite using meshes with the number of finite element nodes from 10^5 to 10^{10} . In this case, the construction of subregions of the matrix layers bordering the fibers is not carried out. Furthermore, no examples of filling a body of arbitrary complex shape, such as a turbine blade using this structure were detected. It is also clear, that such a large model for solving dynamic nonlinear problems cannot be used on most of modern computers.

If mesh methods, for example, the finite element method – FEM, make it possible, within certain limits, to change the element sizes and to refine the mesh, then recently developed meshfree calculation methods (Smoothed Particle Hydrodynamics - SPH and Smoothed Particle Galerkin – SPG) exclude such remeshing. Often, physical modeling requires the joint use of both mesh and meshfree partitioning of the simulated areas in integrated calculation model. Considering all of the above, geometric modeling becomes relevant, combining the possibilities of subsequent generation of mesh and meshfree models, which makes it possible to describe the boundaries of modeled objects in view of irregularities (roughness, chips) of their surfaces. Voxel modeling is a type of geometric modeling, the advantage of which is the simplicity of the subsequent development of both mesh (FEM) and meshfree (SPH, SPG) models. Current technologies for composite parts manufacturing are often similar to those for producing metal parts: pressure molding, pressing, and extrusion through spinnerets. Specific processes such as winding, lay-up process, etc. are also used. All these processes in the production of both metal parts and composite parts do not provide the accuracy required for mechanical engineering. In this regard, cutting is used as a finishing treatment for composite parts, as well as for metal parts. The scale of application of composite cutting processing can be characterized by the following example: the world's leading manufacturers of cutting tools, such as Guhring, Kennametal, and Korloy, issue special catalogs of tools designed for fiber-reinforced composite workpieces machining (High-performance tools for machining fiber composite materials. Guhring, 2018, 24 p.; Router Endmill Series for Machining Composite Materials. Korloy, 2018, 12 p.). Wide commercial application of FRCM machining is undoubtedly based on numerous scientific studies, which were reflected in books published, for example, back in 2009 [5]. Similar, more voluminous publications appeared later; for example, the guidance “Advances in Machining of Composite Materials”, published in 2018, contains 547 pages. Thus, the numerical study of FRCM machining is undoubtedly an urgent task of composite mechanics. Considering the use of numerical models for composite material machining calculating, it should be noted that one of the most important factors determining the quality of the machined surface is the direction of the fiber location vector in relation to the cutting speed vector. Analysis of studies published from the 1990s [8] to the 2020s [9] shows that the results of numerical modeling of fiber-reinforced composite materials machining significantly depend on the fibers location. However, these and other publications describe only unidirectional fiber-reinforced composites, which represent only a small portion of all part materials compared to 3D composites. Numerical modeling of 3D woven composite workpieces cutting has practically not been found in the scientific publications. The research, which describes 3D weaving as a set of layers with a unidirectional arrangement of fibers in each layer is one of the exceptions [10]. These layers are located parallel to each other with the axes of their fibers rotated by 45° . However, the finite element modeling of this cutting is carried out separately for each fiber direction option. Similar studies are reflected in the other publications of the authors of this article [11, 12] and Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mechanical Engineering Industry. 2024, vol. 24, no. 2 and 3.

Despite a long study period of finite element meshes generating for modeling fibers, boundary layers, and matrices, and despite the emergence of commercial programs for creating composite structures, no examples of producing parts with complex surfaces, such as turbine blades filled with these three-dimensional fiber structures, were detected in the publications. Meanwhile, without solving this problem, simulating the chip formation process in a selected area of a fiber-reinforced composite workpiece, considering the importance of the fiber directionality in this area relative to the cutting speed vector, is impossible.

Researches of the machining process of composite workpieces were further developed due to the use of CNC machines. In particular, the Fraunhofer Institute for Production Technology (Fraunhofer IPT) executed such a study, the results of which are shown in Fig. 1 on the left. Currently, similar metal

blades are mass-produced (Fig. 1 on the right), as well as metal-matrix composite blades. Milling of these blades on CNC machines causes difficulties in ensuring accuracy because of workpiece deflections under the tool, which can reach 2 mm [13]. Thus, modeling of the cutting at separate points of the tool-path would make it possible to calculate the cutting forces and deflections of the workpiece. The latter can be introduced as correctors into the control programs for processing on CNC machines to increase the machining accuracy. However, using modern personal computers the modeling can be performed only for fragments of the workpiece with fragments of the cutting wedge. For the simulation it is necessary to get information about the fibers arrangement at a certain point of the curved surface of the workpiece prepared for the finishing milling. Therefore, modeling of 3D woven composite workpieces and their fibers is an urgent task of mechanical engineering. Although numerous studies of composite structures micro-modeling and some computer programs for such modeling are available, no publications or examples of such models of real parts with complex spatial geometry were found. All this indicates the need to develop such mathematical models and computer programs for complete modeling of complex-shaped fiber-reinforced parts for subsequent analysis of the mechanics of their stress-strain state and destruction, including the analysis of the machining.



Fig. 1. CNC machining of a fiber-reinforced turbine blade, the machined part (Fraunhofer IPT, 2025) and a similar blade from an enterprise

As noted above, numerical micro modeling of composite structure and chip formation modeling of machining using edge tools is a practical necessity in the daily developments of industrial engineers. Such modeling makes it possible to predict the quality of the machined surface and develop technics to improve it, based on the choice of geometric parameters of the tool cutting wedge, tool kinematics in the workpiece coordinate system, cutting mode and other processing conditions. In such studies, micro modeling is necessary, since the surface fluffiness, various delaminations and chips can be detected by modeling of the workpiece considering material fibers. When discussing this problem, we should also note the level of computer equipment, which industrial engineers use. Using of expensive supercomputing technologies in ordinary practice cannot be considered a practical solution. In this regard, there is a need to develop models of composites that, on the one hand, make it possible to describe significant structure components: fibers, matrix and boundary layer, and on the other hand, to generate meshes with not more than 10^5 finite elements or SPH particles for nonlinear dynamic analysis. In addition, the modeling should be universal and enable one to generate both finite element meshes and simultaneously multiple SPH particles.

Therefore, the **aim** of the presented study is to develop a numerical geometric and physical model of a complex-shaped workpiece made of 3D woven fiber-reinforced composite and a finite element model of chip formation during edge tool machining for everyday use of industrial engineers.

1. Numerical geometric modeling of parts made of 3D woven fiber-reinforced composite

Since 3D woven FRCM with orthogonal arrangement of fibers includes fibers located in three directions, it is obvious to describe the axes of these fibers as spatial lines. If such lines are identical in shape, then it is sufficient to use one equation followed by replacing three coordinates according to the rule:

$$e^{*(n)} = F(e^{*(n+1)}, e^{*(n+2)}), \quad n \in \{1, 2, 3\} \wedge n > 3 : n \rightarrow 1, \quad (1)$$

where $e^{*(1)} = x$, $e^{*(2)} = y$, $e^{*(3)} = z$ – are the coordinates of the points on the lines.

The F function can describe a line of any spatial shape, including a straight line. This definition is necessary to model the orthogonal 3D structure of the FRCM. In the latter case:

$$e^{*(n)} = Ae^{*(n+1)} + Be^{*(n+2)} + D, \quad (2)$$

where A and B characterize angles of fiber inclination, and D describes the position of fiber in the selected coordinate system. In case if the fiber axes are parallel to the coordinate axes, it is enough to determine the coordinates of the points of intersection of the fiber axes with the coordinate planes: 1) xoy , 2) $yozy$, 3) xoz following simplified dependences

$$\begin{aligned} (x_{p,1} = i \cdot \Delta x, y_{p,1} = j \cdot \Delta y) \wedge p = i + j \cdot n_m + 1 \wedge i, j = 0 \dots n_m - 1; \\ (y_{p,2} = (j + 0,5) \cdot \Delta y, z_{p,2} = i \cdot \Delta z) \wedge p = i + j \cdot n_m + 1 \wedge i = 0 \dots n_x - 1 \wedge j = 0 \dots n_y - 2; \\ (x_{p,3} = (j + 0,5) \cdot \Delta x, z_{p,3} = (i + 0,5) \cdot \Delta z) \wedge p = i + j \cdot n_m - 1 \wedge i, j = 0 \dots n_m - 2, \end{aligned} \quad (3)$$

where $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ – are the distances between adjacent fibers in one row; n_x, n_y, n_z – are the numbers of fibers along the x, y, z axes, determined by dividing the overall dimensions of the part by the distance between the fibers; $n_m = \max\{n_x, n_y, n_z\}$ – is the maximum value.

In case if a fiber in radial cross-section is described as an ellipse, then it is sufficient to use a traditional ellipse equation. In a particular case, a fiber can be described as a cylinder using the equation of fiber cross section:

$$\left(e_m^{(n)} - E_m^{(n)}\right)^2 + \left(e_{m+1}^{(n)} - E_{m+1}^{(n)}\right)^2 \leq R^2, \quad (4)$$

where $E_m^{(n)}$ – are the circle center coordinates calculated according to equation (2): $E_m^{(n)} = e_m^{*(n)}$, $e^{(1)} = x, e^{(2)} = y, e^{(3)} = z$ – are the current coordinates of voxel nodal points, R – is the fiber radius.

To describe a ring-shaped boundary layer, it is sufficient to use the dependence (4), and it is obvious that the expression on the left must be greater than the square of the fiber radius, but less than or equal to the square of the cylinder radius of this boundary layer.

Using dependencies (1)–(4), one can obtain a spatial mesh of cylinders, which describe orthogonally located fibers and their boundary layers. Next, using this mesh, the sets of voxels with the definition of their state parameters can be calculated: $P(x, y, z) = 1$ for the fiber and $P(x, y, z) = 2$ for the boundary layer.

To obtain a set of matrix voxels, the following relationship can be applied:

$$\forall P(x, y, z), P(x, y, z) = 3 \neg (P(x, y, z) = 1 \vee P(x, y, z) = 2). \quad (5)$$

The described dependencies (1)–(5) make it possible to calculate the voxel mesh of the composite workpiece in the form of a rectangular parallelepiped. To generate the similar mesh for a part of arbitrary shape, it is necessary to use the dependencies given in our previously published studies [14] and Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mechanical Engineering Industry. 2022, vol. 22, no. 4. In this case, the specified voxel state parameter should be determined using the dependencies (5), if this parameter is non-zero in calculations for the entire part according to the dependencies presented in the mentioned study [14]. The obtained voxel models are further transformed into finite element models. The results of modeling of the earlier described turbine blade are shown in Fig. 2 (for clarity, the dimensions of the fibers and the boundary layers are increased by an order of magnitude). The total number of finite elements is equal to 382 590. This number is relatively large and indicates the limitations of the proposed approach: it is applicable only for small parts. To calculate deformations in large-sized parts, it is advisable to use macro modeling with an equivalent homogeneous structure.

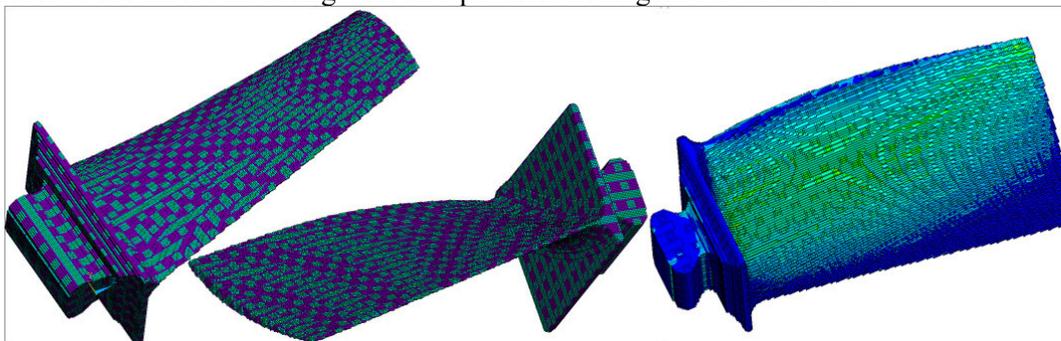


Fig. 2. Finite element model of the fiber-reinforced turbine blade and calculation of von Mises stresses caused by the cutting force applied at the tip of the blade

2. Numerical simulation of the stress-strain state of the 3D woven composite workpiece during the machining process

The above dependencies, which make it possible to calculate a set of voxel nodes, are the basis for the subsequent calculation of the finite element model nodes and elements or for the SPH model particles. To simulate the chip formation process, it is necessary to calculate cutting tool finite element model, determine friction coefficients, workpiece parameters, and tool motions. Recently, complex material models, such as the Johnson–Cook model [15], are increasingly used to study high-speed processes of interaction of the bodies considering their destruction. However, this simulation requires much more computation time compared, for example, with simulation using the Plastic Kinematic model [15] and borrowed parameters.

To calculate the cutting force by modeling the stress-strain state of the workpiece during machining, a rectangular parallelepiped fragment of the workpiece at some check point on its surface was selected. The geometric parameters of the fragment were as follows: fiber diameter $48\ \mu\text{m}$, boundary layer thickness $8\ \mu\text{m}$, distance between fiber axes $128\ \mu\text{m}$. The cubic workpiece had a size of $336\ \mu\text{m}$. The cutting tool had the following geometric parameters: tool rake angle and tool clearance angle were equal to 10° each. Rounded cutting edge radius was $20\ \mu\text{m}$. The simulation described tool face area, which was $160\ \mu\text{m}$ long and tool flank area, which was $80\ \mu\text{m}$ long. Free orthogonal cutting was simulated. The workpiece was fixed along the underside of the cube and along the cube back side away from the cutter tool. The generated finite element models are shown in Fig. 3. From left to right the model of fibers, the model of boundary layers, the model of the matrix and the resulting model of the workpiece with the cutting tool are presented.

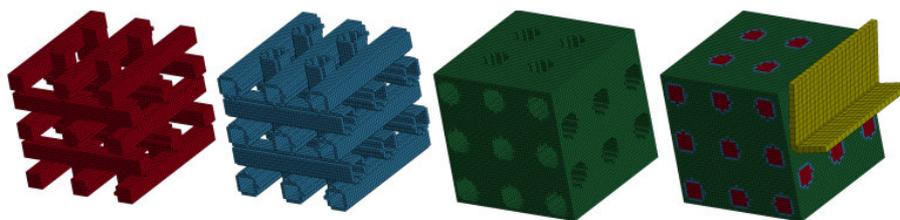


Fig. 3. Finite elements of composite workpiece structural components, complete workpiece model and cutting tool model

Von Mises stress distribution and relative deformations in the workpiece for the same conditions are presented in Fig. 4. For clarity, the image of the tool is not shown. The top row shows the stresses in the workpiece, fibers and boundary layers that arose almost at the initial moment of cutting. The middle row shows similar results for the middle tool location: stresses in the workpiece, fibers and boundary layers. On the right, directly the stresses in the composite fibers are shown. The bottom row shows tool location at the completion of the cutting process (in practical calculations this tool location is not used, it is shown to confirm modeling adequacy). The entire composite structure is shown on the left, composite fibers with the boundary layer are shown on the right. The results of full-scale experiments obtained in machining fiber-reinforced composites with tool wedges are shown below (Fig. 4, *i, j* [16] and *k*) [5]. As shown in the figures, there is a qualitative similarity in the obtained surfaces, which indicates the adequacy of the modeling described above.

Thus, the chip formation modeling demonstrated, firstly, the adequacy of the proposed mathematical dependencies (1)–(5), which provide description of fiber-reinforced composite structures of a body of complex arbitrary shape, namely, an orthogonal 3D woven structure, to generate a high-quality finite element mesh. Secondly, the adequacy of the approach itself for modeling fibers, boundary layers, and matrix is confirmed by comparing the results of the presented modeling with the results of full-scale experiments.

3. Results and discussion

The obtained mathematical relationships and computer programs created on their basis made it possible to obtain numerical geometric micro models of parts made of three-dimensional fiber-reinforced composites using available CAD models of these parts. On this basis, the cutting process of a fragment of such a workpiece was simulated in its selected critical area, the stress-strain state of the workpiece and the resulting cutting force were calculated. Considering forces and clamping conditions, the defor-

mations and bending of the entire workpiece were calculated. Then this bending can be used as corrector for the control program of the CNC machine, thereby increasing the processing accuracy. This modeling, as one might expect, is limited by the capabilities of modern personal computers available to industrial engineers. In this regard, this micro modeling is currently available for the analysis of relatively small parts. A number of issues in the mechanics of the cutting process also require clarification: the properties of the boundary layers of composite fibers, the values of the friction coefficients and the parameters of the fiber and matrix material models. It is necessary to clarify the tool models in view of the surface roughness and wear. All this is the basis for further increasing the adequacy of modeling and the accuracy of calculations. Nevertheless, the results obtained already now make it possible to increase the accuracy of calculations significantly compared to the analytical calculations widely used at present.

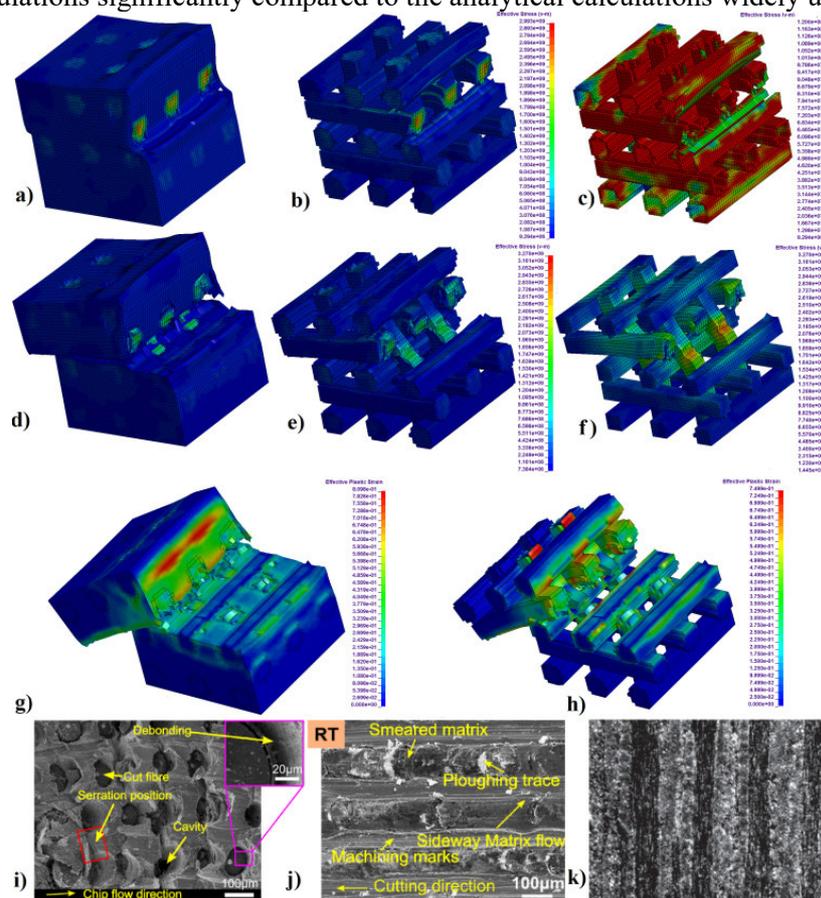


Fig. 4. Three stages of the cutting process. Von Mises stresses at the following tool locations: cut extends over 1/3 of the length of the workpiece: a) the complete workpiece, b) fibers with boundary layers, c) the boundary layer; similarly for 1/2 of the length of the workpiece: d), e), f); relative deformations at the tool location at 2/3 of the length of the workpiece: g) the complete workpiece and h) fibers with the boundary layers.
Results of full-scale experiments i), j) – [16], k) – [5]

Conclusions

The modeling of the 3D woven fiber-reinforced composite structure and the simulation of the chip formation process using edge tool performed by the authors leads to the following conclusions.

1. Micro modeling of small fiber-reinforced parts including a description of the fibers and their boundary layers, that is the generation of voxel and finite element models using existing personal computers is practically achievable.

2. Predicting the accuracy of the composite part during CNC machining can be achieved through its micro modeling in view of fibers and boundary layers, calculating the stress-strain state in the cutting zone and calculating displacements in the entire workpiece caused by the cutting forces.

Acknowledgement. This work was supported by the Russian Science Foundation under grant no. № 24-71-00071, <https://rscf.ru/en/project/24-71-00071/>.

References

1. Gay D., Hoa S.V., Tsai S.W. *Composite Materials Design and Application*. CRC Press LLC, London, 2003, 523 p. DOI: 10.1201/9781420031683.
2. Baker A., Dutton S., Kelly D. *Composite Materials for Aircraft Structures*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc. Second Edition. Reston, Virginia, USA, 2004, 597 p.
3. Kim J.-K., Mai Y.-W. *Engineered Interfaces in Fiber Reinforced Composites*. Elsevier Science Ltd.; Oxford, UK, 1998, 402 p.
4. Matthews F.L., Davies G.A.O., Hitchings D., Soutis C. *Finite Element Modelling of Composite Materials and Structures*. Woodhead Publishing, Abington Hall, Abington, Cambridge, UK, 2000, 220 p.
5. Ahmad J. *Machining of Polymer Composites*. Springer Science, 2010, 315 p. DOI: 10.1007/978-0-387-68619-6.
6. Brown L.P., Endruweit A., Long A., Jones I.A. Characterisation and Modelling of Complex Textile Geometries using TexGen. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2018, Vol. 406, Iss. 1, 012024. DOI: 10.1088/1757-899X/406/1/012024.
7. Matveev M.Y., Brown L.P., Long A.C. Efficient Meshing Technique for Textile Composites Unit Cells of Arbitrary Complexity. *Composite Structures*, 2020, Vol. 254, 112757. DOI: 10.1016/j.compstruct.2020.112757.
8. Wang D.H., Ramulu M., Arola D. Orthogonal Cutting Mechanisms of Graphite/Epoxy Composite. Part II: Multi-Directional Laminate. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, 1995, Vol. 35, Iss. 12, pp. 1639–1648. DOI: 10.1016/0890-6955(95)00015-P.
9. Shetty Nagaraja, Shahabaz S.M., Sharma S.S., Shetty Divakara S. A Review on Finite Element Method for Machining of Composite Materials. *Composite Structures*, 2017, Vol. 176, pp. 790–802. DOI: 10.1016/j.compstruct.2017.06.012.
10. Usui S., Wadell J., Marusich T.D. Finite Element Modeling of Carbon Fiber Composite Orthogonal Cutting and Drilling, *Procedia CIRP*, 2014, Vol. 14, pp. 211–216. DOI: 10.1016/j.procir.2014.03.081.
11. Shchurov I.A., Nikonov A.V., Boldyrev I.S. SPH-Simulation of the Fiber-reinforced Composite Workpiece Cutting for the Surface Quality Improvement. *Procedia Engineering*, 2016, vol. 150, pp. 860–865. DOI: 10.1016/j.proeng.2016.07.029.
12. Shchurov I.A., Boldyrev I.S., Nikonov A.V., Shchurova E.I. Chip Formation in the Cutting of Composites. *Russian Engineering Research*, 2020, Vol. 40, pp. 336–339. DOI: 10.3103/S1068798X2004019X.
13. *Gas Turbines. Application guide*. Sandvik Coromant, Sweden. 2002, 144 p.
14. Shchurova E.I. Industrial Manipulating Robot Finite Element Mesh Generation Based on Robot Voxel Model. In: Radionov, A.A., Gasiyarov, V.R. (eds) *Proc. 6th International Conference on Industrial Engineering (ICIE 2020)*. ICIE 2021. Lecture Notes in Mechanical Engineering. Springer, Cham, 2021. DOI: 10.1007/978-3-030-54817-9_27.
15. *ANSYS LS-DYNA User's Guide*, Release 16.1, ANSYS, Inc., Canonsburg, USA, 2015, 202 p.
16. Zan S., Liao Z., Robles-Linares J.A., Luna G.G., Axinte D. Machining of Long Ceramic Fibre Reinforced Metal Matrix Composites – How Could Temperature Influence the Cutting Mechanisms? *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 2023, Vol. 185, 103994.

Received October 10, 2025

Information about the authors

Shchurova Ekaterina Igorevna is Cand. Sc. (Engineering), Assistant Professor, Automated Machine Building Technology Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: shchurovaei@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-1709-1861>.

Shchurov Igor Alexeevich is Dr. Sc. (Engineering), First Deputy Director of Engineering and Technology Institute, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: shchurovia@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-4254-6354>.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ САД/САЕ СИСТЕМ ВОЛОКОННО-АРМИРОВАННЫХ КОМПОЗИТНЫХ ДЕТАЛЕЙ ОБЪЕМНОГО ПЛЕТЕНИЯ И ПРОЦЕССА ИХ МЕХАНООБРАБОТКИ

Е.И. Щурова, И.А. Щуров

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

Аннотация. При изготовлении деталей из волоконно-армированных композитов объемного плетения все чаще используется механообработка лезвийными инструментами: сверлами, фрезами, резцами. В процессе резания нежестких деталей типа турбинных лопаток возникают их заметные упругие перемещения, что снижает точность обработки. Для расчета сил резания необходимо выполнить моделирование стружкообразования в зоне резания, что существенно зависит от ориентации волокон заготовки по отношению к клину режущего инструмента. Поскольку расчет деформаций заготовки необходимо вести выборочно в отдельных точках траектории движения инструмента, то для моделирования резания необходимо выделить соответствующие фрагменты заготовки с характерным расположением волокон. С этой целью требуется сформировать конечно-элементную модель всей заготовки с ее волокнами и их граничными слоями, а также выполнить расчет напряженно-деформированного состояния зоны резания в процессе образования стружки в выбранных фрагментах заготовки. Все эти вопросы были решены в ходе проведенных исследований: получены математические зависимости для воксельного моделирования указанных композитных деталей и расчета их конечных элементов; разработаны компьютерные программы, с использованием которых, получены необходимые геометрические и физические модели механики стружкообразования. Выполненные расчеты подтвердили достаточность предложенных численных решений при прогнозировании технологами промышленного производства точности обработки небольших по размеру композитных деталей.

Ключевые слова: конечно-элементное моделирование; воксельное моделирование; волоконно-армированный композит; структура объемного плетения; лезвийное резание; стружкообразование.

Благодарности. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-71-00071, <https://rscf.ru/project/24-71-00071/>

Литература

1. Gay, D. Composite Materials Design and Application / D. Gay, S.V. Hoa, S.W. Tsai. – CRC Press LLC, London, 2003. – 523 p.
2. Baker, A. Composite Materials for Aircraft Structures / A. Baker, S. Dutton, D. Kelly. – American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc. Second Edition. Reston, Virginia, USA, 2004. – 597 p.
3. Kim, J.-K. Engineered Interfaces in Fiber Reinforced Composites / J.-K. Kim, Y.-W. Mai. – Elsevier Science Ltd.; Oxford, UK, 1998, 401 p.
4. Finite Element Modelling of Composite Materials and Structures / F.L. Matthews, G.A.O. Davies, D. Hitchings, C. Soutis. – Woodhead Publishing, 2000. – 220 p.
5. Ahmad, J. Machining of Polymer Composites / J. Ahmad. – Springer Science, 2010, 315 p.
6. Characterisation and Modelling of Complex Textile Geometries using TexGen / L.P. Brown, A. Endruweit, A. Long, I.A. Jones // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2018. – Vol. 406, Iss. 1. – 012024.
7. Matveev, M.Y. Efficient Meshing Technique for Textile Composites Unit Cells of Arbitrary Complexity / M.Y. Matveev, L.P. Brown, A.C. Long // Composite Structures. – 2020. – Vol. 254. – 112757.

8. Wang, D.H. Orthogonal Cutting Mechanisms of Graphite/Epoxy Composite. Part II: Multi-Directional Laminate / D.H. Wang, M. Ramulu, D. Arola // *International Journal of Machine Tools & Manufacture*. – 1995. – Vol. 35, Iss. 12. – P. 1639–1648.
9. A Review on Finite Element Method for Machining of Composite Materials / Nagaraja Shetty, S.M. Shahabaz, S.S. Sharma, S. Divakara Shetty // *Composite Structures*. – 2017. – Vol. 176. – P. 790–802.
10. Usui, S. Finite Element Modeling of Carbon Fiber Composite Orthogonal Cutting and Drilling / S. Usui, J. Wadell, T.D. Marusich // *Procedia CIRP*. – 2014. – Vol. 14. – pp. 211–216.
11. Shchurov, I.A. SPH-Simulation of the Fiber-reinforced Composite Workpiece Cutting for the Surface Quality Improvement / I.A. Shchurov, A.V. Nikonov, I.S. Boldyrev // *Procedia Engineering*. – 2016. – Vol. 150. – P. 860–865.
12. Chip Formation in the Cutting of Composites / I.A. Shchurov, I.S. Boldyrev, A.V. Nikonov, E.I. Shchurova // *Russian Engineering Research*. – 2020. – Vol. 40. – P. 336–339.
13. Gas Turbines. Application guide. – Sandvik Coromant, Sweden, 2002, – 144 p.
14. Shchurova, E.I. Industrial Manipulating Robot Finite Element Mesh Generation Based on Robot Voxel Model / E.I. Shchurova // *Proceedings of the 6th International Conference on Industrial Engineering (ICIE 2020)*. ICIE 2021. – Lecture Notes in Mechanical Engineering. Springer, Cham, 2021.
15. ANSYS LS-DYNA User's Guide, Release 16.1, ANSYS, Inc., Canonsburg, USA, 2015. – 202 p.
16. Machining of Long Ceramic Fibre Reinforced Metal Matrix Composites – How Could Temperature Influence the Cutting Mechanisms? / S. Zan, Z. Liao, J.A. Robles-Linares *et al.* // *International Journal of Machine Tools and Manufacture*. – 2023. – Vol. 185. – 103994.

Поступила в редакцию 10 октября 2025 г.

Информация об авторах

Щурова Екатерина Игоревна – кандидат технических наук, старший преподаватель кафедры технологии автоматизированного машиностроения, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: shchurovaei@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-1709-1861>.

Щуров Игорь Алексеевич – доктор технических наук, первый заместитель директора Политехнического института, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: shchurovia@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0003-4254-6354>.

ФОТОРЕЗИСТИВНЫЙ ЭФФЕКТ В ПЛЁНКАХ $Pb_{1-x}Cd_xS$, ПОЛУЧЕННЫХ ОСАЖДЕНИЕМ В ВАКУУМЕ

Б.Г. Полевой¹, Д.И. Ненарокомов¹, Д.Е. Живулин¹,
Д.А. Жеребцов¹, А.Г. Воронцов¹, Д.Ю. Годовский²

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

² ООО «Полин Разработки», г. Москва, Российская Федерация

E-mail: polevoibg@susu.ru

Аннотация. Цель работы – получение тонких фоторезистивных плёнок сульфида свинца, допированного кадмием методами магнетронного распыления и электронно-лучевого испарения в вакууме. Описаны методики твердофазного синтеза твердых растворов сульфида свинца-кадмия требуемого состава и спекания керамической мишени для dc-магнетронного распыления. Состав полученных мишеней соответствует гомогенному твердому раствору на основе галенита. Осаждение пленок $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ осуществлялось распылением керамической мишени магнетронным dc – распылением на подложки ситалла и кремния. Фазовый состав осажденных пленок соответствует составу распыляемой мишени. Полученные пленки обладают фоторезистивным эффектом. Определены отношения темнового сопротивления к световому, постоянные времени полученных фоторезистивных пленок. Пленки $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ на подложках кремния обладают большей чувствительностью по сравнению с пленками, осажденными на ситалл. Осаждение $Pb_{0,88}Cd_{0,12}S$ и CdS осуществлялось электронно-лучевым испарением из графитового тигля. Плёнки $Pb_{0,88}Cd_{0,12}S$, осаждённые электронно-лучевым методом, фоторезистивного эффекта не проявили. Наилучшее отношение темнового сопротивления к световому и постоянную времени 25 мкс показали пленки $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ на подложке кремния.

Ключевые слова: тонкие плёнки; осаждение в вакууме; фоторезистивные материалы; сульфид кадмия; сульфид свинца.

Введение

Фоторезистивные материалы, чувствительные к видимому и инфракрасному излучению, находят широкое применение в сенсорах, фоторезисторах и фотодетекторах различного назначения. Особую роль в производстве фоторезистивных приборов играют полупроводники в виде тонких пленок сульфида кадмия (CdS) и сульфида свинца (PbS) [1, 2].

Сульфид свинца PbS относится к классу узкозонных полупроводников ($E_g = 0,42$ эВ), обладает наиболее высокой среди известных веществ светочувствительностью в видимом и инфракрасном диапазонах спектра. Тонкие пленки сульфида свинца широко используются в изготовлении сенсорных элементов, инфракрасных детекторов [3–5], газовых детекторов [6, 7], солнечных панелей [8, 9].

Сульфид кадмия (CdS) – полупроводник с шириной запрещённой зоны около 2,42 эВ. Благодаря такой широкой зоне CdS характеризуется высоким коэффициентом поглощения и высокой фотопроводимостью в видимой области, особенно в пределах 400–600 нм, что делает его перспективным материалом для фотодетекторов и фоторезисторов.

Материалы типа $Pb_{1-x}Cd_xS$ представляют собой твёрдые растворы, в которых ионы Cd^{2+} частично замещают Pb^{2+} в кубической кристаллической решётке сульфида свинца типа $NaCl$ [10, 11]. Такие материалы позволяют настраивать ширину запрещённой зоны путём изменения концентрации Cd (параметра x) [12]. Это делает их перспективными для создания широкополосных фотодетекторов и многоспектральных сенсоров [1, 11].

Тонкие пленки PbS , и $Pb_{1-x}Cd_xS$ обычно получают методами химического осаждения из растворов [1, 3, 10–13].

Описаны примеры осаждения тонких плёнок получения PbS и $Pb_{1-x}Cd_xS$ термическим испарением в вакууме [1,2]. Полученные пленки не являются фоторезистивными и требуют легирования кислородом посредством отжига в кислородсодержащей атмосфере при температуре 500–600 °С или ионной имплантации с последующим отжигом [1, 14].

Отжиг пленок $Pb_{1-x}Cd_xS$, полученных химическим осаждением, также приводит к значительному улучшению фоточувствительности [12].

Основными методами осаждения тонких функциональных слоев в производстве компонентов электронной техники являются магнетронное распыление и электронно-лучевое испарение. Применение указанных методов для осаждения фоторезистивных пленок позволит интегрировать изготовление фотоэлектрических преобразователей в технологические процессы микроэлектроники.

Представленная работа выполнялась в ЮУрГУ в сотрудничестве с компанией ООО «Полин разработки». В работе изучалась возможность нанесения фоторезистивных слоев $Pb_{1-x}Cd_xS$ и CdS dc-магнетронным распылением и электронно-лучевым испарением.

Известны работы по осаждению фоторезистивных пленок сульфида кадмия методами электронно-лучевого испарения [15], RF-магнетронного распыления [16–18] и изучению структурных и оптико-энергетических свойств полученных тонких пленок [15–18]. Однако нам неизвестны работы по получению фоторезистивных покрытий PbS, $Pb_{1-x}Cd_xS$ методами магнетронного распыления в вакууме, что, очевидно, связано с технической сложностью изготовления керамической распыляемой мишени и процесса напыления.

Цель работы – получение тонких фоторезистивных плёнок сульфида свинца, допированного кадмием методом магнетронного распыления, получение тонких фоторезистивных плёнок сульфида кадмия методом электронно-лучевого испарения.

В работе решались задачи:

1. Синтез твердых растворов $Pb_{1-x}Cd_xS$ требуемого состава и изготовление керамических распыляемых мишеней.
2. Осаждение пленок $Pb_{1-x}Cd_xS$ методом магнетронного распыления.
3. Осаждение пленок сульфида кадмия методом электронно-лучевого испарения порошка CdS в вакууме.
4. Определение влияния условий осаждения, последующего отжига и материала подложки на параметры фоторезистивного эффекта.
5. Изготовление керамических распыляемых мишеней.

В качестве исходных прекурсоров использовались порошки PbS и CdS. Фазовый состав исходных порошков определялся методом рентгенофазового анализа на порошковом дифрактометре Rigaku Ultima IV на излучении Cu-K α в диапазоне углов 2θ 5°–90° (рис. 1). Согласно дифрактограмме порошок PbS однофазный и имеет структуру галенита (тип NaCl). Порошок CdS состоит из смеси двух полиморфных форм: преимущественно хоулиита (тип сфалерита) и гринокита (тип вюрцита). Элементный состав порошков был определен с помощью рентгенофлуоресцентного энергодисперсионного спектрометра Oxford INCA X-max 80 и показал отсутствие примесей.

Три мишени для магнетронного распыления состава (PbS:CdS, ат. %): 94:6; 96:4; 90:10; были изготовлены по керамической технологии, включающей:

1. Взвешивание PbS и CdS.
2. Перетирание смеси исходных компонентов в агатовой ступе.
3. Прессование таблеток из приготовленной смеси при помощи лабораторного прессы.

Диаметр пресс-формы 50 мм, давление прессования 75 МПа.

4. Подготовка полученной «зеленой» заготовки к спеканию.

Спрессованная таблетка помещалась в тигель из Al_2O_3 , на дне которого была сформирована «подушка» из механической смеси того же состава толщиной 2–3 мм. Затем таблетка засыпалась слоем механической смеси порошка того же состава. Сверху устанавливался пыж из каолиновой ваты, на который засыпалась графитовая крошка толщиной 10 мм. Поверх графитовой засыпки укладывался пыж из каолиновой ваты и производилась засыпка порошка Al_2O_3 до края тигля. Сверху тигель накрывался крышкой из Al_2O_3 .

5. Спекание: изотермическая выдержка при температуре 750 °С в течение 3 часов с последующим нагревом до 820 °С в течение 2 часов.

6. Механическая обработка при помощи алмазного инструмента. Доведение толщины мишени до заданного значения 3,5–4 мм. После механической обработки мишень промывали в этиловом спирте и сушили в вакууме при комнатной температуре.

Рентгенофазовый анализ полученных мишеней показал, что все они соответствуют гомогенному твердому раствору на основе галенита. Далее распылению подвергали только мишень состава $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$, как наиболее перспективного согласно литературным данным [12].

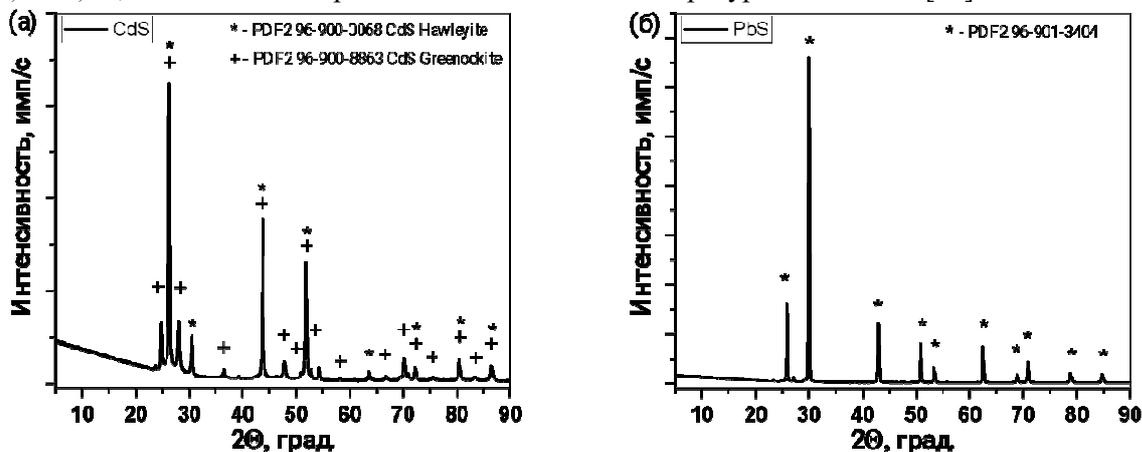


Рис. 1. Дифрактограмма порошка CdS (а) и PbS (б)

1. Осаждение тонких плёнок $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$

Осаждение пленок $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ осуществлялось распылением керамической мишени магнетронным dc-распылением на подложки ситалла и окисленного кремния. Толщина слоя $SiO_2 \sim 500$ нм. Процесс проводился при давлении аргона в камере около 2,5 Па при температуре подложки 250 °С, с расстоянием между мишенью и подложкой ~ 7 см. В результате были получены плёнки толщиной от 50 до 500 нм.

2. Осаждение тонких плёнок $Pb_{0,88}Cd_{0,12}S$ и CdS

Для сравнения результатов термического воздействия было проведено осаждение состава $Pb_{0,88}Cd_{0,12}S$, синтезированного в виде порошка химическим методом на кафедре физической химии УрГУ и CdS, заведомо изначально обладающих фоторезистивными свойствами. Ввиду отсутствия распыляемой мишени осаждение проводилось электронно-лучевым испарением порошка из графитового тигля. Процесс осаждения проходил при давлении в камере $8,0 \cdot 10^{-3}$ Па и температуре подложки 250 °С. Расстояние между тиглем и подложкой ~ 25 см. Скорость осаждения составила ~ 5 Å/с. Конечная толщина плёнки ~ 200 нм.

$Pb_{0,88}Cd_{0,12}S$ осаждался на подложки из ситалла и кремния, CdS на подложки из керамики, поликора, ситалла и кремния в один цикл напыления.

3. Отжиг полученных плёнок

После осаждения часть образцов дополнительно подвергалась отжигу в муфельной печи при температуре 250 °С в течении одного часа.

4. Нанесение металлических контактов

Для измерения темнового и светового сопротивлений и постоянной времени фоторезистивного эффекта на поверхность пленок были нанесены никелевые контакты. Нанесение контактов проводилось через маску электронно-лучевым распылением никеля из графитового тигля. Процесс проводился при давлении в камере $5,0 \cdot 10^{-3}$ Па при температуре подложки 250 °С, с расстоянием между мишенью и подложкой ~ 25 см. Толщина контактов составила ~ 200 нм.

5. Результаты и обсуждение

Полученные образцы, до и после отжига, были изучены методами рентгенофазового анализа (рис. 2, табл. 1) и растровой электронной микроскопии (рис. 3).

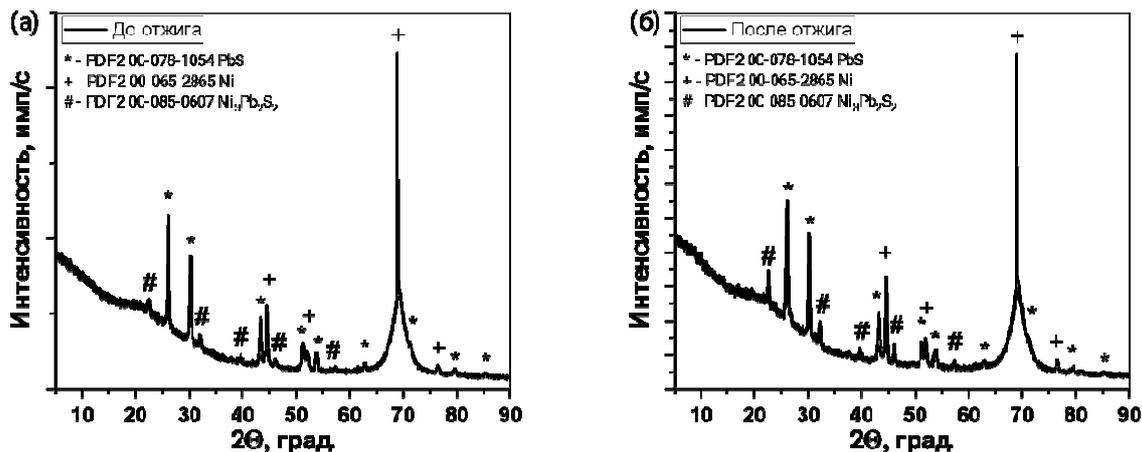


Рис. 2. Результаты фазового анализа образцов $Pb_{0.96}Cd_{0.04}S$ на подложке из кремния до отжига (а) и после отжига (б)

Положение рефлексов дифрактограмм полученных от пленки (см. рис. 2) совпадает с такими для мишени. Однако ширина рефлексов от плёнки значительно больше, что свидетельствует о меньших размерах областей когерентного рассеяния. После отжига фазовый состав пленки и размер областей когерентного рассеяния практически не изменились в пределах погрешности. (табл. 1).

Таблица 1

Фазовый состав пленок $Pb_{0.96}Cd_{0.04}S$ на подложке кремния, масс. %

		до отжига	после отжига
Галенит	(Pb,Cd)S	31(2)	35(2)
Никель	Ni	52(3)	47(3)
Шандит	$Ni_3Pb_2S_2$	16(2)	18(2)

Изображения образцов пленок во вторичных электронах (см. рис. 3, 4) показали, что морфология поверхности в результате отжига не изменилась. Различия морфологии поверхности между пленками на кремнии и на ситалле вызваны различиями морфологии поверхности подложек.

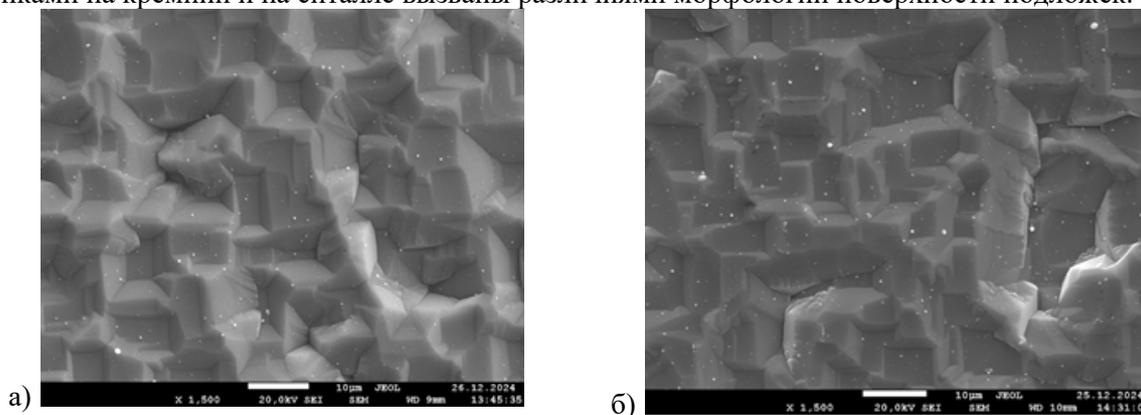


Рис. 3 - Поверхность плёнки $Pb_{0.96}Cd_{0.04}S$ на подложке из кремния до (а) и после отжига (б)

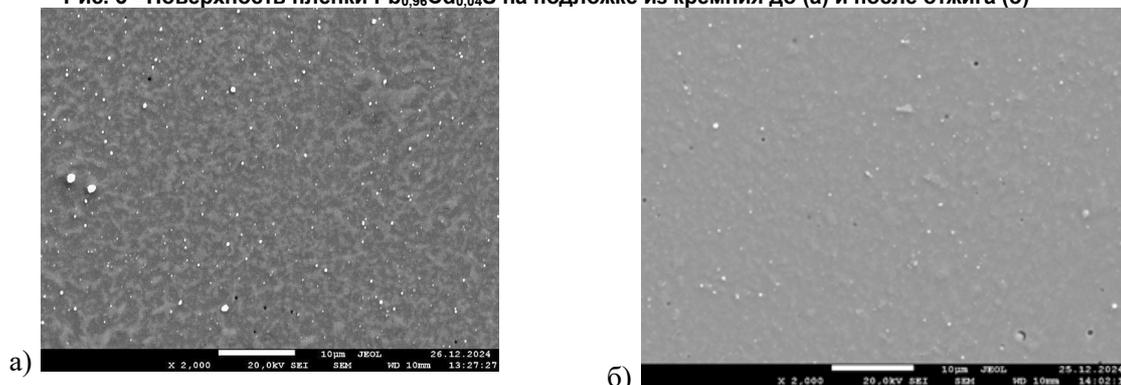


Рис. 4. Поверхность плёнки $Pb_{0.96}Cd_{0.04}S$ на подложке из ситалла до (а) и после отжига (б)

Для полученных плёнок были проведены измерения темнового и светового сопротивлений до и после отжига. Сопротивление между напыленными контактами измерялось мультиметром «АРРА-105N» 0-40 МОм, образец освещался белым светодиодом со световым потоком в 400 люмен.

Для измерения постоянной времени фоторезистивного эффекта была собрана установка (см. рис. 5), состоящая из:

- светодиода, для которого задаётся частота включения (1);
- измерительной ячейки с контактами для подключения образца (2);
- осциллографа «LeCroy (WA112)» (3).

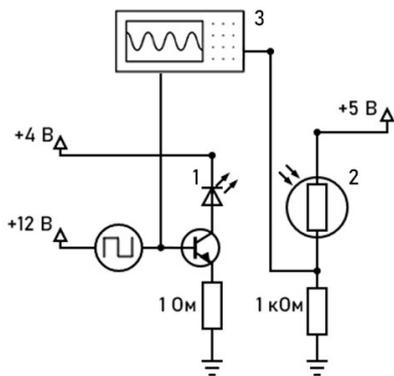


Рис. 5. Схема измерительной установки



Рис. 6. Осциллограмма определения постоянной времени

В процессе проведения измерений полученные образцы прижимались к контактной площадке и освещались светодиодами белого, синего и красного цвета. Для каждого образца проводилось несколько циклов измерения постоянной времени (рис. 6) под каждый цвет светодиода.

Результаты измерений объединены в табл. 2.

Таблица 2

Результаты измерений сопротивлений и постоянной времени полученных плёнок

Метод	Распыляемый материал	Толщина, нм	Подложка	$R_{тем},$ кОм	$R_{тем}/R_{св}, \%$	После отжига 250 °С, 60 мин.		Постоянная времени от спектра излучения, мкс		
						$R_{тем},$ кОм	$R_{тем}/R_{св}, \%$	Белый	Синий	Красный
Э-Л	CdS	200	Керамика	3,9	10,3	72	30,6	500	250	500
			Поликор	9,0	16,7	216	31,9	500	250	500
			Ситалл	2,7	7,4	32	28,1	500	250	500
			Кремний	43	16,3	—	—	125	125	125
Э-Л	$Pb_{0,88}Cd_{0,12}S$	200	Ситалл	106	0,0	106	0,0	—	—	—
			Кремний	96	0,0	96	0,0	—	—	—
дс-м	$Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$	50	Ситалл	3000	10,0	—	—	*	*	*
дс-м	$Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$	75	Ситалл	505	8,1	1334	10	*	*	75
			Кремний	141	12,1	1000	65	250	50	150
дс-м	$Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$	100	Ситалл	2080	6,7	11300	25,0	*	*	500
			Кремний	153	17,6	20000	75,0	50	25	50
дс-м	$Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$	400	Ситалл	12800	10,9	—	—	*	*	*
			Кремний	2600	80,0	—	—	250	25	125
дс-м	$Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$	500	Кремний	1500	73,3	—	—	150	25	125

* – более 1000 мкс;

— – нет данных. Измеряемое сопротивление превышает предел измерений мультиметра.

Осажденные пленки CdS – показали фоторезистивный эффект. Наибольшее отношение темнового сопротивления к световому наблюдается у пленок, на поликоре и кремнии. Отжиг приводит к увеличению темнового сопротивления и отношения темнового сопротивления к световому.

Плётки $Pb_{0,88}Cd_{0,12}S$, фоторезистивного эффекта не проявили. Термообработка этих образцов также не дала результатов. Видимо, фоторезистивные свойства были утрачены под влиянием высоких температур, создаваемых электронным лучом. Можно отметить, что сопротивление этих образцов значительно меньше чем образцов, обладающих фоторезистивным эффектом.

Плёнки $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$, нанесённые dc-магнетронным распылением, при котором тепловая нагрузка на распыляемое вещество значительно ниже, чем при электронно-лучевом испарении, проявили фоторезистивные свойства. Для измеренных образцов наблюдается тенденция к увеличению темнового сопротивления и отношения темного сопротивления к световому при увеличении толщины пленки.

Отжиг $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$, также, как и CdS , приводит к кратному увеличению темного сопротивления и отношения темного сопротивления к световому.

Наибольшее отношение темного сопротивления к световому для всех значений толщины наблюдается у пленок, осажденных на кремниевую подложку. Наилучшее отношение показали пленки $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ толщиной 400 и 500 нм на подложке кремния, 80 % и 73 % соответственно.

Образцы пленок CdS показали постоянную времени в интервале 500–125 мкс (на ситалле). Постоянная времени для пленок $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ толщиной 50, 75 и 100 нм, осаждённых на ситалл, была измерена только в красном свете ввиду медленной реакции на «синий» и «белый» свет. Наименьшее значение постоянной времени в 25 мкс наблюдалось у образцов пленок $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ толщиной 100, 400 и 500 нм, на подложках кремния в «синем» свете что сравнимо с таковой у лучших образцов, полученных химическим осаждением [19].

Эффект улучшения фоторезистивных свойств халькогенидов свинца, осажденных на кремниевой подложке, описан в литературе и применяется на практике. В ОАО «НПО «Орион» проведены исследования и изготовлены экспериментальные образцы структур $Si-SiO_2-PbS$ и $SiSiO_2-PbSe$ обладающих повышенной чувствительностью [20].

В [4] описан фотодетектор на основе квантовых точек Si n -типа и PbS p -типа. Устройство обеспечивает высокую чувствительность – $1,47 \cdot 10^{11}$ Джонсов на длине волны 1540 нм. Утверждается, что фотодетекторы на основе гетероперехода между коллоидными квантовыми точками кремния и сульфида свинца сочетают в себе преимущества кремниевых устройств и коллоидных квантовых точек из сульфида свинца,

По аналогии можно предположить образование гетероперехода на поверхности контакта кристаллов осажденной пленки $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ с кремниевой подложкой. В пользу этого предположения говорит наличие наибольшего измеренного фоторезистивного эффекта синем свете, тогда как для PbS и $Pb_{1-x}Cd_xS$ характерен максимальный фоторезистивный эффект в инфракрасной и красной области спектра, обусловленный малой шириной запрещенной зоны.

Выводы

1. Цель работы достигнута. Получены тонкие фоторезистивные плёнки сульфида свинца, допированного кадмием, методом магнетронного распыления, получены тонкие фоторезистивные пленки сульфида кадмия методом электронно-лучевого испарения в вакууме.

2. Используемый керамический метод синтеза позволяет получить однофазные керамические мишени $Pb_{1-x}Cd_xS$, пригодные для DC-магнетронного распыления.

3. Определены параметры процессов напыления в вакууме твердого раствора $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ магнетронным методом, показано, что состав полученных покрытий соответствует составу исходной мишени, полученные пленки обладают фоторезистивным эффектом.

4. Определены отношения темного сопротивления к световому, постоянные времени полученных фоторезистивных пленок.

5. Плёнки $Pb_{0,88}Cd_{0,12}S$, осажденные термическим испарением, не обладают фоторезистивным эффектом.

6. Наилучшее отношение темного сопротивления к световому и постоянную времени 25 мкс показали пленки $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ на подложке кремния.

7. Пленки CdS , осажденные электронно-лучевым испарением на подложки кремния обладают меньшей постоянной времени по сравнению с пленками CdS , осажденными на поликор, ситалл и керамику и большей постоянной времени по сравнению с пленками $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$.

8. Методом dc-магнетронного распыления в вакууме сульфида свинца, допированного кадмием, возможно получение фоторезистивных пленок с малой постоянной времени.

9. Полученные результаты подтверждают перспективность дальнейших исследований по осаждению фоторезистивных слоев на основе сульфида свинца методом магнетронного распыления.

Литература

1. Буткевич, В.Г. Фотоприемники и фотоприемные устройства на основе поликристаллических и эпитаксиальных слоев халькогенидов свинца / В.Г. Буткевич, В.Д. Бочков, Е.Р. Глобус // Прикладная физика. – 2001. – № 6. – С. 66–112.
2. Characterization of Vacuum Evaporated PbS Thin Films / Sushil Kumar, T.P. Sharma, M. Zulfeqar, M. Husain // Physica B: Condensed Matter. – 2003. – Vol. 325. – pp. 8–16
3. Solution-Processed PbS Quantum Dot Infrared Photodetectors and Photovoltaics / S.A. McDonald, G. Konstantatos, S. Zhang *et al.* // Nature Materials. – 2005. – Vol. 4, no. 2. – P. 138–142.
4. Inverted Si:PbS Colloidal Quantum Dot Heterojunction-Based Infrared Photodetector / K. Xu, X. Xiao, W. Zhou *et al.* // ACS Applied Materials & Interfaces. – 2020. – Vol. 12, Iss. 13. – P. 15414–15421.
5. Infrared Photodetectors Based on CVD-Grown Graphene and PbS Quantum Dots with Ultrahigh Responsivity / Z. Sun, Z. Liu, J. Li *et al.* // Advanced Materials. – 2012. – Vol. 24, Iss. 43. – P. 5878–5883.
6. Physically Flexible, Rapid-Response Gas Sensor Based on Colloidal Quantum Dot Solids / H. Liu, M. Li, O. Voznyy *et al.* // Advanced Materials. – 2014. – Vol. 26, Iss. 17. – P. 2718–2724.
7. Mosahebfard, A. Highly Sensitive, Room Temperature Methane Gas Sensor Based on Lead Sulfide Colloidal Nanocrystals / A. Mosahebfard, H. Dehdashti Jahromi, M.H. Sheikhi // IEEE Sensors Journal. – 2016. – Vol. 16, Iss. 11. – P. 4174–4179.
8. Time-Resolved Photoemission to Unveil Electronic Coupling between Absorbing and Transport Layers in a Quantum Dot-Based Solar Cell / C. Gréboval, P. Rastogi, J. Qu *et al.* // The Journal of Physical Chemistry C. – 2020. – Vol. 124, no. 42. – P. 23400–23409.
9. High Performance PbS Quantum Dot/Graphene Hybrid Solar Cell with Efficient Charge Extraction / B.-S. Kim, D.C.J. Neo, B. Hou *et al.* // ACS Applied Materials & Interfaces. – 2016. – Vol. 8, Iss. 22. – P. 13902–13908.
10. Маскаева, Л.Н. Влияние солей кадмия на состав и свойства гидрохимически осажденных пленок твердых растворов $Cd_xPb_{1-x}S$ / Л.Н. Маскаева, В.Ф. Марков, А.И. Гусев // Журнал неорганической химии. – 2004. – Т. 49, № 7. – С. 1065–1071.
11. Ternary $Pb_{1-x}Cd_xS$ Quantum Dot-Based UV-vis-NIR Photoelectrochemical Photodetection with Superior Photoresponsivity and Detectivity / Y. Zhu, Z. Huang, S. Wei *et al.* // Inorganic Chemistry Frontiers. – 2024. – Vol. 11, Iss. 15. – P. 4568–4575.
12. Ultrapure Thin Films of $CdPbS$ and PbS and Photodetectors based on them were Obtained and Studied for the First Time / R.D. Mukhamedyarov, A.A. Beketova, V.I. Stuk, G.R. Mukhamedyarova // Indian Journal of Physics. – 2024. – Т. 98, № 4. – С. 1229–1246.
13. Селянина А. Д. и др. Структура и свойства двухфазных слоев $Cd_xPb_{1-x}S/CdS$, полученных химическим осаждением из этилендиамин-цитратной системы / А.Д. Селянина, Л.Н. Маскаева, В.И. Воронин и др. // Физика и техника полупроводников. – 2022. – Т. 56, № 4. – С. 408–419.
14. Вейс, А.Н. Энергетический спектр и свойства сульфида свинца с имплантированным кислородом / А.Н. Вейс // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (213). – С. 9–20.
15. Properties of CdS Films Deposited by the Electron Beam Evaporation Technique / K. Sivaramoorthy, S.A. Bahadur, M. Kottaisamy, K.R. Murali // Journal of Alloys and Compounds. – 2010. – Vol. 503, Iss. 1. – С. 170–176.
16. Оптико-энергетические свойства тонких пленок CdS , полученных методом высококачественного магнетронного распыления / Р.Ю. Петрусь, Г.А. Ильчук, А.И. Кашуба и др. // Оптика и спектроскопия. – 2019. – Т. 126, № 3. – С. 299–304.
17. Senthil, K. Structural and Optical Properties of CdS Thin Films / K. Senthil, D. Mangalaraj, Sa.K. Narayandass // Applied Surface Science. – 2001. – Vol. 169. – P. 476–479.
18. Moon, B.S. Comparative Studies of the Properties of CdS Films Deposited on Different Substrates by RF Sputtering / B.S. Moon, J.H. Lee, H. Jung // Thin solid films. – 2006. – Vol. 511-512. – P. 299–303.
19. Быстродействующие инфракрасные детекторы обнаружения очагов открытого пламени и тления / А.В. Шнайдер, М.П. Миронов, А.В. Гусельников и др. // Пожаровзрывобезопасность. – 2008. – Т. 17, № 2. – С. 74–76.

20. Особенности получения и обработки ИК-изображений в матричных фотоприемниках с координатной адресацией на основе халькогенидов свинца / Г.А. Агранов, А.М. Дакин, В.К. Нестеров, С.К. Новоселов // Оптический журнал. – 1996. – № 9. – С. 53–57.

Поступила в редакцию 18 августа 2025 г.

Сведения об авторах

Полевой Борис Григорьевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Физика наноразмерных систем», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: polevoibg@susu.ru.

Ненарокомов Данил Ильич – инженер кафедры «Физика наноразмерных систем», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: nenarokomovdi@susu.ru.

Живулин Дмитрий Евгеньевич – кандидат химических наук, научный сотрудник – РМЛ электромеханических, электронных и электрохимических систем, младший научный сотрудник лаборатории роста кристаллов, доцент кафедры «Материаловедение и физико-химия материалов», Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: zhivulinde@susu.ru.

Жеребцов Дмитрий Анатольевич – доктор химических наук, старший научный сотрудник кафедры «Материаловедение и физико-химия материалов», старший научный сотрудник лаборатории экологических проблем постиндустриальной агломерации, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: zherebtcovda@susu.ru.

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.

Годовский Дмитрий Юльевич – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник ООО «Полин Разработки», г. Москва, Российская Федерация, e-mail: dgodovsky@polyn.ai.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2026, vol. 18, no. 1, pp. 81–90*

DOI: 10.14529/mmph260109

PHOTORESISTIC EFFECT IN $Pb_{1-x}Cd_xS$ FILMS PRODUCED BY VACUUM DEPOSITION

**B.G. Polevoy¹, D.I. Nenarokomov¹, D.E. Zhivulin¹,
D.A. Zherebtsov¹, A.G. Vorontsov¹, D.Yu. Godovskiy²**

¹ South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

² Polyn Technology LTD, Moscow, Russian Federation

E-mail: polevoibg@susu.ru

Abstract. This paper aims to obtain thin photoresistive films of lead sulfide doped with cadmium using magnetron sputtering and electron beam evaporation in a vacuum. It describes the methods of solid-phase synthesis of lead-cadmium sulfide solid solutions of the required composition and sintering of a ceramic target for DC magnetron sputtering. The composition of the resulting targets corresponds to a homogeneous solid solution based on galena. $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ films were deposited by sputtering a ceramic target with magnetron DC spraying onto sital and silicon substrates. The phase composition of the deposited films corresponds to that of the sputtered target and the resulting films exhibit a photoresistive effect. The authors determined the dark-light resistance ratio and time constants of the obtained photoresistive films. $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ films on silicon substrates exhibit higher sensitivity compared to those deposited on sital. $Pb_{0,88}Cd_{0,12}S$ and CDs were deposited by electron beam evaporation from a graphite cruci-

ble. $Pb_{0,88}Cd_{0,12}S$ films deposited using the electron beam method showed no photoresistive effect. The best dark-light resistance ratio and a time constant of 25 microseconds were demonstrated by $Pb_{0,96}Cd_{0,04}S$ films on a silicon substrate.

Keywords: thin films; vacuum deposition; photoresistive materials; cadmium sulfide; lead sulfide.

References

1. Butkevich V.G., Bochkov V.D., Globus E.R. Fotopriemniki i fotopriemnye ustroystva na osnove polikristallicheskikh i epitaksial'nykh sloev khal'kogenidov svintsa (Photodetectors and Photodetector Devices based on Polycrystalline and Epitaxial Layers of Lead Chalcogenides). *Prikladnaya fizika*, 2001, no. 6, pp. 66–112. (in Russ.).
2. Kumar Sushil, Sharma T.P., Zulfequar M., Husain M. Characterization of Vacuum Evaporated PbS Thin Films. *Physica B: Condensed Matter*, 2003, Vol. 325, P. 8–16. DOI: 10.1016/S0921-4526(02)01272-3
3. McDonald S.A., Konstantatos G., Zhang S., Cyr P.W., Klem E.J.D., Levina L., Sargent E.H. Solution-Processed PbS Quantum Dot Infrared Photodetectors and Photovoltaics. *Nature Materials*, 2005, Vol. 4, no. 2, pp. 138–142. DOI: 10.1038/nmat1299
4. Xu K., Xiao X., Zhou W., Jiang X., Wei Q., Chen H., Deng Z., Huang J., Chen B., Ning Z. Inverted Si:PbS Colloidal Quantum Dot Heterojunction-Based Infrared Photodetector. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2020, Vol. 12, Iss. 13, pp. 15414–15421. DOI: 10.1021/acsami.0c01744
5. Sun Z., Liu Z., Li J., Tai G.-A., Lau S.-P., Yan F. Infrared Photodetectors Based on CVD-Grown Graphene and PbS Quantum Dots with Ultrahigh Responsivity. *Advanced Materials*, 2012, Vol. 24, Iss. 43, pp. 5878–5883. DOI: 10.1002/adma.201202220
6. Liu H., Li M., Voznyy O., Hu L., Fu Q., Zhou D., Xia Z., Sargent E.H., Tang J. Physically Flexible, Rapid-Response Gas Sensor Based on Colloidal Quantum Dot Solids. *Advanced Materials*, 2014, Vol. 26, Iss. 17, pp. 2718–2724. DOI: 10.1002/adma.201304366
7. Mosahebfard A., Dehdashti Jahromi H., Sheikhi M.H. Highly Sensitive, Room Temperature Methane Gas Sensor Based on Lead Sulfide Colloidal Nanocrystals. *IEEE Sensors Journal*, 2016, Vol. 16, no. 11, pp. 4174–4179. DOI: 10.1109/JSEN.2016.2546966
8. Gréboval C., Rastogi P., Qu J., Chu A., Ramade J., Khalili A., Dabard C., Dang T.H., Cruquel H., Ouerghi A., Witkowski N., Silly M.G., Lhuillier E. Time-Resolved Photoemission to Unveil Electronic Coupling between Absorbing and Transport Layers in a Quantum Dot-Based Solar Cell. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2020, Vol. 124, no. 42, pp. 23400–23409. DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c06751.s001
9. Kim B.-S., Neo D.C.J., Hou B., Park J.B., Cho Y., Zhang N., Hong J., Pak S., Lee S., Sohn J.I., Assender H.E., Watt A.A.R., Cha S.N., Kim J.M. High Performance PbS Quantum Dot/Graphene Hybrid Solar Cell with Efficient Charge Extraction. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2016, Vol. 8, Iss. 22, pp. 13902–13908. DOI: 10.1021/acsami.6b02544
10. Maskaeva L.N., Markov V.F., Gusev A.I. The Effect of Cadmium Salts on the Composition and Properties of Hydrochemically Precipitated $Cd_xPb_{1-x}S$ Solid Solution. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2004, Vol. 49, Iss. 7, pp. 971–977.
11. Zhu Y., Huang Z., Wei S., Hu Y., Chen H., Wang M., Zi Y., Huang W. Ternary $Pb_{1-x}Cd_xS$ Quantum Dot-Based UV-vis-NIR Photoelectrochemical Photodetection with Superior Photoresponsivity and Detectivity. *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2024, Vol. 11, Iss. 15, pp. 4568–4575. DOI: 10.1039/d4qi01176g
12. Mukhamedyarov R.D., Beketova A.A., Stuk V.I., Mukhamedyarova G.R. Ultrapure Thin Films of CdPbS and PbS and Photodetectors based on them were Obtained and Studied for the First Time. *Indian Journal of Physics*, 2024, Vol. 98, no. 4, pp. 1229–1246. DOI: 10.1007/s12648-023-02899-2
13. Selyanina A.D., Maskaeva L.N., Voronin V.I., Selyanin I.O., Anokhina I.A., Markov V.F. Structure and Properties of Two-Phase $Cd_xPb_{1-x}S/CdS$ Films Obtained by Chemical Deposition from the Ethylenediamine-Citrate System. *Semiconductors*, 2022, Iss. 4, p. 279. DOI: 10.21883/SC.2022.04.53234.9783
14. Veis A.N. The Energy Spectrum and Some Properties of Lead Sulphide Implanted with Oxygen. *St. Petersburg Polytechnic University Journal: Physics and Mathematics*, 2015, no. 1 (213), pp. 9–20. DOI: 10.5862/JPM.213.1

15. Sivaramamoorthy K., Bahadur S.A., Kottaisamy M., Murali K.R. Properties of CdS Films Deposited by the Electron Beam Evaporation Technique. *Journal of Alloys and Compounds*, 2010, Vol. 503, Iss. 1, pp. 170–176. DOI: 10.1016/j.jallcom.2010.04.227

16. Petrus R.Yu., Ilchuk H.A., Kashuba A.I., Semkiv I.V., Zmiiivska E.O. Optical-Energy Properties of CdS Thin Films Obtained by the Method of High-Frequency Magnetron Sputtering. *Spectroscopy of Condensed States*, 2019, Vol. 126, pp. 220–225. DOI: 10.1134/S0030400X19030160

17. Senthil K., Mangalaraj D., Narayandass S. K. Structural and Optical Properties of CdS Thin Films. *Applied surface science*, 2001, Vol. 169, pp. 476–479. DOI: 10.1016/S0169-4332(00)00732-7

18. Moon B.S., Lee J.H., Jung H. Comparative Studies of the Properties of CdS Films Deposited on Different Substrates by RF Sputtering. *Thin Solid Films*, 2006, Vol. 511-512, pp. 299–303. DOI: 10.1016/j.tsf.2005.11.080

19. Shnayder A.V., Mironov M.P., Gusel'nikov A.V., Markov V.F., Maskaeva L.N. By-strodeystvuyushchie infrakrasnye detektory obnaruzheniya ochagov otkrytogo plameni i tleniya (High-Speed Infrared Detectors for Detecting Open Flames and Smoldering). *Pozharovzryvobezopasnost'*, 2008, Vol. 17, no 2, pp. 74–76. (in Russ.).

20. Agranov G.A., Dakin A.M., Nesterov V.K., Novoselov S.K. Osobennosti polucheniya i obrabotki IK-izobrazheniy v matrichnykh fotopriemnikakh s koordinatnoy adresatsiyey na osnove khal'kogenidov svintsya (Features of Obtaining and Processing IR Images in Matrix Photodetectors with Coordinate Addressing Based on Lead Chalcogenides). *Opticheskiy zhurnal*, 1996, no. 9, pp. 53–57. (in Russ.).

Received August 18, 2025

Information about the authors

Polevoy Boris Grigor'evich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Department of Physics of Nanoscale Systems, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: polevoibg@susu.ru.

Nenarokomov Danil Il'ich is Engineer, Department of Physics of Nanoscale Systems, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: nenarokomovdi@susu.ru.

Zhivulin Dmitriy Evgen'evich is Cand. Sc. (Chemical), Researcher at the RML of Electromechanical, Electronic and Electrochemical Systems, Junior Researcher at the Crystal Growth Laboratory, Associate Professor of the Department of Materials Science and Physics-Chemistry of Materials, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: zhivulinde@susu.ru.

Zherebtsov Dmitriy Anatol'evich is Dr. Sc. (Chemical), Senior Researcher at the Department of Materials Science and Physics-Chemistry of Materials, Senior Researcher at the Laboratory of Environmental Problems of Post-Industrial Agglomeration, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: zherebtcovda@susu.ru.

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.

Godovskiy Dmitriy Yul'evich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Chief Scientist Officer, Polyn Technology LTD, Moscow, Russian Federation., e-mail: dgodovsky@polyn.ai.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ГИДРИДОВ ТИТАНА ПРИ ПОМОЩИ МАШИННО-ОБУЧЕННЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

П.В. Чирков^{1,2}, А.А. Мирзоев²

¹ Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», г. Снежинск, Российская Федерация

² Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация
E-mail: chirkovpv@vniitf.ru, mirzoevaa@susu.ru

Аннотация. Исследование гидридов титана представляет интерес как с точки зрения изучения процессов водородного охрупчивания сплавов титана, так и создания перспективных металлических систем хранения водорода. Система Ti-H имеет фазовую диаграмму, в которой происходит фазовое превращение из ГЦК в тетрагональную ГЦТ кристаллическую решетку. Для исследования этого перехода было выполнено машинное обучение межатомного потенциала в рамках модели Moment Tensor Potential (MTP). Для построения потенциала, корректно воспроизводящего энергии системы при тетрагональной деформации, был создан обучающий набор данных, содержащий как периодические структуры, так и искаженные конфигурации, полученные при конечных температурах. Для получения потенциала, способного воспроизводить энергетические характеристики при тетрагональном искажении кристаллической решетки, применялась методика активного обучения, заключающаяся в контроле степени экстраполяции потенциала по сравнению с обучающим набором данных и последовательном дообучении MTP. Выполненное молекулярно-динамическое моделирование позволило установить, что температура ГЦТ-ГЦК превращения для дигидрида TiH₂ составляет 487 К, что выше наблюдаемых в экспериментах значений. Также было установлено, что при 300 К тетрагональная решетка гидридов TiH_x образуется при содержании водорода $x > 1,86$.

Ключевые слова: гидриды титана; молекулярная динамика; машинно-обученные потенциалы.

Введение

Титан и его сплавы рассматриваются как перспективные материалы для хранения водорода [1]. Кроме того, определенную актуальность изучение гидридов титана имеет с точки зрения водородного охрупчивания конструкционных материалов. Согласно экспериментальным данным [2], со стехиометрическим составом стабильными являются гидриды с композицией TiH₂. Фаза δ-TiH₂ имеет кристаллическую структуру типа флюорита с пространственной группой *Fm3m*, в которой атомы титана располагаются в гранецентрированной кубической решетке (ГЦК), а водород занимает тетраэдрические междоузлия решетки. При температурах ниже ~310 К происходит [3, 4] превращение в гранецентрированную тетрагональную ε-фазу. Кубическая δ-TiH_x фаза также наблюдается и для нестехиометрического содержания водорода при $1,5 < x < 2,0$. Причем превращение в тетрагональную фазу при комнатной температуре 298 К, согласно эксперименту [4], происходит при содержании водорода выше $x = 1,84$. Кроме того, дискуссионным является также вопрос, является ли фаза γ-TiH с соотношением $c/a > 1$ метастабильной или термодинамически устойчивой. Данная структура была обнаружена в некоторых гидрированных образцах (от 1 до 3 ат. % водорода) α-титана (ГПУ-решетка) в виде выделений в α-матрице [5]. Первопринципные расчеты свойств гидридов титана выполнялось неоднократно. Изучались как профили энергий относительно тетрагональной деформации при нулевой температуре [6], так и термодинамические свойства в рамках фононного подхода [7, 8]. В работе [9] в рамках квазигармонического приближения температура ГЦК-ГЦТ превращения для TiH₂ была определена выше 800 К. Учет электронного вклада в свободную энергию Гиббса при конечных температурах, проведенный в работе [10], позволил получить ε-δ переход при 418 К. Фазовые превращения между кубической и тетрагональной фазами с использованием метода молекулярной динамики (МД) для мартенсита Fe-C исследовалось ранее в работах [11–13].

В последнее десятилетие бурное развитие получил подход по разработке полуэмпирических потенциалов для молекулярно-динамического моделирования с использованием алгоритмов машинного обучения и машинно-обученных межатомных потенциалов (MLIP). В рамках такого подхода потенциалы для описания межатомных взаимодействий строятся не в виде физически обоснованной функциональной зависимости со специально подобранными параметрами, а в виде набора (часто весьма большого) простых с вычислительной точки зрения дескрипторов. Построенные таким образом потенциалы с помощью алгоритмов машинного обучения параметризуются с использованием результатов первопринципных расчетов энергетических и силовых характеристик моделируемых ансамблей и отдельных частиц. В работе [14] было проведено построение машинно-обученного потенциала для системы Ti-H и проведен расчет диффузии и механических свойств гидридов титана с различным содержанием водорода. Работа [15], в которой было выполнено обучение межатомного потенциала с помощью нейросетей, посвящена изучению формирования гидридов с ГЦК решеткой и её кристаллографической связью с матрицей α -Ti. Однако, в обеих работах методике обучения потенциала уделено недостаточно внимания, например, нет сведений ни о размере обучающей выборки, ни о радиусе обрезания потенциала.

С учетом сказанного выше, представляется актуальным построение MLIP-потенциалов для гидридов Ti-H с ГЦК решеткой и МД-моделирование их поведения при конечных температурах для наблюдения ГЦК-ГЦТ превращений и влияния на них содержания водорода.

Обучение машинно-обученного потенциала

Ab initio моделирование титана и его гидридов в данной работе выполнялось в рамках теории функционала плотности (DFT) с псевдопотенциальным подходом. Использовался метод Projector Augmented Wave (PAW) [16], реализованный в пакете Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP) [17-19]. Обменно-корреляционное взаимодействие рассматривалось с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) в формулировке Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) [20]. В рассматриваемом псевдопотенциале для титана учитывалось 12 внешних электронов в качестве валентных. Размытие электронных состояний было выбрано в форме Methfessel–Paxton [21] с шириной $\sigma = 0,05$ эВ. Энергии обрезания плоских волн задавалась на уровне 600 эВ. Разбиение первой зоны Бриллюэна в обратном пространстве было задано k -сеткой $4 \times 4 \times 4$ с центром в точке Γ , что обеспечивает максимальное расстояние между точками на уровне $0,15 \text{ \AA}^{-1}$.

В данной работе в качестве MLIP модели использовался Moment Tensor Potential (MTP) [22–24] реализованный в пакете MLIP-3 [25] и интегрированный в пакет классической молекулярной динамики LAMMPS [26]. Процедура обучения потенциала заключалась в генерации некоторого количества снимков, взятых из первопринципных молекулярно-динамических траекторий с интервалом в 100 шагов по 1 фс, чтобы избежать корреляций между выбранными конфигурациями. Для этого выполнялись МД расчеты в пакете VASP для систем TiH_x ($x = 2,0, 1,75, 1,5, 1,0$) с различными степенями тетрагональности c/a от 0,95 до 1,05. Размер системы составлял 108 атомов титана, расположенных в узлах ГЦК решетки, а атомы водорода занимали тетраэдрические междоузлия. Причем системы с нестехиометрическим соотношением создавались путем удаления случайных атомов H в решетке дигирида титана. Также для создания обучающей выборки выполнялись МД расчеты с различными соотношениями c/a для упорядоченной фазы γ -TiH, а также для системы TiH, в которых водород находился в октаэдрических порах. Всего таким образом было получено 1020 снимков.

Затем мы использовали процедуру активного обучения (Active Learning, AL), подробно представленную в работе [27], которая позволяет эффективным образом покрывать конфигурационное пространство дескрипторов потенциала и, таким образом, проводить дообучение модели только на необходимых конфигурациях. После обучения MTP на основе начальных данных выполнялись МД расчеты, в ходе которых на каждом временном шаге происходило вычисление степени экстраполяции γ на основе подхода D -оптимальности для получаемых атомных конфигураций, которая показывает есть ли в текущей обучающей выборке конфигурация «похожая» на текущее расположение атомов. Если степень экстраполяции γ находилась в области $2 < \gamma < 10$, то, такие конфигурации добавлялись к обучающему набору. Если же γ становилась больше, чем $\gamma_{\text{cr}} = 10,0$, то происходила остановка расчета, поскольку в этом случае высока вероятность попасть в нефизичные области конфигурационного пространства. Эти выбранные снимки исполь-

зовались в DFT для расчета сил, энергии и напряжений. Результаты добавляли в обучающие наборы МТР, после чего происходила дооптимизация коэффициентов МТР, далее МД расчеты продолжались. Итеративная процедура активного обучения выполнялась до тех пор, пока для систем TiH_x ($x = 2,0, 1,75, 1,5, 1,0$) на протяжении 100 тыс МД шагов в расчете не перестанут появляться конфигурации с $\gamma > 2,0$. По мере добавления новых конфигураций в обучающую выборку и улучшения качества работы потенциала температура в расчетах увеличивалась от 300 до 1000 К.

В итоге общее количество снимков при обучении составило 2963 конфигурации и, соответственно, такое же количество значений потенциальных энергий. Количество рассчитанных компонент сил, действующих на атомы титана составило $3 \cdot 2963 \cdot 108 \sim 9 \cdot 10^5$, количество компонент сил, действующих на атомы водорода, менялось в зависимости от концентрации, но имело примерно такой же порядок. Кроме того, для оптимизации потенциала использовались значения тензора напряжений (только его вириальная часть). Причем относительные веса для энергий, сил и давлений равнялись 1, 0,25, 0,25 соответственно. Радиус обрезания потенциала был выбран на уровне 5,0 Å, причем для больших значений r_{cut} вплоть до 6,0 Å не было отмечено увеличение точности оптимизации МТР, что свидетельствует о короткодействующем характере взаимодействия в гидридах титана. Радиус обрезания $r_{cut} = 5,0$ Å обеспечивает рассмотрение для ГЦТ-фазы TiH_2 74 ближайших соседей, из которых 18 атомов являются титаном. Для изучения свойств гидридов титана с различным содержанием водорода были обучены МТР различных уровней, для которых в таблице приведены значения ошибок для энергий и сил на обучающем наборе данных. Для дальнейших расчетов нами был выбран потенциал 22 уровня, содержащий 421 числовых коэффициента, определенных в ходе оптимизации.

Среднеквадратичные ошибки (СКО) по силам (F) и энергии (E)
при обучении МТР потенциалов различного уровня

«уровень» МТР	кол-во коэффициентов	СКО E , мэВ/атом	СКО F , мэВ/Å
16	130	13,6	163
18	201	8,42	127
20	295	5,17	108
22	421	3,52	99
24	581	3,16	96

На рис. 1, *a–в* построены парные диаграммы энергий и сил, действующих на атомы водорода и титана для сравнения МТР-22 и обучающего набора DFT расчетов. Видно, что значения энергий на рис. 1 *a* группируются в виде обособленных участков. Это объясняется тем, что обучение выполнялось для фиксированного набора концентраций водорода в достаточно узком интервале температур ниже 1000 К. Как следует из рис. 1 *б, в*, построенные МТР-потенциалы значительно точнее воспроизводят силы, действующие на атомы водорода, в сравнении с силами на атомах титана.

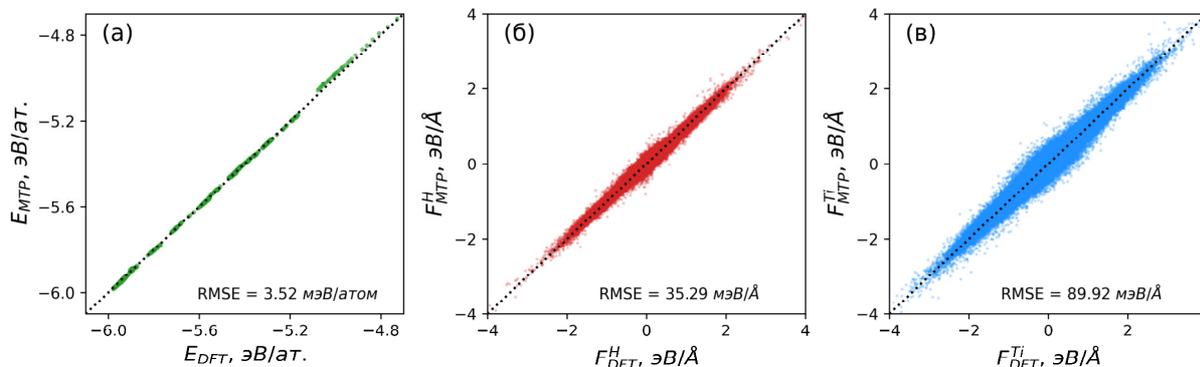


Рис. 1. Сравнение построенного МТР с обучающими данными DFT-расчетов для энергий (а), компонент сил, действующих на атомы водорода (б) и титана (в).

Сравнение результатов МТР с DFT было выполнено для упорядоченного моногидрида γ -TiH и дигидрида TiH_2 . Расчеты проводились без учета влияния конечных температур, выполнялась одноосная деформация вдоль оси c при сохранении объема и условия $a = b$. На рис. 2 представ-

лены зависимости потенциальной энергии для различных значений c/a . Решетка моногидрида оказывается стабильной при $c > a$, с осевым соотношением $c/a = 1,10$. В то же время для TiH_2 характерен сложный профиль энергии с минимумами в двух точках: $c/a = 0,92$ и $1,07$. Построенный МТР хорошо воспроизводит энергию моногидрида, в то время как для дигидрида энергия оказывается слегка сдвинута относительно DFT-результатов на $0,2$ кДж/моль (~ 2 мэВ/атом), хотя общий вид профиля энергии вдоль деформации c/a предсказывается верно.

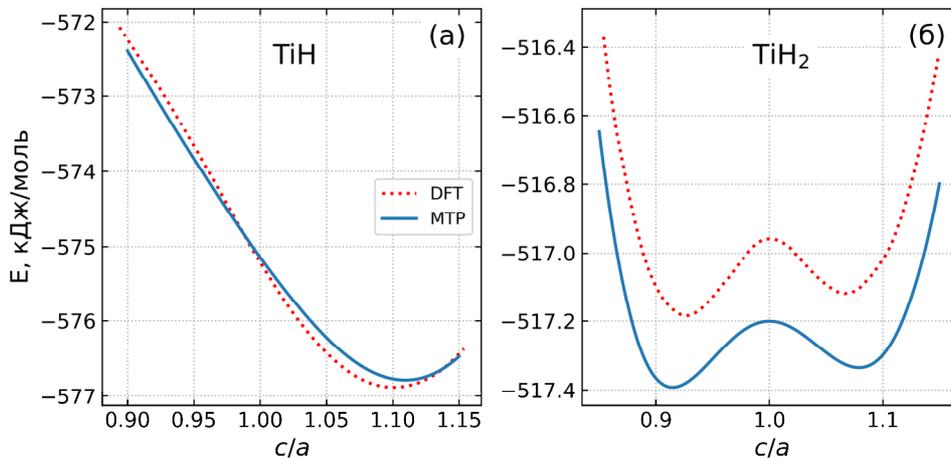


Рис. 2. Потенциальная энергия МТР в сравнении с DFT расчетами. для различного тетрагонального искажения c/a кристаллических решеток TiH (а) и TiH_2 (б).

Молекулярно-динамическое моделирование

Расчеты превращения при увеличении температуры для TiH_2 из тетрагональной решетки в кубическую проводились для систем, содержащих 4 000 атомов титана и 8 000 водорода. Для фиксированного значения T система удерживалась в NPT ансамбле на протяжении 40 тыс. шагов молекулярной динамики по 0,5 фс каждый, за вторую половину расчета проходило усреднение длины системы. Внешнее давление баростата задавалось нулевым, причем размеры системы могли изменяться независимо друг от друга, что обеспечило формирование анизотропной тетрагональной структуры. На рис. 3 представлены результаты молекулярно-динамических расчетов, из полученных данных видно, что при температурах выше ~ 487 К стабильной является кубическая кристаллическая решетка. Полученные результаты несколько выше экспериментальных данных [3, 4], согласно которым ГЦТ-ГЦТ превращение происходит при 310–314 К. Данная разница может объясняться отсутствием в DFT расчётах, использованных для обучения МТР, рассмотрения возбуждения электронных степеней свободы, связанных с конечными температурами.

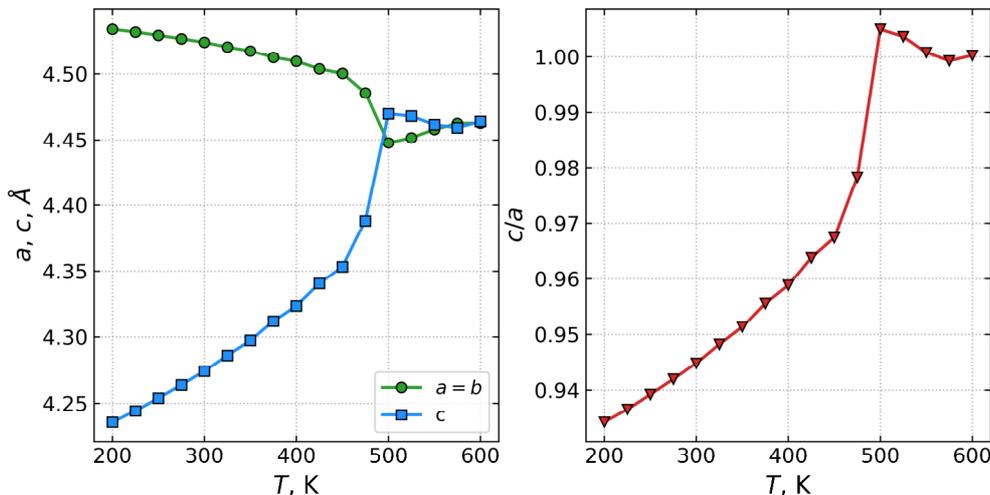


Рис. 3. МД расчеты с помощью МТР параметров решетки и тетрагонального соотношения c/a дигидрида титана для различных температур

Для гидридов вида TiH_x МД расчеты проводились в похожей манере, расчетная система также содержала 4 000 атомов титана при концентрации водорода $1,5 \leq x \leq 2,0$. Определенное число атомов H, соответствующее заданному содержанию x , имело случайное распределение по тетраэдрическим междоузлиям ГЦК решетки. Температура в расчетах поддерживалась равной 300 К. Из рис. 4 видно, что образование тетрагональной структуры происходит при содержании водорода $x = 1,86$, что хорошо согласуется с экспериментальным значением 1,84 [4].

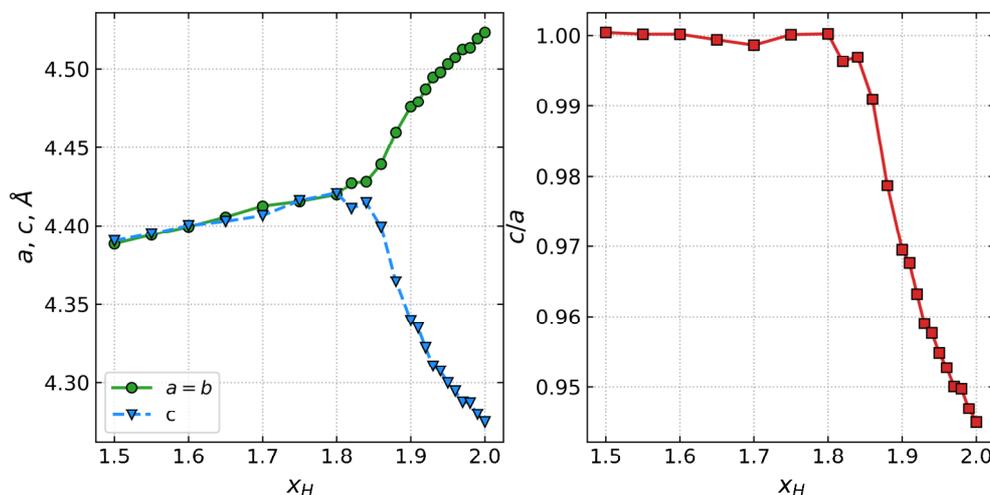


Рис. 4. Параметры решетки и осевое отношение c/a при $T=300$ К для гидридов с нестехиометрическим составом TiH_x .

Заключение

В данной работе исследовались фазовые превращения в системе титан-водород. Для выполнения молекулярно-динамического моделирования на уровне точности первопринципных расчетов было выполнено построение машинно-обученного межатомного потенциала в рамках модели МТР. Для его параметризации в рамках DFT расчетов был создан обучающий набор данных, содержащий 2963 конфигурации. Обученный МТР, содержащий 421 подгоночных коэффициента демонстрирует среднеквадратичное отклонение по энергии 3,52 мэВ/атом и 99 мэВ/Å для проекций сил. Построенный MLIP верифицировался на данных по энергии упорядоченных структур TiH и TiH_2 . Сравнение с первопринципными расчетами показывает хорошее согласие по энергии при одноосной деформации решетки.

Выполненное молекулярно-динамическое моделирование с машинно-обученным межатомным потенциалом в рамках модели МТР позволило оценить температуру ГЦТ-ГЦК превращения для дигидрида TiH_2 , которая составила 487 К, что несколько выше наблюдаемых в экспериментах значений ~ 310 К [3,4]. Установлено также, что при 300 К тетрагональная решетка образуется для содержаний водорода больших чем 1,86, что согласуется с экспериментальным значением 1,84 [4].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ No. 25-22-20062.

Литература

1. Research Progress in Solid-State Hydrogen Storage Alloys: A review / K. Chen, M.Y. Lau, X. Luo *et al.* // Journal of Materials Science and Technology. – 2026. – Vol. 246. – P. 256–289.
2. San-Martin, A. The H-Ti (Hydrogen-Titanium) System / A. San-Martin, F.D. Manchester // Bulletin of alloy phase diagrams. – 1982. – Vol. 8, Iss. 1. – P. 30–42.
3. Yakel, H.L. Thermocrystallography of Higher Hydrides of Titanium and Zirconium / H.L. Yakel // Acta Crystallographica. – 1958. – Vol. 11, Iss. 1. – P. 46–51.
4. Korn C. NMR Study Comparing the Electronic Structures of ZrH_x and TiH_x . / C. Korn // Physical Review B. – 1983. – Vol. 28, Iss. 1. – P. 95.
5. Numakura, H. Hydride Precipitation in Titanium / H. Numakura, M. Koiwa // Acta metallurgy. – 1984. – Vol. 32, Iss. 10. – P. 1799–1807.
6. Wolf, W. First-Principles Investigations of Transition Metaldihydrides, TH_2 : T= Sc, Ti, V, Y, Zr, Nb; Energetics Andchemical Bonding / W. Wolf, P. Herzig // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2000. – Vol. 12, no 21. – 4535.

7. Ab initio Thermodynamics Investigation of Titanium Hydrides / P.A.T. Olsson, J. Blomqvist, C. Bjerken, A.R. Massih // *Computational Materials Science*. – 2015. – Vol. 97. – P. 263–275.
8. Hydrogen Solubility in HCP Titanium with the Account of Vacancy Complexes and Hydrides: A DFT study / D.O. Poletaev, D.A. Aksyonov, D. Duy Vo, A.G. Lipnitskii // *Computational Materials Science*. – 2016. – Vol. 114. – P. 199–208.
9. Xu, Q. First-Principles Investigation of Metal-Hydride Phase Stability: The Ti-H System / Q. Xu, A. Van der Ven // *Physical Review B*. 2007. – Vol. 76, Iss. 6. – 064207.
10. First-Principles Investigation of the Structure and Thermodynamic Properties of Titanium Hydrides / J. Zhang, H. Dong, X. Dong, X. Li // *Computational Materials Science*. – 2024. – Vol. 238. – 112851.
11. Mirzaev, D.A. Ordering of Carbon Atoms in Free Martensite Crystals and when Enclosed in Elastic Matrix / D.A. Mirzaev, A.A. Mirzoev, P.V. Chirkov // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2016. – Vol. 47, Iss. 2. – P. 637–640.
12. Чирков, П.В. Роль напряжения и температуры в z -упорядочении атомов углерода в решетке мартенсита / П.В. Чирков, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // *Физика Металлов и Metallovedenie*. – 2016. – Т. 117, № 11. – С. 1181–1187.
13. Chirkov, P. Carbon Ordering in Martensite Lattice under External Stress: Thermodynamic Theory and Molecular Dynamics Simulation / P. Chirkov, A. Mirzoev, D. Mirzaev // *Physica Status Solidi B*. – 2018. – Vol. 255, Iss. 7. – 1700665.
14. Mechanical properties and hydrogen diffusion behaviors of metal hydrides from molecular dynamics simulations / F. Yu, X. Xia, C. Xu *et al.* // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2024. – Vol. 81. – P. 1288–1298.
15. Dissecting the Phase Transformation Mechanism of Titanium Hydride at Atomic Scale / X.-Y. Zhou, W. Lu, X. Peng *et al.* // *Acta Materialia*. – 2025. – Vol. 288. – 120856.
16. Blöchl, P.E. Projector Augmented-Wave Method / P.E. Blöchl // *Physical Review B*. – 1994. – Vol. 50, Iss. 24. – P. 17953–17979.
17. Kresse, G. Ab initio Molecular Dynamics for Openshell Transition Metals / G. Kresse, J. Hafner // *Physical Review B*. – 1993. – Vol. 48. – P. 13115.
18. Kresse, G. Efficiency of Ab-initio Total Energy Calculations for Metals and Semiconductors Using a Plane-Wave Basis Set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Computational Materials Science*. – 1996. – Vol. 6, Iss. 1. – P. 15.
19. Kresse, G. Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Physical Review B*. – 1996. – Vol. 54. – P. 11169.
20. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Physical Review Letters*. – 1996. – Vol. 77. – P. 3865.
21. Methfessel, M.P. High-Precision Sampling for Brillouin-Zone Integration in Metals / M.P. Methfessel, A. Paxton // *Physical Review B*. – 1989. – Vol. 40, Iss. 6. – P. 3616.
22. Shapeev, A.V. Moment Tensor Potentials: A Class of Systematically Improvable Interatomic Potentials / A.V. Shapeev // *Multiscale Modeling and Simulations*. – 2016. – Vol. 14, Iss. 3. – P. 1153.
23. Accelerating Crystal Structure Prediction by Machine-Learning Interatomic Potentials with Active Learning / E.V. Podryabinkin, E.V. Tikhonov, A.V. Shapeev, A.R. Oganov // *Physical Review B*. – 2019. – Vol. 99. – 064114.
24. The MLIP Package: Moment Tensor Potentials with MPI and Active Learning / I.S. Novikov, K. Gubaev., E.V. Podryabinkin, A.V. Shapeev // *Machine Learning: Science and Technology*. – 2020. – Vol. 2, no. 2. – 025002.
25. MLIP-3: Active Learning on Atomic Environments with Moment Tensor Potentials / E. Podryabinkin, K. Garifullin, A. Shapeev, I. Novikov // *Journal of Chemical Physics*. – 2023. – Vol. 159. – 084112.
26. LAMMPS-a Flexible Simulation Tool for Particle-Based Materials Modeling at the Atomic, Meso, and Continuum Scales / A.P. Thompson, H.M. Aktulga, R. Berger *et al.* // *Computer Physics Communications*. – 2022. – Vol. 271. – 108171.
27. Podryabinkin, E.V. Active Learning of Linearly Parametrized Interatomic Potentials / E.V. Podryabinkin, A.V. Shapeev // *Computational Materials Science*. – 2017. – Vol. 140. – P. 171–180.

Поступила в редакцию 22 октября 2025 г.

Сведения об авторах

Чирков Павел Владимирович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск, Российская Федерация; научный сотрудник, Управление научной и инновационной деятельностью, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: chirkovpv@vniitf.ru.

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

**MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF TITANIUM HYDRIDE STABILITY
USING MACHINE-LEARNED POTENTIALS**

P.V. Chirkov^{1,2}, A.A. Mirzoev²

¹ Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute of Technical Physics named after Academician E.I. Zababakhin, Snezhinsk, Russian Federation

² South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation,
E-mail: chirkovpv@vniitf.ru, mirzoevaa@susu.ru

Abstract. Studies into of titanium hydrides are important for understanding hydrogen embrittlement processes in titanium alloys and developing promising metallic hydrogen storage systems. The Ti-H system has a phase diagram characterized by a phase transformation from a FCC to a tetragonal FCT crystal lattice. This transition was studied using machine learning of the interatomic potential based on the Moment Tensor Potential (MTP) model. To construct a potential able to accurately reproduce the energies of the system under tetragonal deformation, we created a training dataset containing both periodic structures and distorted configurations obtained at finite temperatures. To obtain a potential able to reproduce energy characteristics under tetragonal lattice distortion, we used an active learning technique, which controlled the degree of potential extrapolation compared to the training dataset and sequentially retrained the MTP. Molecular dynamics simulations have revealed that the FCT-FCC transformation temperature for TiH₂ dihydride is 487 K, which is higher than experimentally observed values. We also found that at 300 K, a tetragonal lattice of TiH_x hybrids is formed at a hydrogen content greater than 1,86.

Keywords: titanium hydrides; molecular dynamics; machine-learned potentials.

References

1. Chen K., Lau M.Y., Luo X., Huang J., Ouyang L., Yang X.S. Research Progress in Solid-State Hydrogen Storage Alloys: A review. *Journal of Materials Science and Technology*, 2026, Vol. 246, pp. 256–289. DOI: 10.1016/j.jmst.2025.05.037
2. San-Martin A., Manchester F.D. The H-Ti (Hydrogen-Titanium) System. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 1982, Vol. 8, Iss. 1, pp. 30–42. DOI: 10.1007/BF02868888
3. Yakel H.L. Thermocrystallography of Higher Hydrides of Titanium and Zirconium. *Acta Crystallographica*, 1958, Vol. 11, Iss. 1, pp. 46–51. DOI: 10.1107/S0365110X58000098
4. Korn C. NMR Study Comparing the Electronic Structures of ZrH_x and TiH_x. *Physical Review B*, 1983, Vol. 28, Iss. 1, p. 95. DOI: 10.1103/PhysRevB.28.95
5. Numakura H., Koiwa M. Hydride Precipitation in Titanium. *Acta metallurgy*, 1984, Vol. 32, Iss. 10, pp. 1799–1807. DOI: 10.1016/0001-6160(84)90236-0
6. Wolf W., Herzig P. First-Principles Investigations of Transition Metaldihydrides, TH₂: T= Sc, Ti, V, Y, Zr, Nb; Energetics Andchemical Bonding. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2000, Vol. 12, no. 21, 4535. DOI: 10.1088/0953-8984/12/21/301

7. Olsson P.A.T., Blomqvist J., Bjerken C., Massih. A.R. Ab initio Thermodynamics Investigation of Titanium Hydrides. *Computational Materials science*, 2015, Vol. 97, pp. 263–275. DOI: 10.1016/j.commatsci.2014.10.029
8. Poletaev D.O., Aksyonov D.A., Duy Vo D., Lipnitskii A.G. Hydrogen Solubility in HCP Titanium with the Account of Vacancy Complexes and Hydrides: A DFT study. *Computational Materials Science*, 2016, Vol. 114, pp. 199–208. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.12.037
9. Xu Q., Van der Ven A. First-Principles Investigation of Metal-Hydride Phase Stability: The Ti-H System. *Physical Review B*, 2007, Vol. 76, Iss. 6, 064207. DOI: 10.1103/PhysRevB.76.064207
10. Zhang J., Dong H., Dong X., Li X. First-Principles Investigation of the Structure and Thermodynamic Properties of Titanium Hydrides. *Computational Materials Science*, 2024, Vol. 238, 112851. DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.112851
11. Mirzaev D.A., Mirzoev A.A., Chirkov P.V. Ordering of Carbon Atoms in free Martensite Crystals and when Enclosed in Elastic Matrix. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2016, Vol. 47, Iss. 2, pp. 637–640. DOI: 10.1007/s11661-015-3258-9
12. Chirkov P.V., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. Role of Stresses and Temperature in the Z-Ordering of Carbon Atoms in the Martensite Lattice. *Physics of Metals and Metallography*, 2016, Vol. 117, Iss 11, pp. 1138–1143. DOI: 10.1134/S0031918X16110041
13. Chirkov P., Mirzoev A., Mirzaev D. Carbon Ordering in Martensite Lattice under External Stress: Thermodynamic Theory and Molecular Dynamics Simulation. *Physica Status Solidi B*, 2018, Vol. 255, Iss. 7, 1700665. DOI: 10.1002/pssb.201700665
14. Yu F., Xia X., Xu C., Zu X., Hu S. Mechanical Properties and Hydrogen Diffusion Behaviors of Metal Hydrides from Molecular Dynamics Simulations. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2024, Vol. 81, pp. 1288–1298. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2024.07.331
15. Zhou X.-Y., Lu W., Peng X., Zhuang X., Wang M., Yang X.S., Ye S. Wu H. Dissecting the Phase Transformation Mechanism of Titanium Hydride at Atomic Scale. *Acta Materialia*, 2025, Vol. 288, 120856. DOI: j.actamat.2025.120856
16. Blöchl, P.E. Projector Augmented-Wave Method/ *Physical Review B*, 1994, Vol. 50, Iss. 24, pp. 17953–17979. DOI: 10.1103/PhysRevB.50.17953
17. Kresse G., Hafner J. Ab initio Molecular Dynamics for Openshell Transition Metals. *Physical Review B*, 1993, Vol. 48, P. 13115. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.13115
18. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of Ab-initio Total Energy Calculations for Metals and Semiconductors Using a Plane-Wave Basis Set. *Computational Materials Science*, 1996, Vol. 6, Iss. 1, p. 15. DOI: 10.1016/0927-0256(96)00008-0
19. Kresse G., Furthmüller J. Efficient Iterative Schemes for Ab initio Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set. *Physical Review B*, 1996, Vol. 54, P. 11169. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
20. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M., Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 1996, Vol. 77, P. 3865. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865
21. Methfessel M.P., Paxton A.T. High-Precision Sampling for Brillouin-Zone Integration in Metals. *Physical Review B*, 1989, Vol. 40, Iss. 6, P. 3616. DOI: 10.1103/PhysRevB.40.3616
22. Shapeev A.V. Moment Tensor Potentials: A Class of Systematically Improvable Interatomic Potentials. *Multiscale Modeling and Simulations*, 2016, Vol. 14, Iss. 3, P. 1153. DOI: 10.1137/15M1054183
23. Podryabinkin E.V., Tikhonov E.V., Shapeev A.V., Oganov A.R. Accelerating Crystal Structure Prediction by Machine-Learning Interatomic Potentials with Active Learning. *Physical Review B*, 2019, Vol. 99, 064114. DOI: 10.1103/PhysRevB.99.064114
24. Novikov I.S., Gubaev K., Podryabinkin E.V., Shapeev A.V. The MLIP package: Moment Tensor Potentials with MPI and Active Learning. *Machine Learning: Science and Technology*, 2020, Vol. 2, no. 2, 025002. DOI: 10.1088/2632-2153/abc9fe
25. Podryabinkin E., Garifullin K., Shapeev A., Novikov I. MLIP-3: Active Learning on Atomic Environments with Moment Tensor Potentials. *Journal of Chemical Physics*, 2023, Vol. 159, 084112. DOI: 10.1063/5.0155887
26. Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R., Bolintineanu D.S., Brown W.M., Crozier P.S., in 't Veld P.J., Kohlmeyer A., Moore S.G., Nguyen T.D., Shan R., Stevens M.J., Tranchida J., Trott C.,

Plimpton S.J. LAMMPS-a Flexible Simulation Tool for Particle-Based Materials Modeling at the Atomic, Meso, and Continuum Scales. *Computer Physics Communications*, 2022, Vol. 271, 108171. DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108171

27. Podryabinkin E.V., Shapeev A.V. Active Learning of Linearly Parametrized Interatomic Potentials. *Computational Materials Science*, 2017, Vol. 140, P. 171–180. DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.08.031

Received October 22, 2025

Information about the authors

Chirkov Pavel Vladimirovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Senior Researcher, FSUE “Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute of Technical Physics named after Academician E.I. Zababakhin”, Snezhinsk, Russian Federation; Researcher, Department of Scientific and Innovation Activities, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: chirkovpv@vniitf.ru.

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

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

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

Периодичность выхода – 4 номера в год.

Адрес редакции: 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 18, № 1
2026

16+

Техн. редактор *А.В. Миних*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 29.01.2026. Дата выхода в свет 04.02.2026.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 12,09.

Тираж 500 экз. Заказ 8/8. Цена свободная.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ.

454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76.