

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА «МИФИ»



ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА «МИФИ»

Том 14 № 5 2025 СЕНТЯБРЬ – ОКТЯБРЬ

Основан в июле 2012 г.

Выходит 6 раз в год

ISSN: 2304-487X

ПИ № ФС 77-41948

Главный редактор

Михаил Николаевич Стриханов, д. ф.-м. наук, профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Заместитель главного редактора

Николай Алексеевич Кудряшов, д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Выпускающий редактор

Наталья Вячеславовна Ермолаева, к.т.н., НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Ответственный секретарь

Михаил Александрович Чмыхов, к.ф.-м.н., доцент, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Редакционная коллегия:

Аксёнов Александр Васильевич – д.ф.-м.н., профессор, МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва (Россия)

Бедриковецкий Павел – д.ф.-м.н., профессор, Университет Аделаиды, Аделаида, (Австралия)

Гаранин Сергей Григорьевич – чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор,

Институт лазерно-физических исследований РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров (Россия)

Евтихий Николай Николаевич – д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Калашников Николай Павлович – д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Каргин Николай Иванович – д.т.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Кашенко Сергей Александрович – д.ф.-м.н., профессор,

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова, г. Ярославль (Россия)

Лазаров Райчо – доктор наук, профессор математики, Техасский университет А&М,
г. Колледж-Стейшен (США)

Нагорнов Олег Викторович – д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Полянин Андрей Дмитриевич – д.ф.-м.н., профессор,

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, г. Москва (Россия)

Цегельник Владимир Владимирович – д.ф.-м.н., профессор,

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск (Белорусь)

Четверушкин Борис Николаевич – член РАН, д.ф.-м.н., профессор, Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва (Россия)

Эфендиев Ялчин – д.ф.-м.н., профессор, Техасский университет А&М, г. Колледж-Стейшен (США)

Компьютерная верстка: Девятилова Светлана Константиновна

Учредитель и издатель: Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Адрес редакции: 115409, Москва, Каширское шоссе, д. 31, Вестник НИЯУ МИФИ

Сайт: <https://vestnikmephi.elpub.ru>

Электронная почта: vestnik@mephi.ru

**Москва
НИЯУ МИФИ**

СОДЕРЖАНИЕ

Том 14, № 5, 2025

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

- Сдвиговые волны в нелинейно-вязко упругой цилиндрической оболочке**
А. И. Землянухин, А. В. Бочкарев, Н. А. Артамонов 379
- Математическое моделирование и оптимизация дожигания топлива при выводе из эксплуатации реактора РБМК**
А. М. Загребаев, Г. А. Литвинова, А. С. Ястребов 393
- Применение математического моделирования и цифровых технологий для оптимизации планирования дентальной имплантации**
К. Д. Савин, А. В. Хрестин, Т. В. Брайловская, П. Н. Рябов 402
-

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

- Обратная задача определения функции источника в вырождающемся параболическом уравнении с дивергентной главной частью на плоскости**
В. Л. Камынин, О. В. Нагорнов 414
- О свойствах решений обратных задач восстановления палеотемператур**
О. В. Нагорнов, С. А. Тюфлин, В. Л. Камынин 424
-

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

- Методика определения светотехнических характеристик светодиодов**
К. Н. Орлова, А. В. Градобоев, А. В. Беклемишева, А. Р. Аванесян 431
- Моделирование атомной структуры когерентной границы раздела между железом и магнетитом**
Н. Д. Комаров, В. А. Бородин 440
- Полиэнергетическая имплантация ионов гелия в кремний**
С. Г. Шемардов, А. В. Беклемишева, П. А. Александров, А. Л. Васильев, В. Н. Беклемишев 452
-

ЯДЕРНАЯ ЭНЕРГЕТИКА И ЯДЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

- Экспериментальное обоснование оптимальных параметров работы оборудования системы охлаждения инертной камеры**
А. В. Носов, С. Ю. Каледин, Р. Н. Шамсутдинов, С. М. Савчиц 457

CONTENTS

Volume 14, Number 5, 2025

MATHEMATICAL MODELS AND NUMERICAL METHODS

- Shear waves in a nonlinear viscoelastic cylindrical shell**
A. I. Zemlyanukhin, A. V. Bochkarev, N. A. Artamonov 379
- Mathematical modeling and optimization of fuel utilization in the decommissioning of an RBMK reactor**
A. M. Zagrebaev, G. A. Litvinova, A. S. Yastrebov 393
- Application of mathematical modeling and digital technologies for optimizing dental implantation planning**
K. D. Savin, A. V. Khrestin, T. V. Brailovskaya, P. N. Ryabov 402
-

APPLIED MATHEMATICS AND COMPUTER SCIENCE

- Inverse problem of determining the source function in a degenerate parabolic equation with a divergent principal part on a plane**
V. L. Kamynin, O. V. Nagornov 414
- Properties of the inverse problem solutions for paleotemperature reconstructions**
O. V. Nagornov, S. A. Tyufin, V. L. Kamynin 424
-

CONDENSED MATTER PHYSICS

- Determining Method for Lighting Characteristics LEDs**
K. N. Orlova, A. V. Gradoboev, A. V. Beklemisheva, A. R. Avanesyan 431
- Modeling the atomic structure of iron-magnetite interface**
N. D. Komarov, V. A. Borodin 440
- Poly-energy implantation of helium ions into silicon**
S. G. Shemardov, A. V. Beklemisheva, P. A. Alexandrov, A. L. Vasiliev, V. N. Beklemishev 452
-

NUCLEAR ENERGY AND NUCLEAR TECHNOLOGIES

- Experimental substantiation of optimal parameters of cooling system for inert gas cell**
A. V. Nosov, S. Yu. Kaledin, R. N. Shamsutdinov, S. M. Savchits 457

УДК 539.3

Сдвиговые волны в нелинейно-вязко упругой цилиндрической оболочке

© 2025 г. А. И. Землянухин, А. В. Бочкарев, Н. А. Артамонов

Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А., Саратов, 410054, Россия

Методами асимптотического интегрирования проведено моделирование распространения пучка сдвиговых волн вдоль образующей нелинейно-вязко упругой цилиндрической оболочки модели Сандерса – Койтера. Считается, что оболочка изготовлена из материала, характеризующегося кубической зависимостью между интенсивностями напряжений и деформаций, безразмерные параметры тонкостенности и физической нелинейности являются величинами одного порядка малости, а отношение вязкоупругих постоянных есть безразмерный параметр более высокого порядка малости. Используется разновидность метода многомасштабных разложений, позволяющая из уравнений линейного приближения определить скорость распространения волны, а в первом существенно нелинейном приближении получить разрешающее нелинейное квазигиперболическое уравнение для главного члена разложения сдвиговой компоненты смещения. Выведенное уравнение представляет собой кубически нелинейную модификацию бездисперсионного уравнения Кадомцева – Петвиашвили – Бюргерса, являясь частным случаем модифицированного уравнения Хохлова – Заболотской – Кузнецова. Решение выведенного уравнения отыскивается в виде одной гармоники с медленно меняющейся комплексной амплитудой, поскольку в деформируемых средах с кубической нелинейностью эффект самовоздействия волны существенно преобладает над эффектом генерации высших гармоник. В результате для комплексной амплитуды получено уравнение Гинзбурга – Ландау, для которого построено точное физически состоятельное решение.

Ключевые слова: нелинейно-вязкоупругая цилиндрическая оболочка, сдвиговые волны, асимптотическое интегрирование, уравнение Гинзбурга – Ландау.

Введение

В настоящее время отмечается возрастание интереса к изучению нелинейных сдвиговых волн в системах различной физической природы применительно к задачам акустической диагностики и неразрушающего контроля. Биомедицинские приложения сдвиговых волн обсуждаются в [1–2]. Показана возможность диагностики патологий и функционального состояния мышечной системы, связанной с тем, что скорость этих волн в мышцах много меньше скорости продольных волн, и формированием более высокой симметрии. Соответствующие акустические методы имеют большие перспективы в диагностике невралгических патологий, а также в геронтологии, спортивной и космической медицине. В [3] предложен способ измерения сдвиговой упругости радиационным давлением фокусированного ультразвука, известный как SWEI (Shear Wave Elasticity Imaging). Развитие этой методики, называемое сверхзвуковой сдвиговой визуализацией (SSI), обсуждается в [4–5]. Результаты наблюдения сдвиговой волны, возбужденной с помощью фокусированного ультразвука в резиноподобной среде, приведены в [6]. Построена теоретическая модель, позволяющая вычислять характеристики генерируемой сдвиговой волны в зависимости от параметров среды и исходной продольной волны.

✉ А.И. Землянухин: azemlyanukhin@mail.ru
А.В. Бочкарев: ab2009sar@list.ru
Н.А. Артамонов: twostvoll@gmail.com

Поступила в редакцию: 28.07.2025
После доработки: 23.08.2025
Принята к публикации: 28.08.2025

В [7] рассматриваются плоские нелинейные сдвиговые волны в среде с памятью. Выведены модельные уравнения с кубической нелинейностью, анализ которых проводится на основе уравнения Дуффинга. Исследованию распространения линейных и нелинейных сдвиговых волн в вязкоупругих средах посвящена диссертация [8]. Классы точных волновых решений для сдвиговых волн в специальных вязких средах построены в [9]. В [10] аналитически и численно анализируются эффекты кубической нелинейности в пучках сдвиговых волн различной поляризации. Уединенные и компактные сдвиговые волны изучаются в [11]. В [12] нелинейные волны сдвига анализируются на основе неньютоновской вязкоупругой жидкости с использованием обобщенной гидродинамической модели. Получено численное решение, которое показывает, что начальные периодические решения повторяются после прохождения нескольких паттернов периодических волн. Таким образом, выявлен аналог возврата Ферми – Паста – Улама. В [13] рассмотрено распространение двумерных волн сдвига конечной амплитуды в нелинейном предварительно напряженном несжимаемом твердом теле. Показано, что скалярное уравнение Заболоцкой является асимптотическим пределом уравнений движения для всех упругих обобщенных неогуковских тел (с энергией деформации, зависящей только от первого главного инварианта деформации Коши – Грина). Учет дисперсии и диссипации позволяет получить известные уравнения Кадомцева – Петвиашвили, Заболоцкой – Хохлова и Хохлова – Заболоцкой – Кузнецова. Возможность генерации второй гармоники для сдвиговых волн в упруго-пластической среде продемонстрирована в [14]. В [15] рассмотрены сдвиговые горизонтальные (SH) волны в свободных и зажатых моноклинных пластинах с произвольной неоднородностью на пластине. Представлено аналитическое и численное моделирование дисперсионных ветвей SH. Оценки в замкнутой форме сравниваются с точными кривыми, рассчитанными для свободной пластины с непрерывно меняющимися свойствами. Нелинейные сдвиговые волны в твердом теле с микроструктурой изучаются в [16]. В [17] аналитически моделируются сдвиговые волны в нелинейно-упругом теле. Распространение пучка сдвиговых волн в наследственной среде в квазиоптическом приближении рассмотрено в [18]. В [19] моделируется распространение сдвиговых солитонов в упругой пластине. В работах [20–23] выводятся квазигиперболические и эволюционные уравнения, редуцируемые к интегрируемым. Тем самым показываются возможность генерации и условия существования сдвиговых солитонов. Нелинейные продольные и сдвиговые стационарные волны деформации в градиентно-упругой среде рассмотрены в [20]. Показано, что сдвиговые стационарные волны описываются уравнением Дуффинга. В [21] установлено, что сдвиговые волны, распространяющиеся в нелинейной пластине, лежащей на упругом основании, параметры которого изменяются по закону бегущей волны, являются модуляционно неустойчивыми. Изучен вопрос о стабилизации этой неустойчивости с помощью изменения параметров упругого основания. Распространение нелинейных сдвиговых волн в зернистой среде рассмотрено в [22]. Показано, что низкочастотные солитоноподобные возмущения описываются уравнением Буссинеска. В [23] моделирование уединенных сдвиговых волн в зернистой среде впервые привело к возмущенному уравнению синус – Гордона. Показано, что скорость уединенной волны всегда меньше скорости поперечной сейсмической волны. В [24] исследуется влияние разномодульности материала на эволюцию сдвиговой волны Римана. Выявлена зависимость характерного расстояния опрокидывания волны Римана от значений соответствующих модулей упругости.

Задачи нелинейной волновой динамики цилиндрических оболочек, в отличие от аналогичных задач для стержней и пластин [25], до настоящего времени исследованы в меньшей степени. Причина состоит в том, что в стержнях и пластинах тангенциальные и нормальные перемещения разделены в линейном приближении и связываются только за счет нелинейности, что упрощает использование процедур асимптотического интегрирования [26] систем исходных уравнений. В оболочках (за счет кривизны), продольные, окружные и нормальные смещения связаны уже в линейном приближении, и разделение волновых движений на продольные, сдвиговые (крутильные) и изгибные становится, до известной степени, условным. В зависимости от того, какая из компонент перемещений преобладает, здесь приходится говорить о продольно-изгибных, изгибно-продольных, изгибно-сдвиговых и т.д. волнах. Нелинейные осесимметричные вол-

ны продольно-изгибного типа рассмотрены в [27–29]. Изгибно-продольные волны изучаются в [30]. В [27–30] построены классы точных солитоноподобных и периодических решений и обсуждены вопросы их физической реализуемости.

Данная статья, посвященная моделированию распространения преимущественно сдвиговой волны вдоль образующей нелинейно-вязкоупругой цилиндрической оболочки, организована следующим образом. В первом разделе получена система уравнений движения в перемещениях для нелинейно-упругой оболочки. Во втором разделе полученная система преобразуется с учетом вязкоупругих свойств материала оболочки. Здесь же выводится разрешающее уравнение. В разделе параграфе строится точное решение одной из физически содержательных редукций выведенного уравнения. В заключении перечислены полученные результаты.

1. Уравнения движения в перемещениях для нелинейно-упругой оболочки

Дальнейший анализ проведем на основе модели цилиндрической оболочки Сандерса – Койтера [31–32]. Геометрически линейные уравнения движения элемента оболочки имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_x}{\partial x} + \frac{\partial N_{xy}}{\partial y} + \frac{1}{2R} \frac{\partial M_{xy}}{\partial y} - \frac{\gamma h}{g} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= 0, \\ \frac{\partial N_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial N_y}{\partial y} - \frac{3}{2R} \frac{\partial M_{xy}}{\partial x} - \frac{1}{R} \frac{\partial M_y}{\partial y} - \frac{\gamma h}{g} \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} &= 0, \\ \frac{\partial^2 M_x}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 M_{xy}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 M_y}{\partial y^2} + \frac{1}{R} N_y - \frac{\gamma h}{g} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где x, y – продольная и окружная координаты; u, v, w – перемещения срединной поверхности элемента оболочки в продольном, окружном и радиальном направлениях, соответственно; N_x, M_x – нормальное усилие и изгибающий момент в сечении, перпендикулярном оси Ox ; N_y, M_y – нормальное усилие и изгибающий момент в сечении, перпендикулярном оси Oy ; N_{xy}, M_{xy} – сдвиговое усилие и крутящий момент в сечении плоскостью Oxy ; R, γ – радиус кривизны и поверхностная плотность оболочки; g – ускорение свободного падения, t – время.

Будем считать, что оболочка изготовлена из нелинейно-упругого материала, характеризующегося кубической зависимостью между интенсивностями напряжений и деформаций [33]

$$\sigma_i = E_0 \varepsilon_i - m \varepsilon_i^3, \quad (2)$$

где E_0 – начальный модуль упругости и m – константа материала, определяемая экспериментально [34].

Используем физические соотношения [34]

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \lambda(\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z) + 2G\varepsilon_x, \\ \sigma_y &= \lambda(\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z) + 2G\varepsilon_y, \\ \sigma_z &= \lambda(\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z) + 2G\varepsilon_z, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\tau_{xy} = G\varepsilon_{xy}, \quad (4)$$

в коэффициентах Ламе которых

$$\lambda = \frac{\mu E}{(1+\mu)(1-2\mu)}, \quad G = \frac{E}{2(1+\mu)} \quad (5)$$

символ $E = \frac{\sigma_i}{\varepsilon_i}$ обозначает секущий модуль нелинейно-упругого материала, вычисляемый согласно (2), μ – коэффициент Пуассона. Пренебрегая компонентой напряжения σ_z в сравнении с σ_x и σ_y , из получаем

$$\begin{aligned}\sigma_x &= \frac{E}{1-\mu^2}(\varepsilon_x + \mu\varepsilon_y), \\ \sigma_y &= \frac{E}{1-\mu^2}(\varepsilon_y + \mu\varepsilon_x).\end{aligned}\quad (6)$$

Примем стандартные для теории тонких оболочек связи деформаций ε произвольной точки материала с деформациями e и изменениями кривизн κ срединной поверхности

$$\begin{aligned}\varepsilon_x &= e_x + \kappa_x z, \\ \varepsilon_y &= e_y + \kappa_y z, \\ \varepsilon_{xy} &= e_{xy} + \kappa_{xy} z.\end{aligned}\quad (7)$$

Подставляя (7) в (4), (6) и интегрируя по толщине элемента оболочки в пределах от $-\frac{h}{2}$ до $\frac{h}{2}$, получаем следующие выражения для погонных усилий:

$$\begin{aligned}N_x &= \frac{(E_0 - me_i^2)h}{1-\mu^2}(e_x + \mu e_y), \\ N_y &= \frac{(E_0 - me_i^2)h}{1-\mu^2}(e_y + \mu e_x), \\ N_{xy} &= \frac{(E_0 - me_i^2)h}{2(1+\mu)}e_{xy},\end{aligned}\quad (8)$$

и моментов

$$\begin{aligned}M_x &= \frac{(E_0 - me_i^2)h^3}{12(1-\mu^2)}(\kappa_x + \mu\kappa_y) - \frac{2mFh^3}{27(1-\mu^2)(1-\mu)^2}(e_x + \mu e_y), \\ M_y &= \frac{(E_0 - me_i^2)h^3}{12(1-\mu^2)}(\kappa_y + \mu\kappa_x) - \frac{2mFh^3}{27(1-\mu^2)(1-\mu)^2}(e_y + \mu e_x), \\ M_{xy} &= \frac{(E_0 - me_i^2)h^3}{12(1-\mu^2)} \cdot \frac{1-\mu}{2} \cdot \kappa_{xy} - \frac{2mFh^3}{27(1-\mu^2)(1-\mu)^2} \cdot \frac{1-\mu}{2} \cdot e_{xy},\end{aligned}\quad (9)$$

где

$$e_i^2 = \frac{4}{9} \left(e_x^2 - e_x e_y + e_y^2 + \frac{\mu}{(1-\mu)^2} (e_x + e_y)^2 + \frac{1}{3} e_{xy}^2 \right) \quad (10)$$

есть квадрат интенсивности деформаций срединной поверхности и введено обозначение

$$F = (1-\mu+\mu^2)(\kappa_x e_x + \kappa_y e_y) - \frac{1}{2}(1-4\mu+\mu^2)(\kappa_y e_x + \kappa_x e_y) + \frac{3}{4}\kappa_{xy} e_{xy} (1-\mu)^2. \quad (11)$$

Компоненты изменений кривизн и деформаций в линеаризованной модели Сандерса – Койтера связаны с компонентами перемещений следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} e_x &= \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \kappa_x = -\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}, \\ e_y &= \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{1}{R}w, \quad \kappa_y = -\left[\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{1}{R}\frac{\partial v}{\partial y}\right], \\ e_{xy} &= \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \kappa_{xy} = -2\left[\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} + \frac{1}{4R}\left(3\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}\right)\right]. \end{aligned} \quad (12)$$

Подставляя (12) в (8) и (9), а затем полученные соотношения – в (1), и пренебрегая безразмерными слагаемыми, содержащими h^2/R^2 , получаем систему уравнений движения элемента оболочки в перемещениях

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1-\mu}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{1+\mu}{2}\frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} - \frac{\mu}{R}\frac{\partial w}{\partial x} - \\ &\frac{(1-\mu)h^2}{24R}\frac{\partial^3 w}{\partial x \partial y^2} - \frac{\gamma(1-\mu^2)}{gE_0}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + f_1 = 0, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{1-\mu}{2}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{1+\mu}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} - \frac{1}{R}\frac{\partial w}{\partial y} + \\ &+ \frac{h^2}{12R}\left(\frac{\partial^3 w}{\partial y^3} + \frac{3-\mu}{2}\frac{\partial^3 w}{\partial x^2 \partial y}\right) - \frac{\gamma(1-\mu^2)}{gE_0}\frac{\partial^2 v}{\partial t^2} + f_2 = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} &-\frac{h^2}{12}\nabla^4 w + \frac{\mu}{R}\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{R}\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{1}{R^2}w - \\ &-\frac{h^2}{12R}\left(\frac{\partial^3 v}{\partial y^3} + \frac{3-\mu}{2}\frac{\partial^3 v}{\partial x^2 \partial y} - \frac{1-\mu}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x \partial y^2}\right) - \frac{\gamma(1-\mu^2)}{gE_0}\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + f_3 = 0, \end{aligned} \quad (15)$$

в которых все нелинейные слагаемые сведены в f_1, f_2 , и f_3 . Полученная система отличается от аналогичной системы уравнений движения в классической теории оболочек Кирхгофа – Лява [34] наличием подчеркнутых членов более высоких порядков малости. Их учет при дальнейшем асимптотическом интегрировании, как будет показано ниже, приводит к новому виду разрешающего уравнения.

2. Вывод разрешающего уравнения для нелинейно-вязкоупругой оболочки

Диссипативные эффекты, сопровождающие волновые процессы в оболочках чаще всего учитываются путем введения в уравнения движения дополнительного демпфирующего слагаемого (так называемое «конструкционное демпфирование») [34]. Более строгий учет потерь энергии может быть проведен с использованием различных моделей вязкоупругости [35]. В данной работе используется именно такой подход.

Уравнения движения вязкоупругой оболочки с независимым от времени коэффициентом Пуассона, вязкоупругие свойства которой определяются интегральным оператором $\tilde{E}$, действующим на функцию $f(t)$ по закону

$$\tilde{E}f = Ef - \alpha E \int_{-\infty}^t e^{-\beta(t-\tau)} f(\tau) d\tau, \quad (16)$$

получаются из уравнений движения – элемента нелинейно-упругой оболочки заменой E на $\tilde{E}$. Постоянные α и β в (16), имеющие размерность [время]⁻¹, характеризуют вязкоупругие свойства материала оболочки.

Считая время релаксации β^{-1} много большим в сравнении с периодом сдвиговой волны, разложим $f(t)$ в ряд Маклорена, удерживая два первых члена разложения. Тогда после интегрирования от интегрального оператора можно перейти к приближенному дифференциальному оператору [36]

$$\tilde{E}f \approx \left(1 - \frac{\alpha}{\beta}\right) Ef - \frac{\alpha}{\beta^2} E \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (17)$$

Используя (17), получим из (13)–(15) уравнения движения элемента нелинейно-вязкоупругой оболочки:

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{\alpha}{\beta}\right) \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{1+\mu}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} - \frac{\mu}{R} \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{(1-\mu)h^2}{24R} \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial y^2} + f_1 \right) - \\ & - \frac{\alpha}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{1+\mu}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} - \frac{\mu}{R} \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{(1-\mu)h^2}{24R} \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial y^2} + f_1 \right) - \\ & - \frac{\gamma(1-\mu^2)}{gE_0} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{\alpha}{\beta}\right) \left(\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{1+\mu}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} - \frac{1}{R} \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{h^2}{12R} \left(\frac{\partial^3 w}{\partial y^3} + \frac{3-\mu}{2} \frac{\partial^3 w}{\partial x^2 \partial y} \right) + f_2 \right) - \\ & - \frac{\alpha}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{1+\mu}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} - \frac{1}{R} \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{h^2}{12R} \left(\frac{\partial^3 w}{\partial y^3} + \frac{3-\mu}{2} \frac{\partial^3 w}{\partial x^2 \partial y} \right) + f_2 \right) - \\ & - \frac{\gamma(1-\mu^2)}{gE_0} \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} = 0, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{\alpha}{\beta}\right) \left(-\frac{h^2}{12} \nabla^4 w + \frac{\mu}{R} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{R} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{1}{R^2} w - \frac{h^2}{12R} \left(\frac{\partial^3 v}{\partial y^3} + \frac{3-\mu}{2} \frac{\partial^3 v}{\partial x^2 \partial y} - \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial y^2} \right) + f_3 \right) - \\ & - \frac{\alpha}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{h^2}{12} \nabla^4 w + \frac{\mu}{R} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{R} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{1}{R^2} w - \frac{h^2}{12R} \left(\frac{\partial^3 v}{\partial y^3} + \frac{3-\mu}{2} \frac{\partial^3 v}{\partial x^2 \partial y} - \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial y^2} \right) + f_3 \right) - \\ & - \frac{\gamma(1-\mu^2)}{gE_0} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + f_3 = 0, \end{aligned} \quad (20)$$

Введем в рассмотрение безразмерные независимые и зависимые переменные по формулам:

$$\begin{aligned} X &= \frac{x}{l}, \quad Y = \frac{y}{R}, \quad T = \sqrt{\frac{E_0 g}{\gamma(1-\mu^2)}} \cdot \frac{t}{l}, \\ U &= \frac{u}{R}, \quad V = \frac{v}{R}, \quad W = \frac{w}{h}. \end{aligned} \quad (21)$$

Подстановка (21) в уравнения движения (18)–(20) выявляет в последних малые параметры нелинейности и тонкостенности $\frac{R}{l}$ и $\frac{h}{R}$, которые будем считать величинами одного порядка малости с отношением параметров физической нелинейности:

$$\frac{R}{l} = \frac{h}{R} = \frac{E_0}{m} = \varepsilon. \quad (22)$$

Кроме того, в предположении о большой величине времени релаксации, будем считать

$$\frac{\alpha}{\beta} = \varepsilon^2. \quad (23)$$

Предположение (22) характерно для задач асимптотического анализа длинноволновых возмущений [27–29]. Согласно (22), параметр дисперсии $\frac{h}{l}$ есть величина порядка ε^2 .

Считая, что пучок сдвиговых волн распространяется вдоль образующей оболочки, вводим в рассмотрение новые независимые переменные и разложения зависимых переменных по степеням малого параметра ε :

$$\begin{aligned} \chi &= \varepsilon^2 X, \quad \eta = \varepsilon^2 Y, \quad \tau = T - \frac{X}{C}, \\ U &= \varepsilon^{3/2} U_0 + \varepsilon^{5/2} U_1, \quad V = \varepsilon^{1/2} V_0 + \varepsilon^{5/2} V_1, \quad W = \varepsilon^{3/2} W_0 + \varepsilon^{5/2} W_1. \end{aligned} \quad (24)$$

где C – пока неизвестная скорость распространения возмущения. С учетом (21)–(24), в главном порядке по степеням малого параметра система уравнений (18)–(20) принимает вид

$$\frac{\mu}{C} \frac{\partial W_0}{\partial \tau} + \left(\frac{1}{C^2} - 1 \right) \frac{\partial^2 U_0}{\partial \tau^2} - \frac{(1+\mu)}{2C} \frac{\partial^2 V_0}{\partial \tau \partial \eta} = 0, \quad (25)$$

$$(2C^2 + \mu - 1) \frac{\partial^2 V_0}{\partial \tau^2} = 0, \quad (26)$$

$$\frac{\mu}{C} \frac{\partial U_0}{\partial \tau} + W_0 - \frac{\partial V_0}{\partial \eta} = 0. \quad (27)$$

Из уравнения (26) определяется безразмерная скорость возмущения

$$C = \pm \sqrt{\frac{1-\mu}{2}}. \quad (28)$$

Отметим, что система (25)–(27) и выражение для скорости (28) совпадают с аналогичными выражениями, полученными в нелинейно-упругом случае [37]. Это означает, что вязкостные эффекты проявляются на нелинейной стадии волнового процесса.

Уравнение (19) в первом существенно нелинейном приближении имеет вид

$$\frac{\partial^2 V_0}{\partial \tau^2} - \frac{\partial^2 V_0}{\partial \eta^2} + \sqrt{2-2\mu} \frac{\partial^2 V_0}{\partial \tau \partial \chi} + \frac{1+\mu}{\sqrt{2-2\mu}} \frac{\partial^2 U_0}{\partial \tau \partial \eta} + \frac{\partial W_0}{\partial \eta} + \frac{2}{1-\mu} \left(\frac{\partial V_0}{\partial \tau} \right)^2 \frac{\partial^2 V_0}{\partial \tau^2} + \frac{1}{l\beta} \sqrt{\frac{\varepsilon mg}{\gamma(1-\mu^2)}} \frac{\partial^3 V_0}{\partial \tau^3} = 0. \quad (29)$$

Выражая при помощи (25), (27) слагаемые с функциями U_0 и W_0 через V_0 , придаем уравнению окончательную форму

$$\frac{\partial^2 V_0}{\partial \tau^2} + c_1 \frac{\partial^3 V_0}{\partial \tau^3} + c_2 \frac{\partial^2 V_0}{\partial \tau \partial \chi} + c_3 \frac{\partial^2 V_0}{\partial \eta^2} + c_4 \left(\frac{\partial V_0}{\partial \tau} \right)^2 \frac{\partial^2 V_0}{\partial \tau^2} = 0, \quad (30)$$

где

$$c_1 = \frac{1}{l\beta} \sqrt{\frac{\varepsilon mg}{\gamma(1-\mu^2)}}, \quad c_2 = \sqrt{2-2\mu}, \quad c_3 = \frac{1-\mu}{2(1+2\mu)}, \quad c_4 = \frac{2}{1-\mu}. \quad (31)$$

3. Обсуждение свойств уравнения (30) и построение точных решений

Заменяя переменную τ линейной комбинацией $\tau_1 = \tau - \chi/c_2$, в (30) можно исключить слагаемое со второй производной по времени:

$$\frac{c_1}{c_2} \frac{\partial^3 V_0}{\partial \tau_1^3} + \frac{\partial^2 V_0}{\partial \tau_1 \partial \chi} + \frac{c_3}{c_2} \frac{\partial^2 V_0}{\partial \eta^2} + \frac{c_4}{c_2} \left(\frac{\partial V_0}{\partial \tau_1} \right)^2 \frac{\partial^2 V_0}{\partial \tau_1^2} = 0. \quad (32)$$

Для функции $f = \frac{\partial V_0}{\partial \tau}$, выражение (32) принимает форму модифицированного диссипативного уравнения Хохлова – Заболотской [38]

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial f}{\partial \tau} + c_1 \frac{\partial^2 f}{\partial \tau^2} + c_2 \frac{\partial f}{\partial \chi} + c_4 f^2 \frac{\partial f}{\partial \tau} \right) = -c_3 \frac{\partial^2 f}{\partial \eta^2}, \quad (33)$$

которое, в свою очередь, является частным случаем модифицированного (кубически нелинейного) уравнения Хохлова – Заболотской – Кузнецова или бездисперсионным модифицированным уравнением Кадомцева – Петвиашвили – Бюргерса. На основе уравнения (33) в [39] обсуждался вопрос о безынерционном самовоздействии дифрагирующих пучков в кубически-нелинейных диссипативных средах без дисперсии.

Представляя функцию $V_0(\chi, \eta, \tau_1)$ в виде произведения комплексной амплитуды $B(\chi, \eta)$ на периодическую функцию, зависящую от τ_1 ,

$$V_0(\chi, \eta, \tau_1) = B(\chi, \eta) e^{-i\omega\tau_1} + \text{к.с.}, \quad (34)$$

в главном порядке по экспоненциальной функции для амплитуды $B(\chi, \eta)$ получаем комплексное уравнение Гинзбурга – Ландау [40]

$$i \frac{\partial B}{\partial \chi} + p \frac{\partial^2 B}{\partial \eta^2} + q |B|^2 B = i\gamma B, \quad (35)$$

где

$$p = -\frac{c_3}{\omega c_2}, \quad q = \frac{c_4 \omega^3}{c_2}, \quad \gamma = \frac{c_1 \omega^2}{c_2}. \quad (36)$$

Уравнение, аналогичное (35), ранее возникало при моделировании сдвиговых волн в среде Фойгта [36]. Отметим, что представление уравнение (34) традиционно используется в задачах волновой динамики кубически-нелинейных сред, в которых явление самовоздействия волны существенно преобладает над эффектом генерации высших гармоник.

Несмотря на внешнее сходство (35) с возмущенным НУШ, для построения его точного решения приходится использовать специальные подстановки. Будем следовать подходу [40]. После подстановки

$$B(\chi, \eta) = y(\zeta) e^{i\theta}, \quad (37)$$

где $\zeta = \eta - c\chi$, $\theta = \theta(\zeta, \chi)$, уравнение (35) сводится к системе уравнений для функций Φ , Ψ :

$$2\Phi \frac{d^2 \Phi}{d\zeta^2} - \left(\frac{d\Phi}{d\zeta} \right)^2 + a_2 \Phi \Psi - 4\Psi^2 - a_3 \Phi^2 + a_4 \Phi^3 = 0, \quad (38)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \zeta} - b_1 \frac{d\Phi}{d\zeta} + b_3 \Phi = 0, \quad (39)$$

где $\Phi = y^2$, $\Psi = y^2 z$, $z = \frac{\partial \theta}{\partial \zeta}$ и коэффициенты определены следующим образом:

$$a_2 = \frac{4c}{p}, \quad a_3 = \frac{4\beta}{p}, \quad a_4 = \frac{4q}{p}, \quad b_1 = \frac{c}{2p}, \quad b_3 = -\frac{\gamma}{p}.$$

Авторы [40] отмечают, что несмотря на то, что уравнение является алгебраическим по Ψ , непосредственное его решение относительно Ψ с последующей подстановкой в (39) приводит к чрезвычайно громоздкому и трудно решаемому уравнению. Поэтому они, после проведения пенлеве-анализа, дополняют систему (38), (39) линейным уравнением связи между функциями Φ и Ψ :

$$\Psi = A \frac{d\Phi}{d\zeta} + B\Phi + S, \quad (40)$$

где A , B , S – параметры, подлежащие определению. Подстановка (40) в систему (38), (39) позволяет свести последнюю к нелинейному уравнению

$$f_1 \left(\frac{d\Phi}{d\zeta} \right)^2 + f_2 \Phi \frac{d\Phi}{d\zeta} + f_3 \Phi^3 + f_4 \Phi^2 = 0, \quad (41)$$

где

$$f_1 = (4A^2 + 1), \quad f_2 = (A^2 - 8A)A - 2A + 2, \quad f_3 = Aa_4, \quad f_4 = -(4B^2 - Ba_2 + a_3)A - 2b_3.$$

и считается, что $S = 0$. Решение уравнения (41) имеет полюс 2-го порядка и может быть найдено, в частности, методом гиперболического тангенса. Подстановка анзаца

$$\Phi = d_0 + d_1 \tanh(k\zeta) + d_2 \tanh^2(k\zeta) \quad (42)$$

дает нетривиальные решения при следующих сочетаниях коэффициентов:

$$d_0 = d_2, \quad d_1 = \mp 2d_2, \quad f_3 = -\frac{f_2^2}{16f_1d_2}, \quad f_4 = \frac{f_2^2}{4f_1}, \quad k = \pm \frac{f_2}{8f_1}. \quad (43)$$

Заключение

Установлено, что при моделировании распространения пучка сдвиговых волн вдоль образующей нелинейно-вязкоупругой цилиндрической оболочки возникает квазигиперболическое уравнение с кубической нелинейностью, представляющее собой модификацию диссипативного уравнения Хохлова – Заболотской. Полученное уравнение приводится к бездисперсионному модифицированному уравнению Кадомцева – Петвиашвили – Бюргерса, являющемуся частным случаем модифицированного уравнения Хохлова – Заболотской – Кузнецова. Показано, что вязкостные свойства материала оболочки начинают оказывать влияние на волновой процесс на нелинейной стадии распространения сдвиговой волны. Кубическая нелинейность позволяет преобразовать выведенное уравнение в нелинейное комплексное уравнение Гинзбурга – Ландау, для которого построено точное локализованное решение.

Финансирование

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-29-00071, <https://rscf.ru/project/24-29-00071/>.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

А.И. Землянухин – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, участие в обсуждении результатов.

А.В. Бочкарев – выбор методов исследования, разработка математической модели.

Н.А. Артамонов – разработка математической модели, вывод разрешающего уравнения и построение его точного решения, подготовка текста статьи и участие в обсуждении результатов.

Список литературы

1. Руденко О.В., Сарвазян А.П. Волновая биомеханика скелетной мышцы // Акустический журнал, 2006. Т. 52. № 6. С. 833–846.
2. Руденко О.В. Нелинейные волны: некоторые биомедицинские приложения // Успехи физических наук, 2007. Т. 177. № 4. С. 374–383.
3. Sarvazyan A.P., Rudenko O.V., Swanson S.D., Fowlkes J.B., Emelianov S.Y. Shearwave elasticity imaging: a new ultrasonic technology of medical diagnostics // Ultrasound in medicine & biology, 1998. V. 24(9). P. 1419–1435.
4. R'énier M., Gennisson J.-L., Tanter M., Catheline S., Barrière C., Royer D., Fink M. Nonlinear shear elastic moduli in quasi-incompressible soft solids // Proceedings of the IEEE Ultrasonics Symposium, 2007. P. 554–557.
5. Gennisson J.-L. New parameters in shear wave elastography in vivo // Mécanique pour le vivant. Identification et modélisation du comportement des tissus biologiques humains et animaux. Avancées et perspectives. Colloque National, du 18 au 22 janvier 2016. URL: <https://mecamat.ensma.fr/Aussois/2016/DOCUMENT/TexteGennisson.pdf> [дата обращения 22.05.2025].

6. Андреев В.Г., Дмитриев В.Н., Пищальников Ю.А., Руденко О.В., Сапожников О.А., Сарвазян О.П. Наблюдение сдвиговой волны, возбужденной помощью фокусированного ультразвука в резиноподобной среде // Акустический журнал, 1997. Т. 43(2). С. 149–155.
7. Cormack J.M., Hamilton M.F. Plane nonlinear shear waves in relaxing media // The Journal of the Acoustical Society of America, 2018. V. 143(2). P. 1035–1048.
8. Lindley B.S. Linear and nonlinear shear wave propagation in viscoelastic media. University of North Carolina: Chapel Hill, 2008. 78 p. <https://cdr.lib.unc.edu/downloads/z029p543p>.
9. Rajagopal K.R., Saccomandi G. Shear waves in a class of nonlinear viscoelastic solids // The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics, 2003. V. 56. Iss. 2. P. 311–326. DOI: 10.1093/QJMAM/56.2.311
10. Wochner M.S., Hamilton M.F., Ilinskii Y.A., Zabolotskaya E.A. Cubic nonlinearity in shear wave beams with different polarizations // Journal of the Acoustical Society of America, 2008. V. 123. Iss. 5. P. 2488–2495. DOI: 10.1121/1.2890739.
11. Destrade M., Saccomandi G. Solitary and compact-like shear waves in the bulk of solids // Physical Review E., 2006. V. 73. 065604. Iss. 6. Art. 065604. DOI: 10.1103/PHYSREVE.73.065604
12. Banerjee D., Janaki M. S., Chakrabarti N., Chaudhuri M. Nonlinear shear wave in a non Newtonian visco-elastic medium // Physics of Plasma, 2012. V. 19. Iss. 6. Art. 062301.
13. Destrade M., Goriely A., Saccomandi G. Scalar evolution equations for shear waves in incompressible solids: A simple derivation of the Z, ZK, KZK, and KP equations // Proceedings of the Royal Society A, 2011. V. 467. P. 1823–1834.
14. Доронин А.М., Ерофеев В.И. Генерация второй гармоники сдвиговой волны в упруго-пластической среде. Письма о материалах. 2016. Т. 6. № 2. С. 102–104.
15. Shuvalov A.L., Poncelet O., Kiselev A.P. Shear horizontal waves in transversely inhomogeneous plates // Wave Motion, 2008. V. 45. № 5. P. 605–615.
16. Ерофеев В.И. Распространение нелинейных сдвиговых волн в твердом теле с микроструктурой // Прикладная механика, 1993. Т. 29. № 4. С. 18–22.
17. Ерофеев В.И., Раскин И.Г. О распространении сдвиговых волн в нелинейно-упругом теле // Прикладная механика, 1991. Т. 27. № 1. С. 127–129.
18. Потапов А.И., Солдатов И.Н. Квазиоптическое приближение для пучка сдвиговых волн в наследственной среде // Прикладная механика и техническая физика, 1986. № 1. С. 144–147.
19. Кившарь Ю.С., Сыркин Е.С. Сдвиговые солитоны в упругой пластине // Акустический журнал, 1991. Т. 37(1). С. 104–109.
20. Ерофеев В.И., Шешенина О.А. Нелинейные продольные и сдвиговые стационарные волны деформации в градиентно-упругой среде // Математическое моделирование систем и процессов, 2007. № 15. С. 15–27.
21. Ерофеев В.И., Колесов Д.А., Сандалов В.М. Демодуляция сдвиговой волны в нелинейной пластине, лежащей на упругом основании, параметры которого изменяются по закону бегущей волны // Проблемы прочности и пластичности, 2013. Т. 75(4). С. 268–272.
22. Богданов А.Н., Скворцов А.Т. Нелинейные сдвиговые волны в зернистой среде // Акустический журнал, 1992. Т. 38(3). С. 408–412.
23. Быков В.Г. Уединенные сдвиговые волны в зернистой среде // Акустический журнал, 1999. Т. 45(2). С. 169–173.
24. Ерофеев В.И., Шарабанова А.В. Сдвиговые волны Римана в материале, свойства которого зависят от вида напряженного состояния // Проблемы машиностроения и надежности машин, 2004. № 1. С. 20–23.
25. Ерофеев В.И., Кажаяев В.В., Семерикова Н.П. Волны в стержнях. Дисперсия. Диссипация. Нелинейность. Москва: Физматлит, 2002. 208 с.
26. Kaplunov J.D., Kossovich L.Yu., Nolde E.V. Dynamics of thin walled elastic bodies. San Diego: Academic Press, 1998. 226 p.
27. Zemlyanukhin A.I., Bochkarev A.V., Mogilevich L.I., Andrianov I.V. The generalized Schamel equation in nonlinear wave dynamics of cylindrical shells // Nonlinear Dynamics, 2019. V. 98(1). P. 185–194.
28. Zemlyanukhin A.I., Bochkarev A.V., Andrianov I.V., Erofeev V.I. The Schamel-Ostrovsky equation in nonlinear wave dynamics of cylindrical shells // Journal of Sound and Vibration, 2021. V. 491. Art. 115752. DOI: 10.1016/J.JSV.2020.115752.
29. Zemlyanukhin A.I., Bochkarev A.V., Artamonov N.A. Physically admissible and inadmissible exact localized solutions in problems of nonlinear wave dynamics of cylindrical shells // Russian Journal of Nonlinear Dynamics, 2024. Т. 20. № 2. С. 219–229.
30. Землянухин А.И., Бочкарев А.В. Осесимметричные нелинейные модулированные волны в цилиндрической оболочке // Акустический журнал, 2018. Т. 64(4). С. 417–423.
31. Yamaki N. Elastic stability of circular cylindrical shells // North-Holland Series in Applied Mathematics and Mechanics, V. 27. Amsterdam: North-Holland, 1984.
32. Amabili M. A comparison of shell theories for large-amplitude vibrations of circular cylindrical shells: Lagrangian approach // Journal of Sound and Vibration, 2003. V. 264(5). P. 1091–1125.
33. Лукаш П.А. Основы нелинейной строительной механики. М.: Стройиздат, 1978. 204 с.
34. Вольмир А.С. Нелинейная динамика пластинок и оболочек. М.: Наука, 1972. 432 с.

35. Москвитин В.В. Сопротивление вязко – упругих материалов. М.: Наука, 1972. 328 с.
36. Потапов А.И. Нелинейные волны деформации в стержнях и пластинах. Горький.: Изд.-во Горьковского университета, 1985. 108 с.
37. Землянухин А.И., Бочкарев А.В., Артамонов Н.А. Сдвиговые волны в нелинейно-упругой цилиндрической оболочке // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика, 2024. Т. 24(4). С. 578–586.
38. Руденко О.В. К 40-летию уравнения Хохлова – Заболотской // Акустический журнал, 2010. Т. 56(4). С. 452–462.
39. Руденко О.В., Сухоруков А.А. Дифрагирующие пучки в кубично – нелинейных средах без дисперсии // Акустический журнал, 1995. Т. 41(5). С. 822–827.
40. Porubov A.V., Velarde M.G. Exact periodic solutions of the complex Ginzburg–Landau equation // J. Math. Phys., 1999. V. 40. P. 884–896.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 5, pp. 379–392

Shear waves in a nonlinear viscoelastic cylindrical shell

A. I. Zemlyanukhin , A. V. Bochkarev , N. A. Artamonov 

Yuri Gagarin State Technical University of Saratov, Saratov, 410054, Russia

 azemlyanukhin@mail.ru

 ab2009sar@list.ru

 twostvoll@gmail.com

Received July 28, 2025; revised August 23, 2025; accepted August 28, 2025

The propagation of a beam of shear waves along the generatrix of a nonlinear viscoelastic cylindrical shell of the Sanders–Koiter model is simulated by asymptotic integration methods. It is assumed that the shell is made of a material characterized by a cubic dependence between stress and strain intensities, the dimensionless parameters of wall thinness and physical nonlinearity are quantities of the same order of smallness, and the ratio of viscoelastic constants is a dimensionless parameter of a higher order of smallness. A variation of the multiscale expansion method is used, which makes it possible to determine the wave propagation velocity from the linear approximation equations and, in the first essentially nonlinear approximation, to obtain a resolving nonlinear quasi-hyperbolic equation for the leading term of the expansion of the shear component of the displacement. The derived equation is a cubic nonlinear modification of the dispersionless Kadomtsev–Petviashvili–Burgers equation, being a special case of the modified Khokhlov–Zabolotskaya–Kuznetsov equation. The solution of the derived equation is sought in the form of one harmonic with a slowly changing complex amplitude, since in deformable media with cubic nonlinearity the effect of wave self-action significantly prevails over the effect of higher harmonic generation. As a result, the Ginzburg–Landau equation is obtained for the complex amplitude, for which an exact physically consistent solution is constructed.

Keywords: nonlinear viscoelastic cylindrical shell, shear waves, asymptotic integration, Ginzburg–Landau equation.

References

1. Rudenko O., Sarvazyan A. Volnovaya biomekhanika skeletnoj myshcy [Wave biomechanics of skeletal muscle]. Akusticheskij zhurnal. 2006. Vol. 52. № 6. Pp. 833–846 (in Russian).
2. Rudenko O.V. Nelinejnye volny: nekotorye biomedicinskie prilozheniya [Nonlinear waves: some biomedical applications]. Uspekhi fizicheskikh nauk, 2007, Vol. 177. № 4. Pp. 374–383 (in Russian).
3. Sarvazyan A.P., Rudenko O.V., Swanson S.D., Fowlkes J.B., Emelianov S.Y. Shear wave elasticity imaging: a new ultrasonic technology of medical diagnostics. Ultrasound in medicine & biology. 1998. Vol. 24(9). Pp. 1419–1435.

4. *R'enier M., Gennisson J.-L., Tanter M., Catheline S., Barri`ere C., Royer D., Fink M.* Nonlinear shear elastic moduli in quasi-incompressible soft solids. *Proceedings of the IEEE Ultrasonics Symposium*, 2007. Pp. 554–557.
5. *Gennisson J.-L.* New parameters in shear wave elastography in vivo. *M'ecanique pour le vivant. Identification et mod'elisation du comportement des tissus biologiques humains et animaux. Avanc'ees et perspectives. Colloque National*, du 18 au 22 janvier 2016. Available at: <https://mecamat.ensma.fr/Aussois/2016/DOCUMENT/TexteGenisson.pdf> (accessed 22.05.2025).
6. *Andreev V., Dmitriev V., Pishchalnikov Yu., Rudenko O., Sapozhnikov O., Sarvazyan A.* Nablyudenie sdvigovoy volny, vzbuzhdennojs pomoshch'yu fokusirovannogo ul'trazvuka v rezinopodobnoj srede [Observation of shear waves excited by focused ultrasound in a rubber-like medium]. *Akusticheskij zhurnal*, 1997. Vol. 43. Iss. 2. Pp. 149–155 (in Russian).
7. *Cormack J.M., Hamilton M.F.* Plane nonlinear shear waves in relaxing media. *The Journal of the Acoustical Society of America*. 2018. Vol. 143(2). Pp. 1035–1048.
8. *Lindley B.S.* Linear and nonlinear shear wave propagation in viscoelastic media. University of North Carolina: Chapel Hill, 2008. 78 p. <https://cdr.lib.unc.edu/downloads/z029p543p>.
9. *Rajagopal K.R., Saccomandi G.* Shear waves in a class of nonlinear viscoelastic solids. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 2003. Vol. 56. Iss.2. Pp. 311–326. DOI: 10.1093/QJMAM/56.2.311.
10. *Wochner M.S., Hamilton M.F., Ilinskii Y.A., Zabolotskaya E. A.* Cubic nonlinearity in shear wave beams with different polarizations. *Journal of the Acoustical Society of America*, 2008. Vol. 123. Iss. 5. Pp. 2488–2495. DOI: 10.1121/1.2890739.
11. *Destrade M., Saccomandi G.* Solitary and compact-like shear waves in the bulk of solids // *Physical Review E.*, 2006. Vol. 73. Iss. 6. Art. 065604. DOI: 10.1103/PHYSREVE.73.065604.
12. *Banerjee D., Janaki M. S., Chakrabarti N., Chaudhuri M.* Nonlinear shear wave in a non Newtonian visco-elastic medium. *Physics of Plasma*, 2012. Vol. 19. Iss.6. Art. 062301.
13. *Destrade M., Goriely A., Saccomandi G.* Scalar evolution equations for shear waves in incompressible solids: A simple derivation of the Z, ZK, KZK, and KP equations. *Proceedings of the Royal Society A*, 2011. Vol. 467. Pp. 1823–1834.
14. *Doronin A.M., Erofeev V.I.* Generaciya vtoroj garmoniki sdvigovoy volny v uprugoplasticheskoj srede [A generation of second harmonic of shear wave in elastoplastic media]. *Pis'ma o materialah*, 2016. Vol. 6. Iss. 2. Pp. 102–104. DOI: 10.22226/2410-3535-2016-2-102-104 (in Russian).
15. *Shuvalov A.L., Poncelet O., Kiselev A.P.* Shear horizontal waves in transversely inhomogeneous plates. *Wave Motion*, 2008. Vol. 45. No. 5. Pp. 605–615.
16. *Erofeev V.I.* Rasprostranenie nelinejnyh sdvigovyh voln v tverdom tele s mikrostrukturou [Propagation of nonlinear shear waves in a solid with microstructure]. *Prikladnaya mekhanika*, 1993. Vol. 29. No. 4. Pp. 18–22 (in Russian).
17. *Erofeev V.I., Raskin I.G.* O rasprostranении sdvigovyh voln v nelinejno-uprugom tele [Propagation of sound shear waves in the nonlinear elastic solids]. *Prikladnaya mekhanika*, 1991. Vol. 27. No. 1. Pp. 127–129 (in Russian).
18. *Potapov A.I., Soldatov I.N.* Kvaziopticheskoe priblizhenie dlya puchka sdvigovyh voln v nasledstvennoj srede. [Quasi-optical approximation for a beam of shear waves in a nonlinear medium with memory]. *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika*, 1986. No. 1. Pp. 144–147 (in Russian).
19. *Kivshar Yu.S., Syrkin E.S.* Sdvigovye solitony v uprugoj plastine [Shear solitons in an elastic plate]. *Akusticheskij zhurnal*, 1991. Vol. 37(1), Pp. 104–109 (in Russian).
20. *Erofeev V.I., Sheshenima O.A.* Nelinejnye prodol'nye i sdvigovye stacionarnye volny deformacii v gradientno-uprugoj srede [Nonlinear longitudinal and shear stationary deformation waves in a gradient-elastic medium]. *Matematicheskoe modelirovanie sistem i protsessov*, 2007. No. 15. Pp. 15–27 (in Russian).
21. *Erofeev V.I., Kolesov D.A., Sandalov V.M.* Demodulyaciya sdvigovoy volny v nelinejnoj plastine, lezhashchej na uprugom osnovanii, parametry kotorogo izmenyayutsya po zakonu begushchej volny [Demodulation of a shear wave in a nonlinear plate lying on an elastic base, the parameters of which vary according to the law of traveling waves]. *Problemy prochnosti i plastichnosti*, 2013. Vol. 75(4). Pp. 268–272 (in Russian).
22. *Bogdanov A.N., Skvortsov A.T.* Nelinejnye sdvigovye volny v zernistoj srede [Nonlinear shear waves in granular medium]. *Akusticheskij zhurnal*, 1992. Vol. 38. No. 3. Pp. 408–412 (in Russian).
23. *Bykov V.G.* Uedinennye sdvigovye volny v zernistoj srede [Solitary shear waves in a granular medium]. *Akusticheskij zhurnal*, 1999. Vol. 45. No. 2. Pp. 169–173 (in Russian).
24. *Erofeev V.I., Sharabanova A.V.* Sdvigovye volny Rimana v materiale, svoystva kotorogo zavisyat ot vida napryazhennoego sostoyaniya [Riemann shear waves in a material whose properties depend on the type of stress state]. *Problemy mashinostroeniya i nadejnosti mashin*. 2004. No. 1. Pp. 20–23 (in Russian).
25. *Erofeev V.I., Kajaev V.V., Semerikova N.P.* Volny v sterzhnyah. Dispersiya. Dissipaciya. Nelinejnost'. [Waves in rods. Dispersion. Dissipation. Nonlinearity]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2002. 208 p.
26. *Kaplanov J.D., Kossovich L. Yu., Nolde E.V.* Dynamics of thin walled elastic bodies. San Diego, Academic Press, 1998. 226 p.
27. *Zemlyanukhin A.I., Bochkarev A.V., Mogilevich L.I., Andrianov I.V.* The generalized Schamel equation in nonlinear wave dynamics of cylindrical shells. *Nonlinear Dynamics*, 2019. Vol. 98. No. 1. Pp. 185–194.
28. *Zemlyanukhin A.I., Bochkarev A.V., Andrianov I.V., Erofeev V.I.* The Schamel-Ostrovsky equation in nonlinear wave dynamics of cylindrical shells. *Journal of Sound and Vibration*, 2021. Vol. 491. Art. 115752. DOI: 10.1016/J.JSV.2020.115752.

29. *Zemlyanukhin A.I., Bochkarev A.V., Artamonov N.A.* Physically admissible and inadmissible exact localized solutions in problems of nonlinear wave dynamics of cylindrical shells. *Russian Journal of Nonlinear Dynamics*. 2024. Vol. 20. No. 2. Pp. 219–229.
30. *Zemlyanukhin A.I., Bochkarev A.V.* Osesimmetrichnye nelinejnye modulirovannye volny v cilindricheskoj obolochke [Axisymmetric nonlinear modulated waves in a cylindrical shell]. *Akusticheskij zhurnal*, 2018. Vol. 64(4). Pp. 417–423 (in Russian).
31. *Yamaki N.* Elastic stability of circular cylindrical shells. North-Holland Series in Applied Mathematics and Mechanics. Vol. 27. Amsterdam, North-Holland, 1984.
32. *Amabili M.* A comparison of shell theories for large-amplitude vibrations of circular cylindrical shells: Lagrangian approach. *Journal of Sound and Vibration*, 2003. Vol. 264. No. 5. Pp. 1091–1125.
33. *Lukash P.A.* Osnovy nelinejnoj stroitel'noj mekhaniki [Fundamentals of nonlinear structural mechanics]. Moscow, Stroyizdat Publ., 1978. 204 p. (in Russian).
34. *Volmir A.* Nelinejnaya dinamika plastinok i obolochek [The nonlinear dynamics of plates and shells]. Moscow, Nauka Publ., 1972. 432 p.
35. *Moskvitin V.V.* Soprotivlenie vyazko – uprugih materialov [Resistance of viscoelastic materials]. Moscow, Nauka Publ., 1972. 328 p. (in Russian).
36. *Potapov A.I.* Nelinejnye volny deformacii v sterzhnyah i plastinah [Nonlinear strain waves in rods and plates]. Gorkiy, Publ. of Gorkiy State Univ., 1985. 108 p. (in Russian).
37. *Zemlyanukhin A.I., Bochkarev A.V., Artamonov N.A.* Sdvigovye volny v nelinejno-uprugoj cilindricheskoj obolochke. [Shear waves in a nonlinear elastic cylindrical shell]. *Izvestiya Saratovskogo universiteta. Novaya seriya. Seriya: Matematika. Mekhanika. Informatika*, 2024. Vol. 24(4). Pp. 578–586 (in Russian).
38. *Rudenko O.V.* K 40-letiyu uravneniya Hohlova–Zabolotskoj [The 40th anniversary of the Khokhlov-Zabolotskaya equation]. *Akusticheskij zhurnal*, 2010. Vol. 56. Pp. 457–466 (in Russian).
39. *Rudenko O.V., Sukhorukov A.A.* Difragiruyushchie puchki v kubichno – nelinejnyh sredah bez dispersii [Diffracting beams in nondispersive media with cubic profile]. *Akusticheskij zhurnal*, 1995. Vol. 41(5). Pp. 725–730 (in Russian).
40. *Porubov A.V., Velarde M.G.* Exact periodic solutions of the complex Ginzburg–Landau equation. *Journal of Mathematical Physics*, 1999. Vol. 40. Pp. 884–896.

УДК 621.039.5

Математическое моделирование и оптимизация дожигания топлива при выводе из эксплуатации реактора РБМК

© 2025 г. А. М. Загребаяев, Г. А. Литвинова, А. С. Ястребов

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

Для АЭС с реакторами типа РБМК ставится и решается физическая задача о выборе временного сдвига между остановами энергоблоков с целью максимального использования энергоресурса топлива реакторов, выводимых из эксплуатации. В основу математической модели при решении оптимизационной задачи положена точечная модель динамики распределения тепловыделяющей сборки (ТВС) по энерговыработкам (спектра ТВС), позволяющая прогнозировать изменение спектра ТВС во времени в работающем реакторе в зависимости от тактики подгрузки выгоревших ТВС из остановленного реактора. Показано, что оптимальное планирование сдвига между остановами энергоблоков позволяет сэкономить сотни «свежих ТВС» в зависимости от выбранной стратегии дожигания топлива. В работе исследуется сценарий, при котором один из реакторов остановлен, а второй продолжает работу в течение ограниченного времени. Изучается возможность подгрузки топлива из первого реактора во второй с целью минимизации общего расхода свежих ТВС. Предлагаемый подход учитывает как физические, так и технологические ограничения. Приведены результаты численного моделирования, демонстрирующие эффективность предложенного алгоритма перераспределения топлива. Полученные данные могут быть использованы при планировании вывода энергоблоков из эксплуатации с целью повышения топливной эффективности и снижения затрат на закупку свежих ТВС.

Ключевые слова: дожигание топлива, РБМК, тепловыделяющая сборка, вывод из эксплуатации, оптимизация, энергоресурс, перегрузка, межреакторное использование топлива, математическая модель.

Введение

Характерной особенностью реакторов РБМК является непрерывная перегрузка топлива. Обычно за сутки перегружается одна-две тепловыделяющие сборки: наиболее выгоревшее топливо заменяется свежим [1].

При этом за время эксплуатации формируется определенный спектр ТВС по энерговыработкам, в котором присутствуют как мало, так и сильно выгоревшие ТВС. На рис. 1. показано распределение ТВС по энерговыработке для одного из энергоблоков Курской АЭС. Таким образом, при останове реактора остается не выработанный энергоресурс тепловыделяющих сборок и возникает возможность использовать его в других еще работающих энергоблоках¹ [2–5]. (Отметим также, что помимо оптимального использования энергоресурса рассматриваются в литературе и задачи по оптимальному использованию ресурса по наработке приборов и оборудования реакторов, выводимых из эксплуатации [6]). Возможны различные постановки задач по использованию энергоресурса ТВС при выводе реактора

¹ Вопросы управления жизненным циклом АЭС. [Электронный ресурс] URL: <https://energypolicy.ru/voprosy-upravleniyazhiznennym-ciklom-aes/energetika/2023/19/24/> (дата обращения: 30.05.24).

✉ А. С. Ястребов: yastrebovstuff@gmail.com

Поступила в редакцию: 31.07.2025

После доработки: 14.08.2025

Принята к публикации: 09.09.2025

EDN GCYQRI

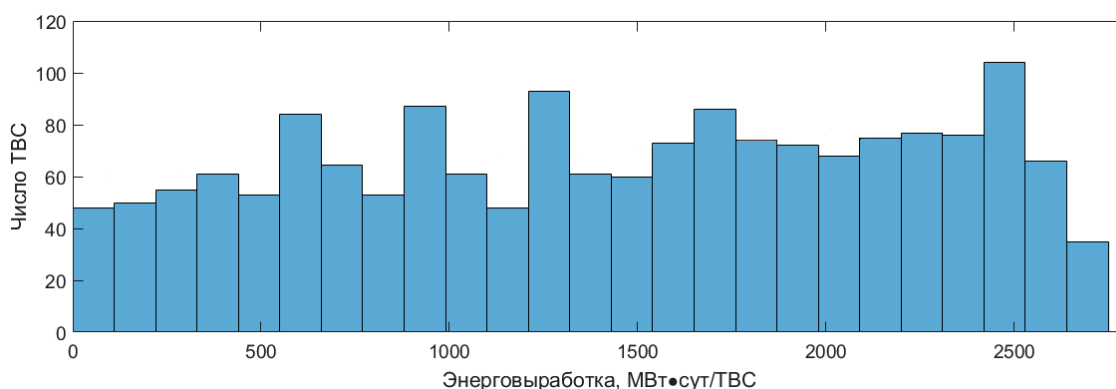


Рис. 1. Распределение спектра ТВС по энерговыработке

из эксплуатации. Например, в работе [7] предлагается продлить работу выводимого из эксплуатации реактора без подпитки топливом за счет пространственного перераспределения ТВС по активной зоне. Рассматривались две стратегии перестановок ТВС.

Удаление выгоревших ТВС и смещение невыгоревших ТВС к центру активной зоны.

Создание двух зон. В центральной зоне мало выгоревшие ТВС, а в периферийной – выгоревшие.

И в том, и в другом случае обеспечивалась критичность реактора, но мощность постепенно падала. Получено, что реактор с выгрузкой может после прекращения подпитки топливом выработать еще ~ 170 ГВт·сут тепловой энергии до полной потери критичности, при этом, однако, его мощность снижается до 25 % номинальной. Невыработанный ресурс – число ТВС, оставшихся в активной зоне, которые могли бы быть использованы, после останова реактора составит 366 в пересчете на свежее топливо. Это на 48 % меньше, чем если бы реактор просто был остановлен. При использовании двухзонной загрузки реактор может выработать до 400 ГВт·сут энергии до полной потери критичности, однако к моменту его останова мощность снижается до 14 % номинальной. Количество невыработанного ресурса уменьшается до 311 свежих ТВС, что на 56 % меньше, чем в случае простого останова.

Указанные оценки являются предельными до полного исчерпания запаса реактивности и получены на основе упрощенной модели реактора типа РБМК с линейной зависимостью мощности и коэффициента размножения.

В работе [8] исследовалась возможность оптимизации использования энергоресурса топлива в целом для АЭС, состоящей из четырех энергоблоков. Рассматривались различные варианты дожигания топлива при последовательном выводе энергоблоков из эксплуатации. Задача решалась в «точечном» по пространству приближении. Учитывались как физические (например, на величину парового коэффициента реактивности), так и технологические (время выдержки в бассейне) ограничения, связанные с возможностью повторного использования топлива. Приведены результаты расчетов для Ленинградской, Курской и Смоленской АЭС. Эффект экономии свежих ТВС при оптимальном режиме для ЛАЭС, КуАЭС и САЭС, соответственно, составил 1400, 1416 и 1186 тепловыделяющих сборок.

В данной работе ставится и решается задача об оптимальном дожигании топлива из остановленного реактора в последнем из действующих реакторов, выводимых из эксплуатации. Отличие от рассмотренных выше постановок и подходов к решению оптимизационных задач заключается в следующем. Если в работе [2] рассматривается реактор, выводимый из эксплуатации без подпитки топливом, то в данной работе в реакторе дожигается топливо из остановленного реактора и при расчетах используется математическая модель динамики спектра в дискретном варианте.

Таким образом, рассматривается следующая постановка оптимизационной задачи.

Энергосистема состоит из двух реакторов типа РБМК: один из них остановлен, останов второго реактора планируется через время T . В остановленном реакторе остались ТВС всего спектра выгорания, и они могут быть использованы во втором реакторе. Требуется найти такую перегрузку топлива из остановленного реактора в работающий, чтобы к моменту останова второго реактора энергоресурс системы и суммарная подпитка свежим топливом были минимальны.

Математическая постановка задачи

Пусть $n(E, t)$ – спектр ТВС работающего реактора в момент времени t ; $n_{\text{ост}}(E, t)$ – спектр ТВС остановленного реактора в момент времени t ; T – планируемое время останова работающего реактора; $F(E, t)$ – функция перегрузки топлива из остановленного реактора в работающий; $q(t)$ – подпитка топливом работающего реактора для поддержания критичности в момент времени t ; E_m – максимальная возможная по технологическим причинам энерговыработка выгружаемой ТВС. Остаточный ресурс реактора в пересчете на свежие ТВС можно найти следующим образом:

$$R(T) = \int_0^{E_m} \frac{E_m - E}{E_m} n(E, T) dE. \quad (1)$$

Общая подпитка за период времени T составляет:

$$Q(T) = \int_0^T q(t) dt. \quad (2)$$

Тогда функционал, который необходимо минимизировать, выражается в числе свежих ТВС и записывается следующим образом:

$$f(T) = \int_0^{E_m} \frac{E_m - E}{E_m} n_{\text{ост}}(E, T) dE + \int_0^{E_m} \frac{E_m - E}{E_m} n(E, T) dE + \int_0^T q(t) dt. \quad (3)$$

Основное уравнение, описывающее взаимодействие двух реакторов:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{-\partial n}{\partial E} (W_0 - BE) + Bn(E, t) + F(E, t) + q(t). \quad (4)$$

При этом на систему наложены следующие ограничения на критичность, размер активной зоны и перегрузку топлива:

$$\begin{cases} K_{\min} \leq K_{\text{эф}} \leq K_{\max} \quad \forall t \in [0, T]; \\ \int_0^{E_m} n(E, t) dE \leq N_{\max} \quad \forall t \in [0, T]; \\ 0 \leq F(E, t) \leq n_{\text{ост}}(E, t) \quad \forall t \in [0, T]. \end{cases} \quad (5)$$

Рассмотрим ограничение на эффективный коэффициент размножения для бесконечного цилиндрического гомогенного реактора без учета аксиальной утечки. Условие критичности такого реактора в момент времени t :

$$\frac{\bar{K}_{\infty}(t) / K_{\text{эф}} - 1}{M^2} = \left(\frac{2.405}{R(t)} \right)^2, \quad (6)$$

где $\bar{K}_{\infty}(t)$ – коэффициент размножения в бесконечной среде; $R(t)$ – радиус АЗ реактора в момент времени t .

В условиях введенной математической модели спектра ТВС:

$$\bar{K}_{\infty}(t) = \int_0^{E_m} (K_0 - AE) n(E, t) dE \bigg/ \int_0^{E_m} n(E, t) dE. \quad (7)$$

Размер АЗ можно описать следующим соотношением (площадь АЗ равна произведению числа ТВС в ней на размер одной ТВС):

$$\pi R^2(t) = a^2 \int_0^{E_m} n(E, t) dE. \quad (8)$$

Таким образом, для бесконечного цилиндрического реактора получим ограничение:

$$K_{\text{эф}}(t) = \bar{K}_{\infty}(t) / \left(1 + \left(\frac{M2.405}{R(t)} \right)^2 \right), \quad (9)$$

$$K_{\min} \leq K_{\text{эф}}(t) \leq K_{\max}. \quad (10)$$

Варьируя $K_{\min}$, можно заложить аксиальную утечку и задавать оперативный запас реактивности. Итак, математически постановка задачи выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \min_{F(E, t)} \left(\int_0^{E_m} \frac{E_m - E}{E_m} n_{\text{ост}}(E, T) dE + \int_0^{E_m} \frac{E_m - E}{E_m} n(E, T) dE + \int_0^T q(t) dt \right); \\ \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{-\partial n}{\partial E} (W_0 - BE) + Bn(E, t) + F(E, t) + q(t); \\ K_{\min} \leq K_{\text{эф}} \leq K_{\max} \quad \forall t \in [0, T]; \\ \int_0^{E_m} n(E, t) dE \leq N_{\max} \quad \forall t \in [0, T]; \\ 0 \leq F(E, t) \leq n_{\text{ост}}(E, t) \quad \forall t \in [0, T]; \\ n(E, 0) = n_{\text{ост}}(E, 0) = \frac{q_0}{W_0 - BE}. \end{cases} \quad (11)$$

Для упрощения поиска минимума предлагается искать оптимальный способ перегрузки $F(E, t)$ среди ограниченного множества стратегий. Данную систему предлагается решать численными методами, записав уравнения и ограничения в разностном виде.

Численное решение задачи нелинейного программирования

Введем сетку $M \times N$ с шагом ΔE по энергосодержанию ($j \in [0, M]$, $M = E_m/\Delta E$) и Δt по времени ($i \in [0, N]$, $N = T/\Delta t$). Запишем уравнение выгорания топлива в разностной форме, используя шаблон на рис. 2:

$$\frac{n^{i+1, j} - n^{i, j}}{\Delta t} = (W_0 - Bj\Delta E) - \left(\frac{n^{i, j} - n^{i, j-1}}{\Delta E} \right) + Bn^{i, j}, \quad i \in [0, N-1], j \in [1, M]. \quad (12)$$

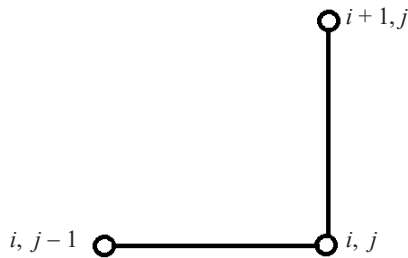


Рис. 2. Шаблон явной схемы

Отсюда можно выразить множество точек спектра на $(i + 1)$ -м слое по времени:

$$n^{i+1,j} = n^{i,j} + \frac{\Delta t}{\Delta E} (W_0 - Bj\Delta E)(n^{i,j} - n^{i,j-1}) + B\Delta t n^{i,j}. \quad (13)$$

Определим теперь изменения спектра вставке ТВС. Пусть вставляется ТВС с энерговыработкой от E_1 до E_2 . Полагаем, что вставка – равномерная. Тогда

$$F^{i,j} = \frac{n}{(j_2 - j_1) \cdot E}. \quad (14)$$

Подпитку свежим топливом q^i можно моделировать с помощью «вставки» топлива с энерговыработкой $[0, \Delta E]$.

Для моделирования перегрузки и подпитки сделаем допущение: положим, что подпитка и перегрузка топлива являются моментальной процедурой, не меняющей спектр в динамике. Тогда, если в момент времени t происходит подпитка и перегрузка, то точки спектра на $i + 1$ слое:

$$n^{i+1,j} = n^{i,j} + \frac{\Delta t}{\Delta E} (W_0 - Bj\Delta E)(n^{i,j} - n^{i,j-1}) + B\Delta t n^{i,j} + F^{i,j} + q^i. \quad (15)$$

Запишем в разностной форме минимизируемый функционал:

$$f(T) = \sum_{j=0}^M \frac{E_m - j\Delta E}{E_m} n^{N,j} \Delta E + \sum_{j=0}^M \frac{E_m - j\Delta E}{E_m} n_{\text{ост}}^{N,j} \Delta E + \sum_{i=0}^N q^i. \quad (16)$$

Запишем также выражения для числа ТВС и эффективного коэффициента размножения:

$$N^i = \Delta E \sum_{j=0}^M n^{i,j}, \quad (17)$$

$$K_{\text{эф}}^i = \bar{K}_{\infty}^i / \left(1 + \left(\frac{M 2.405}{R^i} \right)^2 \right), \quad (18)$$

$$\bar{K}_{\infty}^i = \sum_{j=0}^M (K_0 - Aj\Delta E) n^{i,j} / \sum_{j=0}^M n^{i,j}, \quad (19)$$

$$\pi(R^i)^2 = a^2 \Delta E \sum_{j=0}^M n^{i,j}. \quad (20)$$

Итак, в дискретном виде задача ставится следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_F \left(\sum_{j=0}^M \frac{E_m - j\Delta E}{E_m} n^{N,j} \Delta E + \sum_{j=0}^M \frac{E_m - j\Delta E}{E_m} n_{\text{ост}}^{N,j} \Delta E + \sum_{i=0}^N q^i \right); \\ n^{i+1,j} = n^{i,j} + \frac{\Delta t}{\Delta E} (W_0 - Bj\Delta E)(n^{i,j} - n^{i,j-1}) + B\Delta t n^{i,j} + F^{i,j} + q^i; \\ K_{\min} \leq K_{\text{эф}}^i \leq K_{\max} \quad \forall i \in [0, N]; \\ N^i \leq N_{\max} \quad \forall i \in [0, N]; \\ 0 \leq F^{i,j} \leq n_{\text{ост}}^{i,j}; \\ n_{\text{ост}}^{0,j} = n_{\text{ост}}^{0,j} = q_0 / (W_0 - Bj\Delta E). \end{array} \right. \quad (21)$$

Решение предлагается находить из ограниченного множества стратегий перегрузки. В данной работе рассматриваются две стратегии.

1. Каждые сутки из остановленного реактора в работающий переставляется n ТВС с энергоснабжением $[E_{\min}; E_{\min} + \delta E]$, где $E_{\min}$ – минимальное значение энергоснабжения топлива, оставшегося в реакторе; δE – выбранный разброс энергоснабжения (стратегия «от свежего к выгоревшему»).

2. Каждые сутки из остановленного реактора поочередно переставляется n ТВС с энергоснабжением либо $[E_{\min}; E_{\min} + \delta E]$, либо $[E_{\text{сред}} - \delta E/2; E_{\text{сред}} + \delta E/2]$, где $E_{\min}$ – минимальное значение энергоснабжения топлива, оставшегося в реакторе, а $E_{\text{сред}} = \frac{E_{\min} + E_m}{2}$ – середина спектра (стратегия «переменная перегрузка»).

Предлагается следующий алгоритм для моделирования:

- 1) раз в сутки происходит перестановка ТВС из остановленного реактора в работающий согласно выбранной стратегии;
- 2) если критичности реактора не хватает, вставляется свежее топливо;
- 3) если число ТВС в АЗ превышено, а условие критичности не выполняется, из работающего реактора выгружается наиболее выгоревшее топливо;
- 4) до следующих суток перегрузки не происходит.

Исследование различных стратегий перегрузки топлива

На рис. 3 показана зависимость остаточного энергоресурса топлива от планируемого времени останова действующего реактора при различных стратегиях перегрузки. Из рисунка видно, что оптимальным является останов реактора примерно через 400–500 сут. после останова предыдущего блока. При этом перегружается ежедневно две ТВС, и стратегия перегрузки («от свежего к выгоревшему» или «переменная перегрузка») дает приблизительно одинаковые результаты.

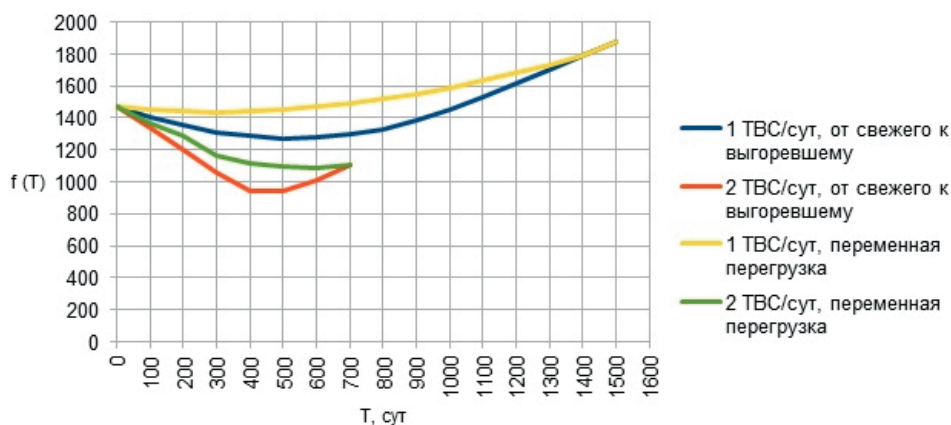


Рис. 3. Зависимость значения оптимизируемого функционала от времени останова работающего реактора при различных стратегиях перегрузки

Характер приведенных зависимостей отражает физический факт того, что сначала значение остаточного ресурса в системе убывает за счет дожигания топлива из остановленного реактора в работающем. При этом за счет использования наименее выгоревшего топлива из остановленного реактора работающий реактор сохраняет свою критичность без подпитки свежим топливом. Далее, когда мало выгоревшее топливо в остановленном реакторе заканчивается, возрастает потребность в подпитке свежим топливом. Полученный результат в целом совпадает с выводами об оптимальном дожигании топлива в РБМК, изложенными в работе [1]. А именно, если планировать перегрузку через 600 эффективных суток, то экономится 400 свежих ТВС, и можно обойтись без подпитки свежим топливом.

Таким образом, поставлена и решена задача оптимизации режима дожигания топлива остановленного реактора в работающем для минимизации подпитки и остаточного энергоресурса в системе. Исследованы различные способы перегрузки топлива, для каждого из них найдено оптимальное время останова работающего реактора. Вместе с тем понятно, что при реальном планировании времени останова энергоблока помимо физических соображений должны учитываться ограничения технологического и иного характера. Поэтому приведенные результаты имеют принципиальный характер и позволяют оценить потери при отходе от физически оптимального решения.

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

А.М. Загребаев – разработка математической модели; формулировка идеи и целей исследования; постановка задачи; выбор методов исследования; подбор литературных источников.

Г.А. Литвинова – анализ нормативной базы; постановка эксперимента; разработка концепции исследования.

А.С. Ястребов – анализ нормативной базы; выполнение экспериментальных работ; обработка результатов; проведение численных расчетов; редактирование текста статьи.

Список литературы

1. Доллежалъ Н.А., Емельянов И.Я. Канальный энергетический ядерный реактор. М.: Атомиздат, 1980.
2. Краюшкин А.В., Новиков В.Г., Федосов А.М., Ушпурас Е., Римкявичус С, Кривошеин Г.С. Оптимальное дожигание топлива 1-го энергоблока в реакторе 2-го энергоблока Игналинской станции // Физические проблемы топливных циклов ядерных реакторов. Материалы XIV семинара по проблемам физики реакторов. Москва, 4–8 сентября 2006 г. М.: МИФИ, 2006. С. 100–102.
3. Канашов Б.А., Кузьмин И.В., Костюченко А.Н., Перепелкин С.О., Чесанов В.В. Оценка остаточного ресурса ТВС из остановленных энергоблоков РБМК-1000 для дожигания на действующих энергоблоках АЭС // Сб. докладов X Международного форума «Безопасность ядерных технологий: транспортирование радиоактивных материалов – «Атомтранс-2015». С.-Петербург, 5–9 октября 2015 г.
4. Кузнецов В.М., Юрчевский Е.Б., Амерханов Р.А., Спиридонов В.П. Вопросы обеспечения безопасности и технические аспекты вывода из эксплуатации объектов использования атомной энергетики // Энергосбережение и водоподготовка, 2022. № 2 (136). С. 57–69.
5. Хомяков Д.Н., Меньшиков В.Ф. Снятие с эксплуатации энергоблоков АЭС // Сборник докладов Всероссийской конференции «Энергетика России в 21 веке: проблемы и научные основы устойчивого и безопасного развития», 2000.
6. Загребаев А.М., Евстюхина Е.В., Ястребов А.С., Андреев М.Г. Математическое моделирование и стратегия использования остаточного ресурса расходомеров остановленных энергоблоков РБМК в процессе вывода АЭС из эксплуатации // Вестник Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», 2025. Т. 14. № 2. С. 149–156.
7. Загребаев А.М., Залужная Г.А., Наумов В.И. Упрощенная математическая модель и реализация остаточного ресурса ядерного топлива при выводе из эксплуатации реактора типа РБМК // Атомная энергия, 2018. Т. 125. Вып. 5. С. 255–258.
8. Федосов А.М. Оптимальное использование топлива при выводе АЭС с РБМК из эксплуатации // Атомная энергия, 2007. Т. 102. Вып. 5. С. 284–290.

Mathematical modeling and optimization of fuel utilization in the decommissioning of an RBMK reactor

A. M. Zagrebaev, G. A. Litvinova, A. S. Yastrebov ✉

National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow, 115409, Russia

✉ yastrebovstuff@gmail.com

Received July 31, 2025; revised August 14, 2025; accepted September 09, 2025

For NPPs with RBMK reactors, a physical problem of choosing a time shift between power unit shutdowns is formulated and solved in order to maximize the use of the fuel energy resource of reactors being decommissioned. The mathematical model used to solve the optimization problem is based on a point model of the fuel assembly distribution dynamics by energy production (fuel assembly spectrum), which allows predicting the change in the fuel assembly spectrum over time in an operating reactor depending on the tactics of loading burnt-out fuel assemblies from a shut-down reactor. It is shown that optimal planning of the shift between power unit shutdowns allows saving hundreds of «fresh fuel assemblies» depending on the selected fuel afterburning strategy. The paper examines a scenario in which one of the reactors is shut down and the second one continues to operate for a limited time. The possibility of loading fuel from the first reactor to the second one is studied in order to minimize the total consumption of fresh fuel assemblies. The proposed approach takes into account both physical and technological limitations. The results of numerical modeling are presented, demonstrating the efficiency of the proposed fuel redistribution algorithm. The obtained data can be used in planning the decommissioning of power units in order to increase fuel efficiency and reduce the costs of purchasing fresh fuel assemblies.

Keywords: fuel burnup, RBMK, fuel assembly, decommissioning, optimization, fuel resource, refueling, inter-reactor fuel transfer, mathematical model.

References

1. Dollezhal N.A., Emel'yanov I.Ya. Kanal'nyj energeticheskij yadernyj reaktor [Channel-type power nuclear reactor]. Moscow: Atomizdat Publ., 1980 (in Russian).
2. Krayushkin A.V., Novikov V.G., Fedosov A.M., Ushpuras E., Rimkyavichus S., Krivoshein G.S. Optimal'noe dozhiganie topliva 1-go energobloka v reaktore 2-go energobloka Ignalinskoj stantsii [Optimal fuel burnup of Unit 1 in the reactor of Unit 2 at the Ignalina nuclear power plant]. Fizicheskie problemy toplivnykh tsiklov yadernykh reaktorov. Materialy XIV seminarov po problemam fiziki reaktorov [Proc. XIV Seminar on Reactor Physics Problems]. Moscow, 4–8 September 2006. Moscow: MIFI, 2006. Pp. 100–102 (in Russian).
3. Kanashov B.A., Kuzmin I.V., Kostyuchenko A.N., Perepelkin S.O., Chesanov V.V. [Assessment of the residual resource of fuel assemblies from shutdown RBMK-1000 units for further burnup in operating NPP units]. Sb. dokladov X Mezhdunarodnogo foruma «Bezopasnost' yadernykh tekhnologij: transportirovanie radioaktivnykh materialov – «Atomtrans-2015» [Collection of reports from the X International Forum «Safety of Nuclear Technologies: Transportation of Radioactive Materials – Atomtrans-2015»] (in Russian).
4. Kuznetsov V.M., Yurcheskiy E.B., Amerkhanov R.A., Spiridonov V.P. Voprosy obespecheniya bezopasnosti i tekhnicheskie aspekty vyvoda iz ekspluatatsii ob'ektov ispol'zovaniya atomnoj energetiki [Safety assurance and technical aspects of decommissioning of nuclear power facilities]. Energobezopasnost' i Vodopodgotovka, 2022. No. 2 (136). Pp. 57–69 (in Russian).
5. Khomyakov D.N., Menshikov V.F. Snyatie s ekspluatatsii energoblokov AES [Decommissioning of NPP units]. Sbornik dokladov Vserossijskoj konferentsii «Energetika Rossii v XXI veke: problemy i nauchnye osnovy ustojchivogo i bezopasnogo razvitiya» [Proc. All-Russian Conference «Power Industry of Russia in the 21st Century: Problems and Scientific Foundations of Sustainable and Safe Development»], 2000 (in Russian).
6. Zagrebaev A.M., Evstyukhina E.V., Yastrebov A.S., Andreev M.G. Matematicheskoe modelirovanie i strategiya ispol'zovaniya ostatotochnogo resursa raskhodomerov ostanovlennykh energoblokov RBMK v protsesse vyvoda AES iz

ekspluatatsii [Mathematical modeling and strategy for utilizing the remaining resource of flow meters from shutdown RBMK units during the decommissioning of nuclear power plants]. Vestnik NIYaU MIFI, 2025. Vol. 14. No. 2. Pp. 149–156 (in Russian).

7. Zagrebaev A.M., Zaluzhnaya G.A., Naumov V.I. Uproschennaya matematicheskaya model' i realizatsiya ostatotochnogo resursa yadernogo topliva pri vyvode iz ekspluatatsii reaktora tipa RBMK [Simplified mathematical model and implementation of the residual resource of nuclear fuel during the decommissioning of an RBMK-type reactor]. Atomnaya Energiya, 2018. Vol. 125. No. 5. Pp. 255–258 (in Russian).

8. Fedosov A.M. Optimal'noe ispol'zovanie topliva pri vyvode AES s RBMK iz ekspluatatsii [Optimal fuel utilization in the decommissioning of NPPs with RBMK reactors]. Atomnaya Energiya, 2007. Vol. 102. No. 5. Pp. 284–290 (in Russian).

УДК 519.63, 616.314-089.843

Применение математического моделирования и цифровых технологий для оптимизации планирования дентальной имплантации

© 2025 г. К. Д. Савин¹, А. В. Хрестин², Т. В. Брайловская^{1,3}, П. Н. Рябов²

¹ ФГБУ НМИЦ «Центральный научно-исследовательский институт стоматологии и челюстно-лицевой хирургии» Минздрава России, Москва, 119991, Россия

² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», кафедра прикладной математики, Москва, 115409, Россия

³ ФГАОУ ВО «Первый московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский университет)», Москва, 119435, Россия

В данной работе проведено численное исследование напряженно-деформированного состояния верхней челюсти человека при жевательной нагрузке с различными вариантами дентальной имплантации. Для получения результатов используется метод конечных элементов. Геометрическая модель построена с использованием реальных компьютерных томограмм пациента с дентальными имплантатами. Показано, что при росте количества имплантатов, в диапазоне от 4 до 8, величина механических напряжений на кости монотонно убывает. Данный вывод позволяет утверждать, что самым безопасным, с точки зрения эксплуатации, является вариант с наибольшим количеством. Показано, что увеличение размеров имплантата снижает величину механических напряжений как на кости, так и на имплантатах. Продемонстрировано влияние различных углов установки задних имплантатов. Полученные в статье выводы не зависят от задаваемых в модели механических свойств кости, в приближении изотропного и однородного материала челюсти в упругой постановке.

Ключевые слова: дентальная имплантация, альвеолярная костная ткань, ортопедические конструкции, математическое моделирование, модель, механика деформируемого твердого тела, математическая модель, инженерный расчет.

Введение

Современная стоматология переживает период интенсивного развития, в значительной степени обусловленного прогрессом в области дентальной имплантации. Дентальная имплантация является современным и эффективным методом восстановления утраченных зубов, который позволяет восстановить функцию жевания, эстетику улыбки и качество жизни пациентов. Благодаря развитию технологий и материалов, имплантация стала более предсказуемой и доступной, что делает ее одним из наиболее предпочтительных решений в протезировании. Постоянное совершенствование методов и материалов способствует повышению успешности процедур и долговечности результатов, что делает дентальную имплантацию актуальной областью стоматологии на сегодняшний день. Данный метод восстановления утраченных зубов уже давно вышел за рамки узкоспециализированной процедуры и стал полноценной частью комплексного стоматологического лечения, обеспечивающей высокие функциональные и эстетические результаты. Однако, несмотря на накопленный клинический опыт и успехи в разработке новых конструкционных материалов, дентальная имплантация по-прежнему остается предметом научных исследований, направленных на повышение ее надежности и предсказуемости.

✉ П.Н. Рябов: pnryabov@mephi.ru

Поступила в редакцию: 11.09.2025

После доработки: 04.10.2025

Принята к публикации: 07.10.2025

EDN GVVRDE

Одной из ключевых задач современной дентальной имплантации является обеспечение длительной и устойчивой интеграции имплантата с альвеолярной костью. Наряду с клиническими аспектами, в настоящее время большое значение приобретают методы численного моделирования, позволяющие глубже понять биомеханические процессы, происходящие в зоне имплантации. В частности, конечно-элементный анализ (FEA) представляет собой эффективный инструмент для оценки напряженно-деформированного состояния системы «имплантат – костная ткань», что особенно актуально при планировании лечения пациентов с различными анатомическими особенностями и степенью атрофии костной ткани.

Актуальность настоящего исследования обусловлена необходимостью оптимизации параметров и количества дентальных имплантатов с точки зрения распределения нагрузок, возникающих при жевательных движениях. Именно неравномерность и концентрация напряжений в определенных зонах являются основными причинами развития костной резорбции и последующей потери имплантатов. В этой связи, особое внимание уделяется влиянию числа, расположения и геометрии имплантатов, а также особенностям протетической конструкции и направления приложенной нагрузки.

Целью данной работы является численное исследование напряженно-деформированного состояния верхней челюсти с различными вариантами дентальной имплантации, с использованием метода конечных элементов. Работа включает в себя построение анатомически достоверной 3D-модели, моделирование жевательной нагрузки в различных клинических сценариях и оценку распределения напряжений в костной ткани и конструкции имплантатов. Особое внимание уделяется сравнению реализаций с различным числом и размером имплантатов, углом их установки, а также различными свойствами костной ткани.

Научная новизна исследования заключается в систематическом подходе к анализу большого числа клинически значимых параметров в условиях, приближенных к реальной анатомии и биомеханике. Практическая значимость работы определяется возможностью использования полученных данных для обоснованного выбора стратегии имплантации и индивидуализации подхода к протезированию.

Анализ производится при помощи метода конечного элемента, требующего разбиения расчетной области на конечно-элементную сетку. В работе использован пакет программ для конечно-элементного моделирования – Ansys.

Описание расчетной модели

Используемая геометрия

Геометрическая модель верхней челюсти построена, опираясь на поверхность, полученную из реальных компьютерных томограмм пациента с дентальными имплантатами (рис. 1a). Стоит отметить, что исходная поверхность неидеальна, в силу методов обработки снимков. Поэтому конечная модель лишь качественно повторяет геометрию верхней челюсти, включая носовую вырезку и небную кость. Сравнение итоговой геометрии и исходной поверхности продемонстрировано на рис. 1b, c, d.

В зависимости от плана установки дентальных имплантатов добавлено соответствующее количество имплантатов, качественно соответствующих параметрам реального коммерческого имплантата «NobelParallel Conical Connection TiUltra NP 3.75×10 mm» длиной 9.5 мм и внешним диаметром 3.75 мм. Вместо полноценной резьбы рассматривается цилиндрическое тело со скосами на одной из граней и небольшими скруглениями на всех ребрах. Под каждый имплантат в челюсти вырезается соответствующее отверстие, внешние края которого скругляются для большего соответствия реальной геометрии челюсти. В случае, если имплантат превышает высоту кости (в области верхнечелюстной пазухи), в области установки дентального имплантата происходит наращивание альвеолярной кости костно-пластическим материалом. Данное действие соответствует процедуре синус-лифтинга или костной пластике на верхней челюсти. Так же при помощи проекции верхней челюсти был создан каркас ортопедической конструкции (в стоматологических терминах «балка»), на которую в реальности фиксируется протез. Для упрощения постановки, каркас и имплантаты рассматриваются как единое целое, в дальнейшем будем называть этот каркас термином «ортопедическая конструкция» или просто «конструкция».

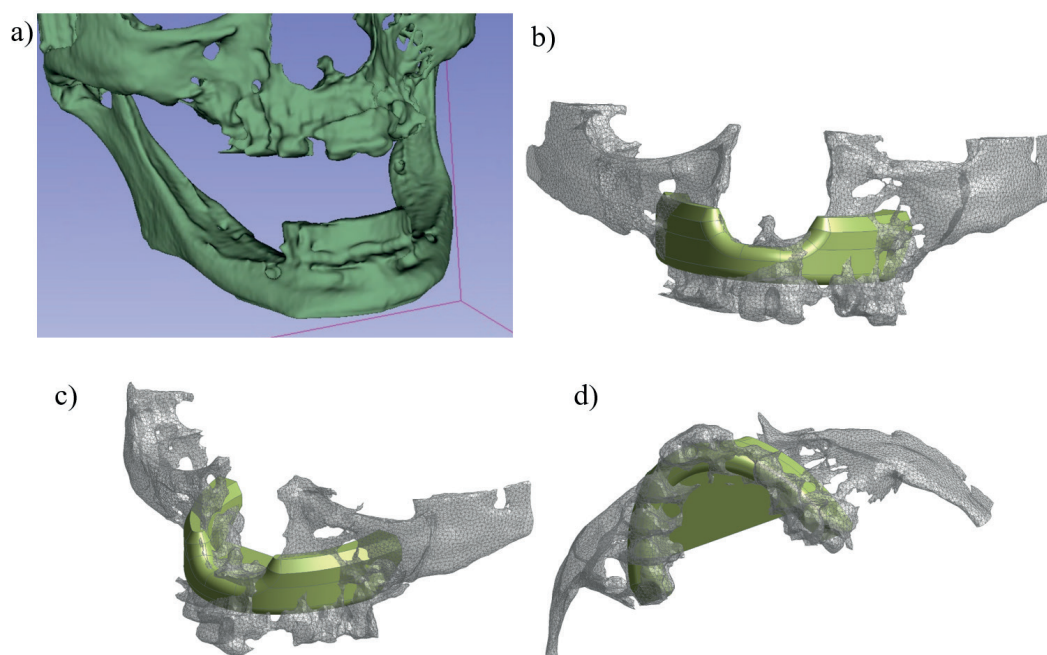


Рис. 1. а) – геометрия челюсти, полученная из снимков КТ; б), с), d) – внешний вид челюсти, полученной из снимков КТ (прозрачным) и итоговой геометрической модели (сплошным)

Количество имплантатов	4 (45°)	4 (30°)	4 (17°)
Геометрия в сборе (сечение)			
Верхняя кость и конструкция			

Рис. 2. Варианты геометрии для 4 имплантатов, при различном угле установки задних

Количество имплантатов	4	6	8
Геометрия в сборе			
Верхняя кость и конструкция (дополнительно указана нумерация)			

Рис. 3. Варианты геометрии для разного количества вертикально расположенных имплантатов

В данной работе рассматриваются различные вариации геометрии, которые можно разделить на две группы (рис. 2 и 3).

Группа № 1 – варианты с четырьмя дентальными имплантатами, с различными углами (к вертикали) для дистальных имплантатов.

Группа № 2 – варианты с вертикальным расположением всех имплантатов. Нумерация имплантатов начинается всегда с одного края и последовательно увеличивается на единицу.

Используемые материалы

Вся верхняя челюсть рассматривается как единое тело, состоящее из изотропного материала, без пор и пазух. Конструкция изготовлена из чистого титана. В открытых источниках можно найти, что значение модуля Юнга для компактной кости лежит в диапазоне 0.4–30 ГПа, а для губчатой кости 0.05–6.5 ГПа [2–7]. В данной работе механические свойства для кости были выбраны в соответствии

Таблица 1. Механические свойства рассматриваемых материалов

Материал	Модуль Юнга, ГПа	Коэфф. Пуассона	Критическое значение по деформации	Критическое значение напряжения, МПа
Титан	105	0.3	–	300
Кость	18	0.3	0.4 %	72

со статьей [1], в которой проводилось моделирование и сравнение с экспериментом схожей задачи, но для нижней челюсти.

Несмотря на тот факт, что большую часть верхней челюсти составляет губчатая кость, значительную часть нагрузки от дентального имплантата воспринимает на себя объем, состоящий из кортикальной кости (наружный слой). Как показано авторами в работе [8], самое напряженное место дентального имплантата, а как следствие и альвеолярной кости, находится у первого витка резьбы имплантата, в области кортикальной кости.

Граничные условия и сеточная модель

В данной работе рассматривается стационарная задача напряженно-деформированного состояния верхней челюсти. Жевательная нагрузка передается на верхнюю челюсть путем приведения нижней. В случае установки ортопедической конструкции, нагрузка вначале передается на конструкцию, после чего на имплантаты, а с имплантатов на верхнюю челюсть. В модели в качестве имитации сжатия челюстей задается сила, величиной 100 [Н], действующая на поверхность «конструкции» (поверхность окрашена красным, вид снизу). При сжатии зубов нижняя челюсть приводится к верхней, с помощью мышц, прикрепленных к височной кости, которая через скуловую кость крепится к верхней челюсти. Получается, что для всего черепа силы, связанные с процессом жевания, являются внутренними и не требуют компенсации извне. Но если рассматривать только часть верхней челюсти, то силу, создаваемую нижней челюстью, нужно скомпенсировать. Это можно сделать путем закрепления части модели.

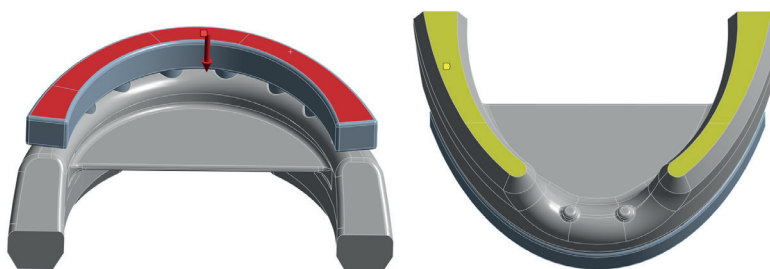


Рис. 4. Визуализация используемых граничных условий: красный – область приложения силы, желтый – область закрепления

Закрепление прикладывается на верхнюю часть челюсти, окрашенную на рис. 4 в желтый цвет, что означает запрет нормальных перемещений для данной поверхности.

Между отверстиями для имплантатов в челюсти и имплантатами попарно задан контакт типа «склейка», не позволяющий поверхностям отрываться и проскальзывать относительно друг друга. Этот контакт аналогичен склеиванию поверхностей, что достаточно хорошо описывает резьбовые соединения. Такой контакт используется в работе [1], где имплантат рассматривается как простой цилиндр, и в работе [8], где учитывается резьба. Для решения контактной задачи применялись метод штрафных функций и итерационный метод пошагового приращения нагрузки Ньютона – Рафсона.

Используемый численный метод требует разбиения геометрии на конечно-элементную сетку. Построена тетраэдральная сетка второго порядка (рис. 5). Характерный размер ячейки на контактных

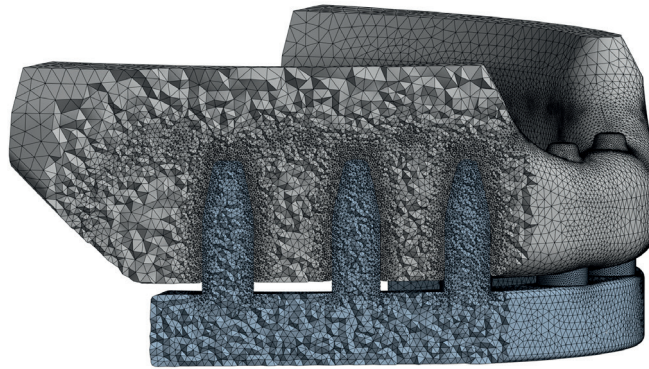


Рис. 5. Конечно-элементная модель, используемая в расчете

поверхностях – 0.15 мм, в области челюсти максимальный размер элемента – 1 мм, а в области конструкции – 0.5 мм. Сетка внутри областей продемонстрирована при помощи сечения модели плоскостью.

Сравнение для разного количества имплантатов

В качестве итоговой величины рассматриваются эквивалентные напряжения по теории Мизеса. В каждой точке геометрии существует 6 независимых напряжений: 3 нормальные компоненты σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} и 3 касательные τ_{xy} , τ_{yz} , τ_{zx} . Теория Мизеса позволяет свести 6 переменных к одной эквивалентной скалярной величине, что значительно упрощает анализ полученных результатов. Эквивалентное напряжение по теории Мизеса вычисляется по формуле:

$$\sigma_e = \sqrt{0.5 [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2]},$$

где σ_1 , σ_2 , σ_3 – главные нормальные напряжения, которые, согласно определению, являются действующими по главным площадкам (то есть площадкам, на которых отсутствуют касательные напряжения).

Для визуального сравнения полученных численных результатов на рис. 6 представлено пространственное распределение эквивалентных напряжений.

Напряжения для альвеолярной кости значительно сконцентрированы вблизи лунки имплантата, и их пиковые значения достаточно сильно отличаются для различного количества установленных дентальных имплантатов. Поэтому цветовые шкалы специально подобраны так, чтобы максимально была видна разница между всеми реализациями. Под словом «реализация», в дальнейшем, будем понимать совокупность геометрической модели и получаемых напряжений для одного конкретного количества имплантатов. Самой напряженной частью альвеолярной кости является поверхность лунки дентального имплантата, а именно две области: первая соответствует основанию лунки, вторая – ее краю. Для титана самыми напряженными частями являются внешняя поверхность имплантата, шейка импланта-

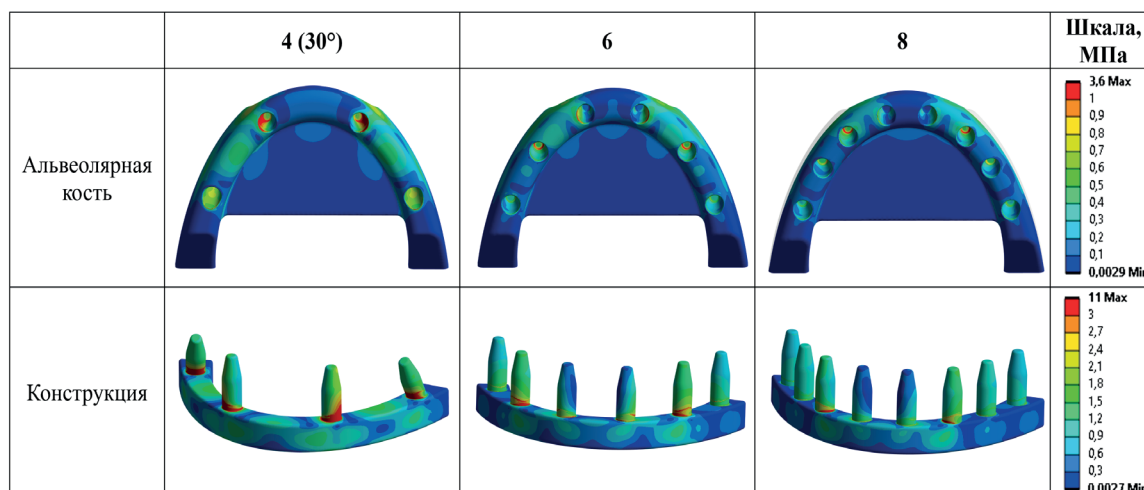


Рис. 6. Распределение эквивалентных напряжений по теории Мизеса для различного количества имплантатов

та, контактирующая с альвеолярной костью, а также область контакта имплантата и ортопедической конструкции. Местоположение максимальных напряжений качественно согласуется с результатами, полученными в [1] и [8].

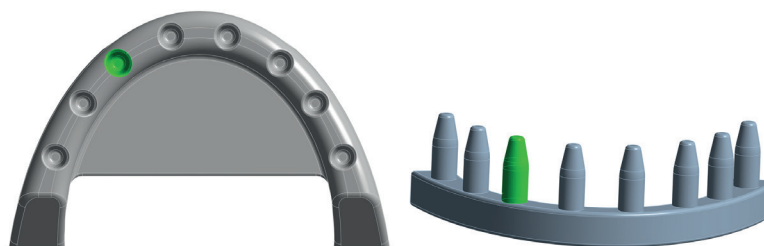


Рис. 7. Визуализация рассматриваемой поверхности лунки (слева) и поверхности имплантата (справа) для имплантата № 3

Для более подробного анализа рассмотрим следующие величины.

1. Выделим поверхность лунки имплантата на челюсти для n -го имплантата.

Пример выделения представлен на рис. 7. Имплантат № 3, поверхность зеленого цвета слева.

2. Определим на этой поверхности максимальное значение напряжения по Мизесу. Эта величина является важной, так как при достижении значения выше критического (предела упругости материала), произойдет пластическая деформация, которая приведет к необратимым изменениям геометрии конструкции и/или костной ткани.

3. Определим на этой поверхности среднее значение напряжения по Мизесу.

Данная величина позволяет понять, как нагрузка распределяется по конкретным имплантатам и соответствующим отверстиям.

4. Аналогично выделим поверхность, принадлежащую конструкции для n -го имплантата (пример выделения для 3-го имплантата зеленым цветом справа).

5. Определим на этой поверхности максимальное значение напряжения по Мизесу.

6. Определим на этой поверхности среднее значение напряжения по Мизесу.

Нагрузки в данной части симметричны, тем не менее, есть небольшая асимметрия, связанная с численным методом. Для удобства отображения, на рис. 8–9 приведены данные только для половины всех имплантатов (с учетом усреднения по двум, для минимизации влияния численного метода).

На основании этих данных найдем четыре величины, для каждой из реализаций (4 имплантата, 6 имплантатов, 8 имплантатов):

1. Максимальные напряжения, возникающие на всей альвеолярной кости.
2. Максимальные напряжения, возникающие на всей конструкции.

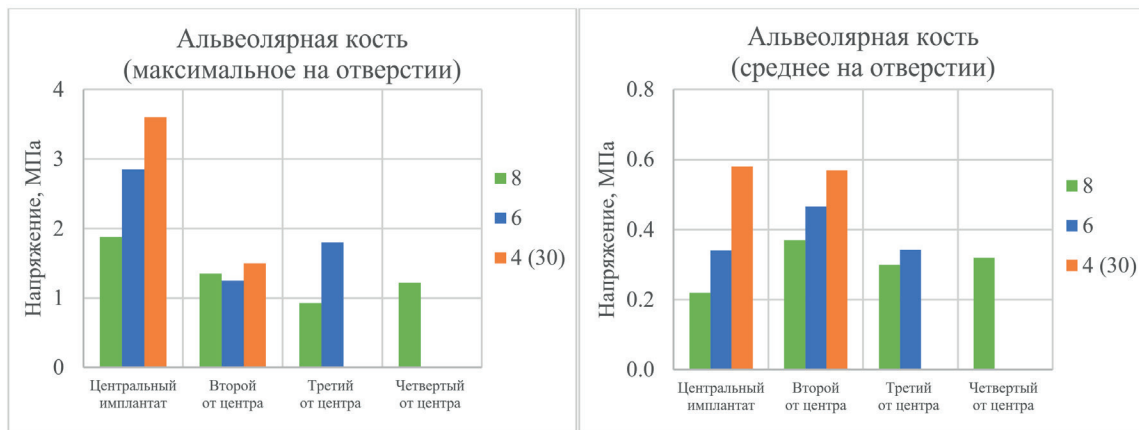


Рис. 8. Распределения максимальных (слева) и усредненных по площади лунки (справа) эквивалентных напряжений для различного количества имплантатов

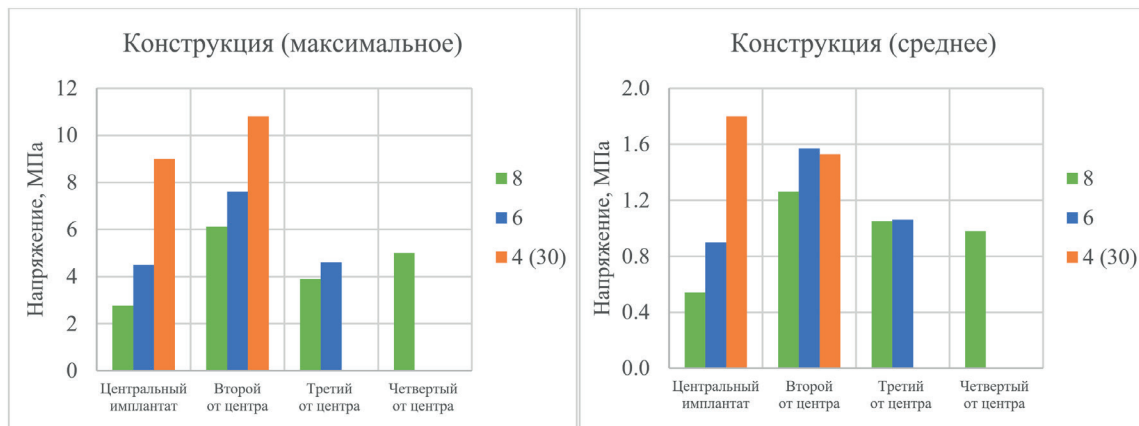


Рис. 9. Распределения максимальных (слева) и усредненных по площади имплантата (справа) эквивалентных напряжений для различного количества имплантатов

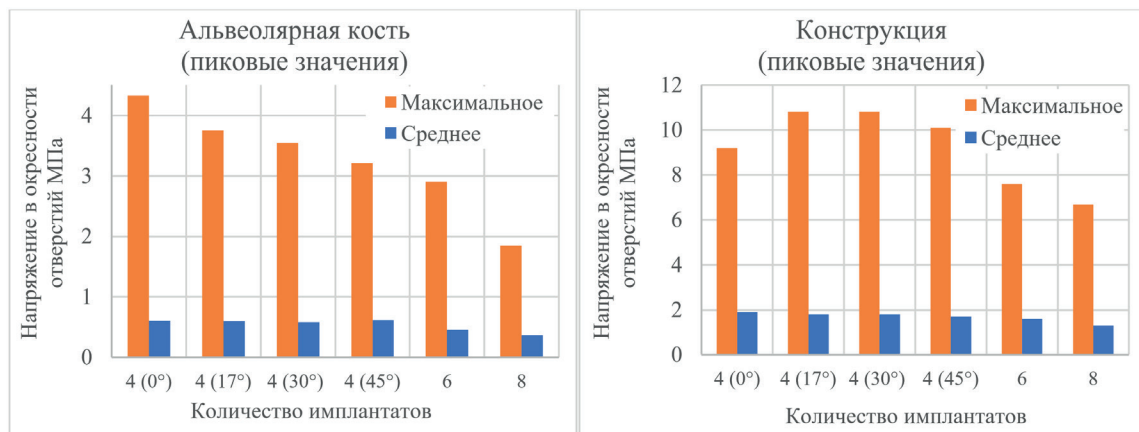


Рис. 10. Распределения пиковых эквивалентных напряжений для различных конструкций с числом имплантатов от 4 до 8, а также различным углом их наклона от 17° до 45° в случае четырех имплантатов

3. Самое большое значение среднего напряжения по отверстию для альвеолярной кости.

4. Самое большое значение среднего напряжения по отверстию для конструкции.

Назовем полученные величины пиковыми.

Из рис. 10 видно, что с увеличением количества имплантатов монотонно уменьшаются пиковые напряжения на челюсти и на конструкции. Сравнивая реализации 4 (30) и 8, уменьшение напряжений

на кости произошло на 47 % по максимальным и на 36% по средним. Для конструкции уменьшение произошло на 38 % по максимальным и 28 % по средним. Откуда следует вывод, что увеличение количества имплантатов (в диапазоне от 4 до 8) значительно снижает риск осложнений при эксплуатации. Помимо этого, мы наблюдаем, что изменение угла наклона в случае четырех имплантатов сказывается не существенным образом на величину максимальной и средней нагрузки.

Влияние размеров имплантатов

Все вышеприведенные расчеты производились для одного имплантата. Для практических приложений полезно понимать, как качественно на результаты влияет изменение размеров имплантата. Дополнительно приведены два расчета, для длины 12.5 мм и диаметров 4.5 мм и исходного 3.75 мм.

Из графиков, особенно из усредненных напряжений, отчетливо видна тенденция. Сравним их попарно. Сравнивая первую (синим) и вторую (оранжевым) реализации, можно понять, как изменяются показатели при увеличении длины имплантата. При увеличении длины на 31 %, напряжения на кости падают на 20 %, а на конструкции на 10 %. Если сравнить третью (серым) и вторую реализации, то можно сделать вывод о влиянии диаметра. При увеличении диаметра на 20 %, напряжения на кости падают на 17 %, а на конструкции на 20 %.

Откуда следует вывод, что увеличение размеров имплантата уменьшает напряжения, возникающие при эксплуатации.

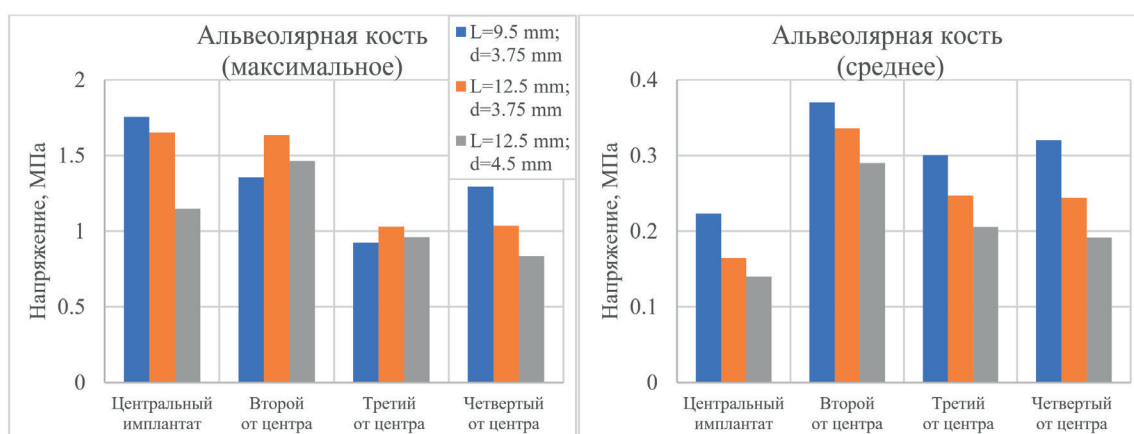


Рис. 11. Распределения максимальных (слева) и усредненных по площади лунки имплантата (справа) эквивалентных напряжений для различных размеров имплантата

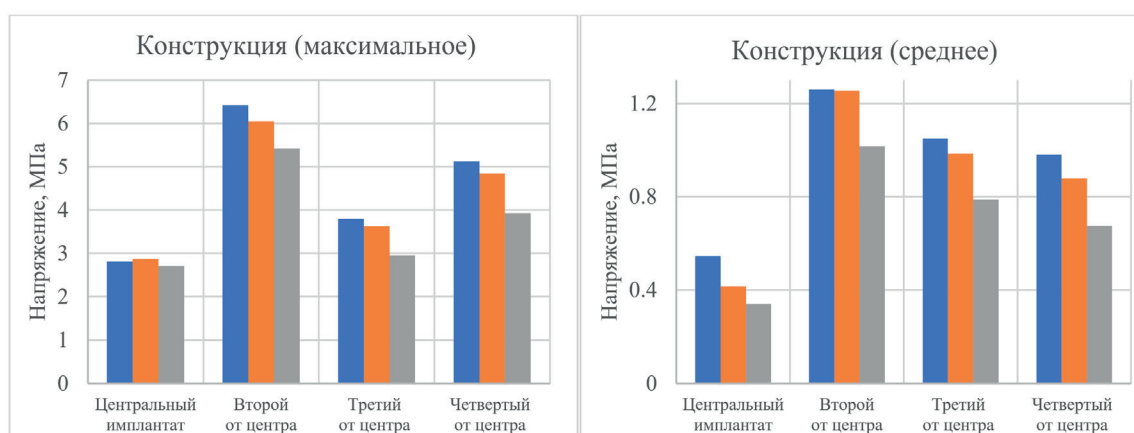


Рис. 12. Распределения максимальных (слева) и усредненных по площади имплантата (справа) эквивалентных напряжений для различных размеров имплантата

Сравнение различных типов костей

Рассмотрим различие между результатами для модуля Юнга (E) 18 ГПа (компактная кость) и 6 ГПа (губчатая кость). Интуитивно ожидается прямо пропорциональное изменение напряжений, с сохранением распределений в объеме и распределений нагрузок по имплантатам. Количество имплантатов взято равным 6.

На рис. 13 видно, что средние напряжения на альвеолярной кости уменьшаются, при уменьшении модуля Юнга. Но в то же время средние напряжения на конструкции возрастают. Для более подробного анализа были построены диаграммы напряжений для каждого из имплантатов (рис. 14–15).

Действительно, заметно уменьшение усредненных напряжений на альвеолярную кость и увеличение на конструкции. Видно, что усредненные значения отличаются не более чем на 33 %. Аналогичная ситуация с максимальными значениями для конструкции, отличие не более 30 %. Для челюсти максимальные значения отличаются не только количественно, но и качественно. Максимальное напряжение – это экстремальная величина, которая чувствительна ко многим факторам. Особенно сильно это проявляется при контакте кривых поверхностей, как в данном случае. Тем не менее, отличие составляет не более 40 %. Учитывая вышесказанное и тот факт, что основной целью работы является демонстрация относительных значений, а не абсолютных, можно сделать вывод, что изменение модуля Юнга качественно не повлияет на выводы статьи.

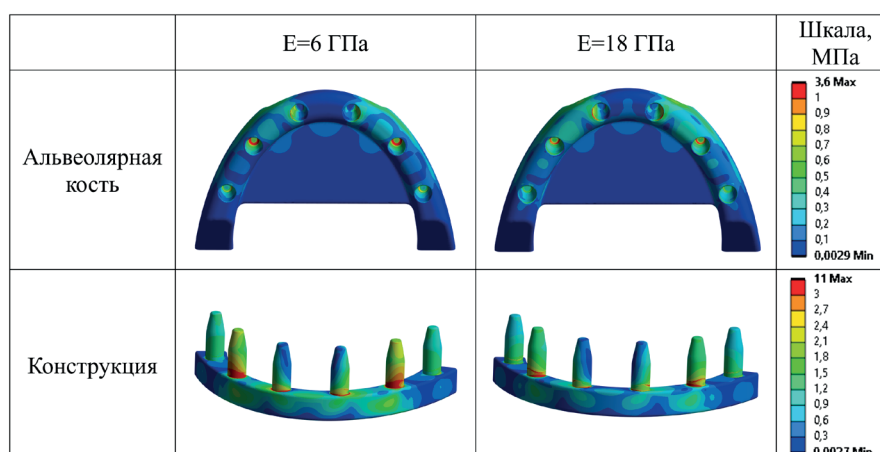


Рис. 13. Распределение эквивалентных напряжений по теории Мизеса для различных механических свойств кости

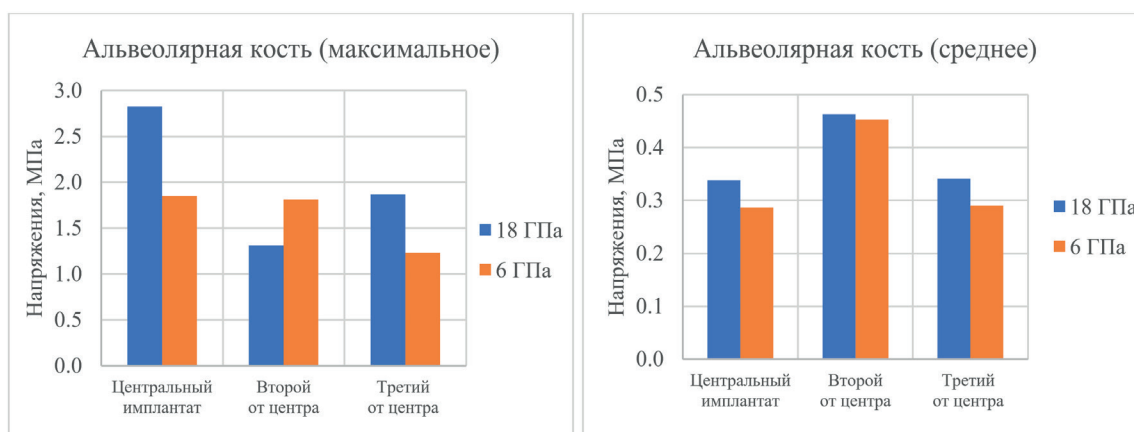


Рис. 14. Распределения максимальных (слева) и усредненных по площади лунки (справа) эквивалентных напряжений для различных модулей Юнга кости

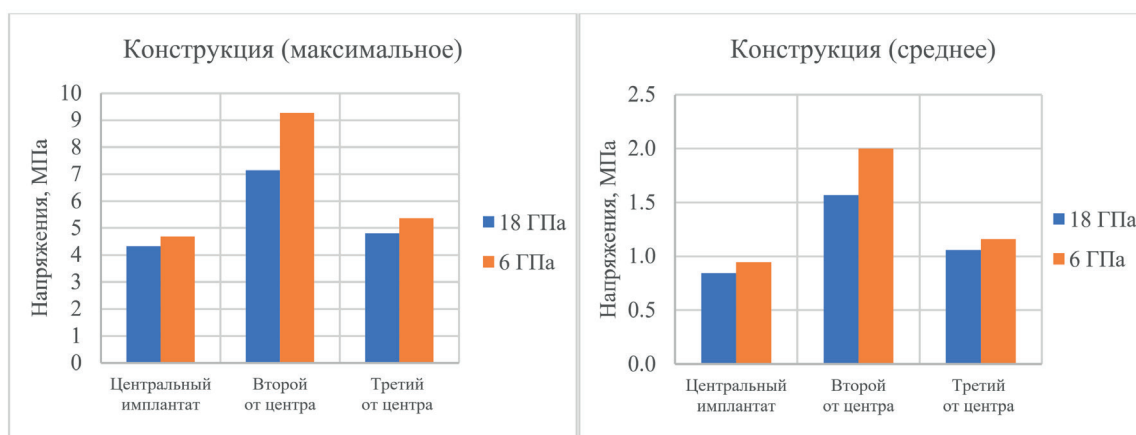


Рис. 15. Распределения максимальных (слева) и усредненных по площади имплантата (справа) эквивалентных напряжений для различных модулей Юнга кости

Выводы

Установка 8 имплантатов снижает максимальные и средние напряжения на альвеолярную кость в области контакта на 41–56 % и 37–40 % соответственно, по сравнению с установкой 4, и на 34 и 20 %, по сравнению с установкой 6.

Самой напряженной частью альвеолярной кости является область, находящаяся ближе к внешнему краю шейки имплантата. Для конструкции самыми напряженными частями являются область соединения шейки имплантата и конструкции.

Увеличение длины и диаметра дентального имплантата снижает напряжения на альвеолярной кости и на конструкции. При увеличении длины на 31 % напряжения на альвеолярной кости падают на 20 %, а на конструкции на 10 %. При увеличении диаметра на 20 %, напряжения на альвеолярной кости падают на 17 %, а на конструкции на 20 %.

При изменении модуля Юнга кости в три раза результаты качественно не изменяются. Что говорит о том, что все вышеописанные выводы справедливы и для иных значений модуля Юнга.

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

К.Д. Савин – постановка задачи; обработка результатов исследования, выявление закономерностей; верификация результатов; подготовка текста статьи.

А.В. Хрестин – разработка математической модели; проведение численных расчетов; анализ результатов; выявление закономерностей, подготовка текста статьи.

Т.В. Брайловская – формулировка идеи и целей исследования, выбор методов исследования; анализ результатов; подготовка текста статьи.

П.Н. Рябов – разработка математической модели; подготовка текста статьи.

Список литературы

1. *Brunski J.* Biomechanical aspects of the optimal number of implants to carry a cross-arch full restoration // *European Journal of Oral Implantology*, 2014. № 7 (2). P. 111–131.
2. *Хлусов И.А., Пичугин В.Ф., Сурменева М.А., Сурменев Р.А.* Основы биомеханики биосовместимых материалов и биологических тканей: учебное пособие. Томск: Издательство ТПУ, 2023. 163 с.

3. Olson S.A. Designing a biomechanics investigation: choosing the right model // J Orthop Trauma, 2012 Dec. № 26(12). P. 672–677. DOI: 10.1097/BOT.0b013e3182724605

4. Абросимов В.Г. Механические свойства костей, некоторые особенности обмена металлов с биологической средой, анализ конструктивных особенностей имплантов // Вопросы реконструктивной и пластической хирургии, 2008. № 3(26). С. 32–40.

5. Аврунин А.С. Механизм жесткости и прочности кости в норме и при старении организма. Наноразмерная модель // Гений Ортопедии, 2008. № 3. С. 59–66.

6. Акулич Ю.В. Биомеханика адаптационных процессов в костной ткани нижней конечности человека: автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Саратов, 2011. 37 с.

7. Федорова Н.В. Определение напряженно-деформированного состояния контактирующих тел и моделирование их хрупкого разрушения: автореф. дис. ... к-та тех. наук. Новосибирск, 2020. 20 с.

8. Перельмутер М.Н. Исследование напряженно-деформированного состояния стоматологических имплантатов методом граничных интегральных уравнений // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика, 2018. № 2. С. 83–95.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 5, pp. 402–413

Application of mathematical modeling and digital technologies for optimizing dental implantation planning

K. D. Savin¹, A. V. Khrestin², T. V. Brailovskaya^{1,3}, P. N. Ryabov^{2,✉}

¹ Central Research Institute of Dentistry and Maxillofacial Surgery, Moscow, 119991, Russia;

² National Research Nuclear University «MEPhI» (Moscow Engineering Physics Institute), Department of Applied Mathematics, Moscow, 115409, Russia

³ I.M. Sechenov First Moscow State Medical University (Sechenov University), Moscow, Russia

✉ pnryabov@mephi.ru

Received September 11, 2025; revised October 04, 2025; accepted October 7, 2025

This work presents a numerical study of the stress-strain state of the human maxilla under masticatory load with different dental implantation options. The finite element method was used to obtain the results. The geometric model is constructed using real computed tomography scans of a patient with dental implants. It is shown that as the number of implants increases, in the range from 4 to 8, the magnitude of mechanical stress on the bone monotonically decreases. This finding allows us to state that the option with the largest number of implants is the safest in terms of operation. It has been shown that increasing the size of the implant reduces the amount of mechanical stress on both bones and implants. The influence of different angles of posterior implant placement is demonstrated. The conclusions obtained in the article are independent of the mechanical properties of the bone set in the model, under the approximation of an isotropic and homogeneous jaw material in an elastic formulation.

Keywords: dental implantation, alveolar bone tissue, orthopedic structures, mathematical modeling, model, solid mechanics, mathematical model, engineering calculation.

References

1. Brunski J. Biomechanical aspects of the optimal number of implants to carry a cross-arch full restoration. European Journal of Oral Implantology, 2014. No.7(2). Pp. 111–131.

2. Hlusov I.A., Pichugin V.F., Surmeneva M.A., Surmenev R.A. Osnovy biomekhaniki biosovmestimyh materialov i biologicheskikh tkanej: uchebnoe posobie [Fundamentals of Biomechanics of Biocompatible Materials and Biological Tissues: A Textbook]. Tomsk. TPU Publ., 2023. 163 p.

3. Olson S.A. Designing a biomechanics investigation: choosing the right model. J Orthop Trauma, 2012 Dec. No. 26(12). Pp. 672–677. DOI: 10.1097/BOT.0b013e3182724605 .
4. Abrosimov V.G. Mekhanicheskie svoystva kostej, nekotorye osobennosti obmena metallov s biologicheskoj sredoj, analiz konstruktivnyh osobennostej implantov [Mechanical properties of bones, some features of metal exchange with the biological environment, analysis of the design features of implants]. Voprosy rekonstruktivnoj i plasticheskoj hirurgii, 2008. No. 3(26). Pp. 32–40 (in Russian).
5. Avrunin A.S. Mekhanizm zhestkosti i prochnosti kosti v norme i pri starenii organizma. Nanourovnevaya model' [Mechanisms of bone stiffness and strength in normal and aging organisms. A nanoscale model]. Genij Ortopedii, 2008. No. 3. Pp. 59–66 (in Russian).
6. Akulich YU.V. Biomekhanika adaptacionnyh processov v kostnoj tkani nizhnej konechnosti cheloveka. avtoref. Diss. dokt. fiz.-mat. nauk [Biomechanics of adaptation processes in the bone tissue of the human lower limb. Abs. Dr.phys.-math. sci.Diss]. Saratov, 2011. 37 p.
7. Fedorova N.V. Opredelenie napryazhenno-deformirovannogo sostoyaniya kontaktiruyushchih tel i modelirovanie ih hrupkogo razrusheniya: avtoref. dis. kand. tekh. nauk [Determination of the stress-strain state of contacting bodies and modeling their brittle fracture. Abs. cand. techn. sci. Diss.]. Novosibirsk, 2020. 20 p.
8. Perel'muter M.N. Issledovanie napryazhenno-deformirovannogo sostoyaniya stomatologicheskikh implantatov metodom granichnyh integral'nyh uravnenij [Study of the stress-strain state of dental implants using the boundary integral equation method]. Vestnik PNIPU. Mekhanika, 2018. No. 2. Pp. 83–95 (in Russian).

УДК 517.95

Обратная задача определения функции источника в вырождающемся параболическом уравнении с дивергентной главной частью на плоскости

© 2025 г. В. Л. Камынин, О. В. Нагорнов

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

Изучается линейная обратная задача определения неизвестной, зависящей от t , правой части (функции источника) в одномерном по пространственной переменной параболическом уравнении со слабо вырождающейся главной частью, заданной в дивергентной форме. Дополнительное условие наблюдения задается в интегральной форме. Установлены достаточные условия, при которых решение рассматриваемой обратной задачи существует и единственно. При этом не накладывается никаких ограничений на величину T и размер области, т.е. доказанные теоремы носят глобальный характер. Решение понимается в обобщенном смысле по Соболеву, в частности, неизвестная функция источника ищется в пространстве $L_2(0, T)$. Коэффициенты уравнения могут зависеть как от временной, так и от пространственной переменных. Вырождение уравнения также допускается как по временной, так и по пространственной переменным. Доказательства теорем существования и единственности решения обратной задачи основаны на исследовании однозначной разрешимости соответствующей прямой задачи, которое также является новым и представляет самостоятельный интерес. При исследовании однозначной разрешимости обратной задачи она сводится к изучению разрешимости некоторого операторного уравнения, где применяются общие теоремы функционального анализа.

Ключевые слова: обратные задачи определения функции источника, вырождающиеся параболические уравнения, интегральное наблюдение

Введение

В прямоугольнике $Q \equiv [0, T] \times [0, l]$ рассматривается обратная задача определения пары функций $\{u(t, x), p(t)\}$, удовлетворяющих параболическому уравнению

$$u_t - (a(t, x)u_x)_x + b(t, x)u_x + c(t, x)u + \gamma(t)u = p(t)g(t, x) + r(t, x), \quad (t, x) \in Q, \quad (1)$$

начальному условию

$$u(0, x) = u_0(x), \quad x \in [0, l], \quad (2)$$

граничным условиям

$$u(t, 0) = u(t, l) = 0, \quad t \in [0, T], \quad (3)$$

и дополнительному условию

$$\int_0^l u(t, x)\omega(x)dx = \varphi(t), \quad t \in [0, T]. \quad (4)$$

✉ О.В. Нагорнов: nagornov@yandex.ru
В.Л. Камынин: vlkaminin2008@yandex.ru

Поступила в редакцию: 03.09.2025
После доработки: 22.09.2025
Принята к публикации: 23.09.2025

В задаче (1)–(4) функции $a(t, x)$, $b(t, x)$, $c(t, x)$, $\gamma(t)$, $u_0(x)$, $\omega(x)$, $\varphi(t)$ предполагаются известными. Уравнение (1) допускает вырождение главной части, а именно, предполагается, что

$$a(t, x) \geq \Lambda_0(x) \geq 0, \quad \frac{1}{\Lambda_0(x)} \in L_q(0, l), \quad q > 1. \quad (5)$$

Однозначная разрешимость обратной задачи (1)–(4) изучается в классе обобщенных решений.

Для случая равномерно параболических уравнений аналогичная обратная задача ранее исследовалась в работах [1]–[3] и др. Случай вырождающихся параболических уравнений с условием типа (5) рассматривался в [4]–[6] для уравнений с недивергентной главной частью. При этом рассматривались решения с $u(t, x) \in W_s^{1,2}(Q)$ ($s > 1$), удовлетворяющие уравнению п.в. в Q .

В дальнейшем будем использовать обозначения:

$$Q_\tau = [0, \tau] \times [0, l], \quad 0 < \tau \leq T, \quad Q_T \equiv Q, \quad \|z\|_{L_2(0, l)} \equiv \|z\|_2, \quad z(x) \in L_2(0, l).$$

Нам понадобится известное арифметическое неравенство Коши

$$|ab| \leq \frac{\varepsilon}{2} a^2 + \frac{1}{2\varepsilon} b^2, \quad \varepsilon > 0. \quad (6)$$

Всюду ниже будем предполагать, что рассматриваемые функции, как минимум, измеримы, все равенства и неравенства выполняются почти всюду, производные понимаются в обобщенном смысле по Соболеву. Используемые в работе пространства Лебега и Соболева с соответствующими нормами будем понимать в общепринятом смысле (см, например, [7]).

Относительно входных данных задачи (1)–(4) будем предполагать выполненными следующие условия:

существует функция $\Lambda_0(x)$ такая, что $0 \leq \Lambda_0(x) \leq a_0$, $x \in [0, l]$, $\frac{1}{\Lambda_0(x)} \in L_q(0, l)$,

$$\|1 / \Lambda_0\|_{L_q(0, l)} \leq a_1, \quad q > 1 \text{ и при этом } \Lambda_0(x) \leq a(t, x) \leq a_2 \Lambda_0(x), \quad (t, x) \in Q; \quad (A)$$

$$\frac{b^2(t, x)}{\Lambda_0(x)} \in L_\infty(Q), \quad \frac{b^2(t, x)}{\Lambda_0(x)} \leq K_{b,a}, \quad (t, x) \in Q; \quad (B)$$

$$c(t, x) \in L_\infty(Q), \quad |c(t, x)| \leq K_c, \quad (t, x) \in Q, \quad \gamma(t) \in L_2(0, T), \quad \|\gamma\|_{L_2(0, T)} \leq K_\gamma; \quad (C)$$

$$g(t, x) \in L_\infty(0, T; L_2(0, l)), \quad r(t, x) \in L_2(Q), \quad \sup_{0 \leq t \leq T} \|g(t, \cdot)\|_2 \leq K_g, \quad \|r\|_{L_2(Q)} \leq K_r; \quad (D)$$

$$u_0(x) \in L_2(0, l), \quad \|u_0\|_2 \leq M_0; \quad (E)$$

$$\omega(x) \in \overset{0}{W}_2^1(0, l), \quad \|\omega\|_2 \leq K_\omega, \quad \|\omega_x\|_2 \leq K_\omega^*; \quad (F)$$

$$\varphi(t) \in W_2^1(0, T), \quad \left| \int_0^l g(t, x) \omega(x) dx \right| \geq g_0 > 0, \quad \varphi(0) = \int_0^l u_0(x) \omega(x) dx. \quad (G)$$

В условиях (А)–(G) $a_0, a_1, a_2, g_0, K_\omega, K_\omega^* = \text{const} > 0, K_{b,a}, K_c, K_\gamma, K_r, M_0 = \text{const} \geq 0$.

Определение 1. Обобщенным решением обратной задачи (1)–(4) будем называть пару функций $\{u(t, x), p(t)\}$ таких, что $u(t, x) \in C(0, T; L_2(0, l)) \cap \bigcap_{s=1}^0 W_s^1(Q), s > 1, \sqrt{\Lambda_0(x)}u_x \in L_2(Q), p(t) \in L_2(0, t)$, для любой пробной функции $\Phi(t, x) \in C(0, T; L_2(0, l)) \cap \bigcap_{s=1}^0 W_s^1(Q), \Phi_t \in L_2(Q), \sqrt{\Lambda_0(x)}\Phi_x \in L_2(Q)$ и для любого $\tau \in (0, T]$ выполняется интегральное тождество

$$\begin{aligned} & \int_0^l u(\tau, x)\Phi(\tau, x)dx - \int_0^l u_0(x)\Phi(0, x)dx - \int_{Q_\tau} u(t, x)\Phi_t(t, x)dxdt + \int_{Q_\tau} a(t, x)u_x(t, x)\Phi_x(t, x)dxdt \\ & + \int_{Q_\tau} [b(t, x)u_x(t, x) + c(t, x)u(t, x) + \gamma(t)u(t, x)]\Phi(t, x)dxdt = \int_{Q_\tau} (p(t)g(t, x) + r(t, x))\Phi(t, x)dxdt, \end{aligned} \quad (7)$$

а также выполняется условие (4) для всех $t \in [0, T]$.

Исследование прямой задачи (1)–(3)

Рассмотрим прямую задачу (1)–(3), где функция $p(t) \in L_2(0, t)$ известна. Положим $f(t, x) = p(t)g(t, x) + r(t, x)$. В силу условия (D) имеем $f(t, x) \in L_2(Q)$. В этом разделе будем предполагать, что

$$\|f\|_{L_2(Q)} \leq K_f, \quad K_f = \text{const} > 0. \quad (8)$$

Решение $u(t, x)$ прямой задачи (1)–(3) будем понимать в смысле определения 1. В частности, функция $u(t, x)$ удовлетворяет интегральному тождеству (7) с $p(t)g(t, x) + r(t, x) = f(t, x)$.

Теорема 1. Пусть выполнены условия (А)–(С), (D) и (8). Тогда не существует двух различных обобщенных решений задачи (1)–(3).

Доказательство. Повторяя рассуждения, проведенные в [7] на стр. 166–169, получаем, что для обобщенного решения $u(t, x)$ задачи (1)–(3) справедливо равенство

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_0^l u^2(\tau, x)dx - \frac{1}{2} \int_0^l u_0^2(x)dx + \int_{Q_\tau} a(t, x)u_x^2 dxdt + \int_{Q_\tau} b(t, x)u_x u dxdt + \int_{Q_\tau} (c(t, x) + \gamma(t))u^2 dxdt = \\ & = \int_{Q_\tau} f(t, x)u dxdt, \quad \tau \in (0, T]. \end{aligned} \quad (9)$$

При выводе выражения (9) следует представить слагаемые

$$\int_{Q_\tau} a(t, x)u_x \Phi_x(t, x)dxdt \quad \text{и} \quad \int_{Q_\tau} b(t, x)u_x \Phi(t, x)dxdt$$

в интегральном тождестве (7) в виде

$$\int_{Q_\tau} \frac{a(t, x)}{\Lambda_0(x)} (\sqrt{\Lambda_0(x)}u_x) (\sqrt{\Lambda_0(x)}\Phi_x(t, x)) dxdt \quad \text{и} \quad \int_{Q_\tau} \frac{b(t, x)}{\sqrt{\Lambda_0(x)}} (\sqrt{\Lambda_0(x)}u_x) \Phi(t, x) dxdt,$$

соответственно, и учесть, что поскольку функция $\Lambda_0(x)$ не зависит от t , то $\sqrt{\Lambda_0(x)} \cdot \Phi_h(t, x) = (\sqrt{\Lambda_0(x)} \cdot \Phi(t, x))_h$,

где $\Phi_h(t, x)$ – усреднение по Стеклову функции $\Phi(t, x)$ по переменной t : $\Phi_h(t, x) = \frac{1}{h} \int_t^{t+h} \Phi(\tau, x) d\tau$.

Пусть существуют два обобщенных решения $u^{(1)}(t, x)$ и $u^{(2)}(t, x)$ задачи (1)–(3). Положим $v(t, x) = u^{(1)}(t, x) - u^{(2)}(t, x)$. Тогда в силу равенства (9), выписанного для $v(t, x)$, имеем

$$\frac{1}{2} \|v(\tau, \cdot)\|_2^2 + \int_{Q_\tau} a(t, x) v_x^2 dx dt + \int_{Q_\tau} b(t, x) v_x v dx dt + \int_{Q_\tau} c(t, x) v^2 dx dt + \int_{Q_\tau} \gamma(t) v^2 dx dt = 0.$$

В силу условий (A)–(C) и неравенства (6) получаем отсюда неравенство

$$\frac{1}{2} \|v(\tau, \cdot)\|_2^2 + \int_{Q_\tau} \Lambda_0(x) |v_x|^2 dx dt \leq \frac{\varepsilon}{2} \int_{Q_\tau} \Lambda_0(x) |v_x|^2 dx dt + \frac{K_{b,a}}{2\varepsilon} \int_{Q_\tau} v^2 dx dt + K_c \int_{Q_\tau} v^2 dx dt + \sqrt{\tau} K_\gamma \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|v(t, \cdot)\|_2^2.$$

Положим $\varepsilon = 1$. Тогда приходим к неравенству

$$\frac{1}{2} \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|v(t, \cdot)\|_2^2 + \frac{1}{2} \int_{Q_\tau} \Lambda_0(x) |v_x|^2 dx dt \leq \left(\frac{K_{b,a}}{2} \tau + K_c \tau + K_\gamma \sqrt{\tau} \right) \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|v(t, \cdot)\|_2^2. \quad (10)$$

Выбираем и фиксируем $\tau \equiv \tau_0$ такое, что

$$\frac{K_{b,a}}{2} \tau_0 + K_c \tau_0 + K_\gamma \sqrt{\tau_0} < \frac{1}{2}.$$

Тогда из выражения (10) следует, что $v(t, x) \equiv 0$ в Q_{τ_0} .

Повторяя проведенные рассуждения в прямоугольниках $[\tau_0, 2\tau_0] \times [0, l]$, $[2\tau_0, 3\tau_0] \times [0, l]$ и т.д., получаем, что $v(t, x) \equiv 0$ в Q , т.е. $u^{(1)}(t, x) = u^{(2)}(t, x)$ в Q . Теорема 1 доказана.

Теорема 2. Пусть выполнены условия (A)–(C), (D) и (8). Положим

$$q^* = \frac{2q}{q+1}. \quad (11)$$

Тогда существует обобщенное решение задачи (1)–(3) (в смысле определения 1) с $s = q^*$. Более того, $\Lambda_0 |u_x|^2 \in L_1(Q)$, справедлива оценка

$$\frac{1}{4} \sup_{0 \leq t \leq \tau_0} \|u(t, \cdot)\|_2^2 + \|\sqrt{\Lambda_0} u_x\|_{L_2(Q_{\tau_0})}^2 \leq \|u_0\|_2^2 + 2\tau_0 \|f\|_{L_2(Q_{\tau_0})}^2, \quad (12)$$

где τ_0 удовлетворяет условию

$$\left(\frac{1}{2} K_{b,a} + K_c \right) + K_\gamma \tau_0^{1/2} \leq \frac{1}{8}, \quad (13)$$

и оценка

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \|u(t, \cdot)\|_2^2 + \|\sqrt{\Lambda_0} u_x\|_{L_2(Q)}^2 + \|u_x\|_{L_{q^*}(Q)}^2 \leq C \left(\|u_0\|_2^2 + \|f\|_{L_2(Q)}^2 \right), \quad (14)$$

где $C = \text{const} > 0$ зависит от констант из условий (A)–(D), T и l .

Доказательство. При доказательстве теоремы использованы некоторые идеи из [8].

Положим $a^m(t, x) = a(t, x) + \frac{1}{m}$. Рассмотрим первую краевую задачу для уравнения

$$u_t^m - (a^m(t, x)u_x^m)_x + b(t, x)u_x^m + c(t, x)u^m + \gamma(t)u^m = f(t, x) \quad (15)$$

с краевыми условиями (2), (3). В силу [7, с. 189] такая задача имеет единственное обобщенное решение $u^m(t, x)$ в смысле определения 1, причем $u^m \in C(0, T; L_2(0, l)) \cap \overset{0}{W}_2^1(Q)$, и для него справедливо равенство (2.13) из [7, с. 168], которое в нашем случае имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|u^m(\tau, \cdot)\|_2^2 + \int_{Q_\tau} a^m(t, x) |u_x^m|^2 dx dt &= \frac{1}{2} \|u_0\|_2^2 - \int_{Q_\tau} b(t, x) u_x^m u^m dx dt - \\ &- \int_{Q_\tau} c(t, x) |u^m|^2 dx dt - \int_{Q_\tau} \gamma(t) |u^m|^2 dx dt + \int_{Q_\tau} f(t, x) u^m dx dt. \end{aligned} \quad (16)$$

Оценим второе слагаемое в правой части уравнения (16) следующим образом:

$$\begin{aligned} - \int_{Q_\tau} b(t, x) u_x^m u^m dx dt &= - \int_{Q_\tau} \frac{b(t, x)}{\sqrt{\Lambda_0(x)}} (\sqrt{\Lambda_0(x)} u_x^m) u^m dx dt \leq \frac{1}{2} \int_{Q_\tau} \Lambda_0(x) |u_x^m|^2 dx dt + \\ &+ \frac{1}{2} K_{b,a} \int_{Q_\tau} |u^m|^2 dx dt \leq \frac{1}{2} \int_{Q_\tau} \Lambda_0(x) |u_x^m|^2 dx dt + \frac{1}{2} K_{b,a} \tau \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|u^m(t, \cdot)\|_2^2. \end{aligned}$$

Оценивая остальные члены равенства (16) с использованием условий (A), (C) и неравенства (6), получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|u^m(\tau, \cdot)\|_2^2 + \frac{1}{2} \int_{Q_\tau} \Lambda_0(x) |u_x^m|^2 dx dt &\leq \\ &\leq \frac{1}{2} \|u_0\|_2^2 + \left(\frac{1}{2} K_{b,a} \tau + K_c \tau + K_\gamma \tau^{1/2} \right) \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|u^m(t, \cdot)\|_2^2 + \frac{\varepsilon}{2} \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|u^m(t, \cdot)\|_2^2 + \frac{1}{2\varepsilon} \tau \|f\|_{L_2(Q_\tau)}^2. \end{aligned}$$

Полагая здесь $\varepsilon = 1/2$, приходим к неравенству

$$\frac{1}{4} \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|u^m(t, \cdot)\|_2^2 + \frac{1}{2} \int_{Q_\tau} \Lambda_0(x) |u_x^m|^2 dx dt \leq \frac{1}{2} \|u_0\|_2^2 + \left(\frac{1}{2} K_{b,a} \tau + K_c \tau + K_\gamma \tau^{1/2} \right) \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|u^m(t, \cdot)\|_2^2 + \tau \|f\|_{L_2(Q_\tau)}^2. \quad (17)$$

Пусть $\tau = \tau_0$ удовлетворяет условию (13). Фиксируем такое τ_0 , тогда из равенства (17) следует оценка

$$\frac{1}{4} \sup_{0 \leq t \leq \tau_0} \|u^m(t, \cdot)\|_2^2 + \|\sqrt{\Lambda_0} u_x^m\|_{L_2(Q_{\tau_0})}^2 \leq \|u_0\|_2^2 + 2\tau_0 \|f\|_{L_2(Q_{\tau_0})}^2. \quad (18)$$

Повторяя предыдущие рассуждения в прямоугольниках $[\tau_0, 2\tau_0] \times [0, l]$, $[2\tau_0, 3\tau_0] \times [0, l]$ и т.д., приходим к равномерной по m оценке

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \|u^m(t, \cdot)\|_2^2 + \|\sqrt{\Lambda_0} u_x^m\|_{L_2(Q)}^2 \leq C_1 (\|u_0\|_2^2 + \|f\|_{L_2(Q)}^2). \quad (19)$$

В силу неравенства Гельдера и определения q^* в выражении (11) получаем также равномерную по m оценку

$$\|u_x^m\|_{L_{q^*}(Q)}^2 \leq C_2 (\|u_0\|_2^2 + \|f\|_{L_2(Q)}^2). \quad (20)$$

Константы C_1 и C_2 в (19) и (20) зависят от констант из условий (A)–(E), T, l , но не зависят от m .

В силу оценок (19) и (20) существуют функция $u(t, x) \in C(0, T; L_2(0, l)) \cap \bigcap_{q^*}^0 W^1_{q^*}(Q)$, $\sqrt{\Lambda_0(x)}u_x \in L_2(Q)$ и подпоследовательность $m_k \rightarrow \infty$ такие, что при $k \rightarrow \infty$

$$u^{m_k}(t, x) \rightharpoonup u(t, x) \text{ — слабо в } L_\infty(0, T; L_2(0, l)), \quad (21)$$

$$u_x^{m_k}(t, x) \rightharpoonup u_x(t, x) \text{ — слабо в } L_{q^*}(Q), \quad (22)$$

$$\sqrt{a^{m_k}(t, x)}u_x^{m_k}(t, x) \rightharpoonup \sqrt{a(t, x)}u_x^{m_k}(t, x) \text{ — слабо в } L_2(Q). \quad (23)$$

На основании выражений (21)–(23) можно сделать предельный переход при $k \rightarrow \infty$ в интегральном тождестве вида (7), записанном для функций $u^{m_k}(t, x)$ и с коэффициентом $a^{m_k}(t, x)$. В результате получим, что функция $u(t, x)$ удовлетворяет интегральному тождеству (7).

Для того, чтобы функция $u(t, x)$ была обобщенным решением задачи (1)–(3) осталось доказать, что $u(t, x) \in C(0, T; L_2(0, l))$. Этот факт доказывается повторением доказательства из [7, с. 185–189] с учетом того, что функция $\Lambda_0(x)$ не зависит от t , а следовательно, $\sqrt{\Lambda_0(x)} \cdot (u_x)_h = (\sqrt{\Lambda_0(x)} \cdot u_x)_h$, где, как и выше, $\Phi_h(t, x)$ – усреднение по Стеклову функции $\Phi(t, x)$ по переменной t .

Таким образом, установлено, что $u(t, x)$ – обобщенное решение задачи (1)–(3) в смысле определения 1 при $s = q^*$. Оценки (12) и (14) следуют из оценок (18)–(20) и предельных соотношений (21)–(23).

Теорема 2 доказана.

Исследование обратной задачи (1) – (4)

Будем использовать обозначения

$$G(t) = \int_0^l g(t, x)\omega(x)dx, R(t) = \int_0^l r(t, x)\omega(x)dx.$$

Тогда в силу условий (D) и (F) имеем $G(t) \in L_\infty(0, T)$, $R(t) \in L_2(0, T)$, $|G(t)| \geq g_0 > 0$.

Выведем операторное уравнение для нахождения неизвестной функции $p(t)$. Для этого в интегральном тождестве (7) положим $\Phi(t, x) = \chi(t)\omega(x)$, где $\chi(t) \in \overset{0}{W}{}^1_2(0, T)$. Тогда имеем

$$\begin{aligned} & - \int_0^T \left(\int_0^l u(t, x)\omega(x)dx \right) \chi_t dt + \int_0^T \left(\int_0^l a(t, x)u_x \omega_x(x)dx \right) \chi(t)dt + \int_0^T \left[\int_0^l (b(t, x)u_x + c(t, x)u)\omega(x)dx \right] \chi(t)dt + \\ & + \int_0^T \gamma(t) \left(\int_0^l u(t, x)\omega(x)dx \right) \chi(t)dt = \int_0^T p(t)G(t)\chi(t)dt + \int_0^T R(t)\chi(t)dt, \end{aligned}$$

откуда с учетом условия (4) и в силу произвольности $\chi(t) \in \overset{0}{W}{}^1_2(0, T)$ имеем:

$$\varphi'(t) + \gamma(t)\varphi(t) + \int_0^l a(t, x)u_x \omega_x(x)dx + \int_0^l (b(t, x)u_x + c(t, x)u)\omega(x)dx = p(t)G(t) + R(t). \quad (24)$$

Из выражения (24) с учетом условия (G) получаем равенство

$$p(t) = \frac{1}{G(t)} \left[\varphi'(t) + \gamma(t)\varphi(t) - R(t) + \int_0^l a(t, x) u_x \omega_x(x) dx + \int_0^l (b(t, x) u_x + c(t, x) u) \omega(x) dx \right]. \quad (25)$$

Введем оператор $\mathcal{A}(p): L_2(0, T) \rightarrow L_2(0, T)$ по формуле

$$\mathcal{A}(p)(t) = \frac{1}{G(t)} \left[\varphi'(t) + \gamma(t)\varphi(t) - R(t) + \int_0^l a(t, x) u_x \omega_x(x) dx + \int_0^l (b(t, x) u_x + c(t, x) u) \omega(x) dx \right]. \quad (26)$$

Тогда соотношение (25) перепишется в виде

$$p = \mathcal{A}(p). \quad (27)$$

Лемма 1. Пусть выполнены условия (A)–(G). Тогда операторное уравнение (27) эквивалентно обратной задаче (1)–(4) в следующем смысле. Если пара $\{u(x, t), p(t)\}$ является решением обратной задачи, то функция $p(t)$ – решение уравнения (27). Обратно, если $\hat{p}(t) \in L_2(0, T)$ является решением уравнения (27), а $\hat{u}(t, x)$ – решение прямой задачи (1)–(3) с выбранной функцией $\hat{p}(t)$ в правой части уравнения (1), то пара $\{\hat{u}(t, x), \hat{p}(t)\}$ является обобщенным решением задачи обратной задачи (1)–(4).

Доказательство. Первое утверждение леммы доказано выше при выводе соотношения (27).

Докажем второе утверждение. Пусть $\hat{p}(t) \in L_2(0, T)$ является решением уравнения (27), а $\hat{u}(t, x)$ – обобщенное решение прямой задачи (1)–(3) с данной функцией $\hat{p}(t)$ в правой части уравнения (1). Существование и единственность такого решения доказаны в теоремах 1 и 2.

Положим

$$\hat{\phi}(t) = \int_0^l \hat{u}(t, x) \omega(x) dx, \quad (28)$$

тогда $\hat{\phi}(t) \in W_{q^*}^1(0, T)$, где q^* определена в (11).

Повторяя рассуждения, проведенные при выводе соотношения (25), приходим к равенству

$$\hat{p}(t)G(t) = \hat{\phi}'(t) + \gamma(t)\hat{\phi}(t) - R(t) + \int_0^l a(t, x) \hat{u}_x \omega_x(x) dx + \int_0^l (b(t, x) \hat{u}_x + c(t, x) \hat{u}) \omega(x) dx. \quad (29)$$

Из условий (A)–(D), (F), (G) получаем, что $\hat{\phi}(t) \in W_2^1(0, T)$.

С другой стороны, поскольку $\hat{p}(t)$ – решение уравнения (27), то из определения оператора $\mathcal{A}(p)$ в (26) имеем

$$\hat{p}(t)G(t) = \varphi'(t) + \gamma(t)\varphi(t) - R(t) + \int_0^l a(t, x) \hat{u}_x \omega_x(x) dx + \int_0^l (b(t, x) \hat{u}_x + c(t, x) \hat{u}) \omega(x) dx. \quad (30)$$

Положим $\psi(t) = \varphi(t) - \hat{\phi}(t) \in W_2^1(0, T)$. Вычитая (29) из (30) и учитывая условие согласования в (G), получаем, что $\psi(t)$ является на $[0, T]$ обобщенным решением задачи

$$\psi' + \gamma(t)\psi = 0, \quad \psi(0) = 0.$$

В силу известной леммы Гронуолла (см., например, [7, с. 112]) имеем отсюда, что $\psi(t) \equiv 0$ на $[0, T]$, т.е. $\hat{\phi}(t) = \phi(t)$ на $[0, T]$, а следовательно, пара $\{\hat{u}(t, x), \hat{p}(t)\}$ есть обобщенное решение обратной задачи (1)–(4). Лемма доказана.

Теорема 3. Пусть выполнены условия (A)–(G). Тогда существует обобщенное решение обратной задачи (1)–(4) и оно единственно.

Доказательство. Покажем, что оператор, заданный формулой (26), является сжимающим оператором в $L_2(0, \tau)$ при некотором малом $\tau \in (0, T]$.

Пусть $p^{(1)}(t), p^{(2)}(t) \in L_2(0, T)$. Пусть $u^{(1)}(t, x)$ и $u^{(2)}(t, x)$ – соответствующие решения прямой задачи (1)–(3). Положим $v(t, x) = u^{(1)}(t, x) - u^{(2)}(t, x)$, $\sigma(t) = p^{(1)}(t) - p^{(2)}(t)$. Тогда пара $\{v(t, x), \sigma(t)\}$ удовлетворяет соотношениям

$$v_t - (a(t, x)v_x)_x + b(t, x)v_x + c(t, x)v + \gamma(t)v = \sigma(t)g(t, x), \quad (t, x) \in Q, \quad (31)$$

$$v(0, x) = 0, \quad x \in [0, l], \quad (32)$$

$$v(t, 0) = v(t, l) = 0, \quad t \in [0, T] \quad (33)$$

в смысле определения 1.

В силу определения оператора $\mathcal{A}$ в (26) и условий (A)–(G) имеем для любого $\tau \in [0, T]$:

$$\begin{aligned} \|\mathcal{A}(p^{(1)}) - \mathcal{A}(p^{(2)})\|_{L_2(0, \tau)}^2 &\leq \frac{3}{g_0^2} \left[\left(\int_{Q_\tau} \frac{a(t, x)}{\Lambda_0(x)} \sqrt{\Lambda_0(x)} v_x \sqrt{\Lambda_0(x)} \omega_x dx dt \right)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \left(\int_{Q_\tau} \frac{b(t, x)}{\sqrt{\Lambda_0(x)}} \sqrt{\Lambda_0(x)} v_x \omega dx dt \right)^2 + \left(\int_{Q_\tau} c(t, x) v \omega dx dt \right)^2 \right] \leq \\ &\leq \frac{4}{g_0^2} \left\{ \left[(a_2 K_\omega^*)^2 a_0 + K_{b,a} K_\omega^2 \right] \int_{Q_\tau} \Lambda_0(x) |v_x|^2 dx dt + K_c^2 K_\omega^2 \tau \sup_{0 \leq t \leq \tau_0} \int_0^l v^2(t, x) dx \right\}. \end{aligned} \quad (34)$$

Пусть $\tau \equiv \tau_0$ удовлетворяет условию (13). Поскольку $v(t, x)$ удовлетворяет соотношениям (31)–(33), то в силу оценки (12), примененной к функции $v(t, x)$, имеем

$$\frac{1}{4} \sup_{0 \leq t \leq \tau_0} \|v(t, \cdot)\|_{L_2(\Omega)}^2 + \|\sqrt{\Lambda_0} v_x\|_{L_2(Q_{\tau_0})}^2 \leq 2\tau_0 K_g^{*2} \int_0^{\tau_0} \sigma^2(t) dt. \quad (35)$$

Подставляя выражение (35) в (34), получаем неравенство

$$\|\mathcal{A}(p^{(1)}) - \mathcal{A}(p^{(2)})\|_{L_2(0, \tau_0)}^2 \leq \frac{4}{g_0^2} \left[(a_2 K_\omega^*)^2 a_0 + (K_{b,a} + K_c^2 \tau_0) K_\omega^2 \right] \times 8\tau_0 K_g^{*2} \int_0^{\tau_0} \sigma^2(t) dt. \quad (36)$$

Пусть τ_0 дополнительно к условию (13) удовлетворяет еще неравенству

$$\frac{32}{g_0^2} K_g^{*2} \left[a_0 a_2^2 K_\omega^{*2} + (K_{b,a} + K_c^2 \tau_0) K_\omega^2 \right] \tau_0 \leq \frac{1}{2}.$$

Тогда из неравенства (36) следует, что

$$\|\mathcal{A}(p^{(1)}) - \mathcal{A}(p^{(2)})\|_{L_2(0, \tau_0)}^2 \leq \frac{1}{2} \|p^{(1)} - p^{(2)}\|_{L_2(0, \tau_0)}^2.$$

Последнее неравенство означает, что оператор $\mathcal{A}$ является сжимающим в $L_2(0, \tau_0)$, а следовательно, уравнение (27) имеет единственное решение $p(t) \in L_2(0, \tau_0)$.

Тогда в силу леммы 1 обратная задача (1)–(4) однозначно разрешима в цилиндре Q_{τ_0} . Поскольку τ_0 фиксировано, то повторяя предыдущие рассуждения в прямоугольниках $[\tau_0, 2\tau_0] \times [0, l], [2\tau_0, 3\tau_0] \times [0, l]$ и т.д., мы получаем однозначную разрешимость обратной задачи (1)–(4) во всем прямоугольнике Q .

Теорема 3 доказана.

Заключительные выводы

В работе доказана однозначная разрешимость обратной задачи определения неизвестного источника в вырождающемся параболическом уравнении с дивергентной главной частью, причем вырождение допускается в бесконечном числе точек прямоугольника, где рассматривается задача. Ранее для уравнений с дивергентной главной частью вырождение допускалось в заранее фиксированных точках, как правило, на границе области.

Финансирование

Работа выполнена при поддержке Программы Приоритет-2030 НИЯУ МИФИ

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

В.Л. Камынин – постановка задачи, доказательство утверждений, обсуждение результатов.

О.В. Нагорнов – доказательство утверждений, обсуждение результатов.

Список литературы

1. Cannon J.R., Lin Y. Determination of a parameter $p(t)$ in some quasilinear parabolic differential equations // Inverse Problems, 1988. V. 4. № 1. P. 35–45.
2. Cannon J.R., Lin Y. Determination of a parameter $p(t)$ in Holder classes for some semilinear parabolic differential equations // Inverse Problems, 1988. V. 4. № 3. P. 596–606.
3. Prilepko A.I., Orlovsky D.G., Vasin I.A. Methods for solving inverse problems in mathematical physics. New York: Marcel Dekker, 2000. 709 p.
4. Камынин В.Л. О корректной разрешимости обратной задачи определения правой части в вырождающемся параболическом уравнении с условием интегрального наблюдения // Математические заметки, 2015. Т. 98. № 5. С. 710–724.
5. Камынин В.Л. Обратная задача определения правой части в вырождающемся параболическом уравнении с неограниченными коэффициентами // Журнал вычислит. матем. и матем. Физики, 2017. Т. 57. № 5. С. 832–841.
6. Kamynin V.L. Unique solvability of direct and inverse problems for degenerate parabolic equations in multidimensional case // Journal of math. Sciences, 2023. V. 269. № 1. С. 36–51.
7. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уралцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М.: Наука, 1967, 736 с.
8. Крузжков С.Н. Квазилинейные параболические уравнения и системы с двумя независимыми переменными // Труды сем. им. И. Г. Петровского. 1979. Вып. 5. С. 217–272.

Inverse problem of determining the source function in a degenerate parabolic equation with a divergent principal part on a plane

V. L. Kamynin , O. V. Nagornov 

National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, 115409, Russia

 vlkamynin2008@yandex.ru

 Nagornov@yandex.ru

Received September 3, 2025; revised September 22, 2025; accepted September 23, 2025

We study the linear inverse problem of determining the unknown, time-dependent right-hand side (source function) in a one-dimensional parabolic equation with a weakly degenerate principal part defined in divergence form. The additional observation condition is specified in integral form. Sufficient conditions are established under which a solution to the inverse problem under consideration exists and is unique. No restrictions are imposed on the value of T or the size of the domain, i.e. the proven theorems are of a global nature. The solution is understood in the generalized sense according to Sobolev; in particular, the unknown source function is sought in the space $L_2(0, T)$. The equation's coefficients may depend on both the time and spatial variables. Degeneracy of the equation is also permitted in both the time and spatial variables. Proofs of the existence and uniqueness theorems for the solution of the inverse problem are based on the study of the unique solvability of the corresponding direct problem, which is also new and of independent interest. When studying the unique solvability of the inverse problem, it is reduced to studying the solvability of a certain operator equation, using general theorems of functional analysis.

Keywords: inverse problems of determining the source function, degenerate parabolic equations, integral observation.

References

1. Cannon J.R., Lin Y. Determination of a parameter $p(t)$ in some quasilinear parabolic differential equations. Inverse Problems. 1988. Vol. 4. No 1. Pp. 35–45.
2. Cannon J.R., Lin Y. Determination of a parameter $p(t)$ in Holder classes for some semilinear parabolic differential equations. Inverse Problems. 1988. Vol. 4. No 3. Pp. 596–606
3. Prilepko A.I., Orlovsky D.G., Vasin I.A. Methods for solving inverse problems in mathematical physics. New York: Marcel Dekker, 2000. 709 p.
4. Kamynin V.L. O korrektnoi razreshimosti obratnoi zadachi v vyrozhdaiushemsya parabolicheskom uravnenii s usloviem integral'nogo nablyudeniya. [On the solvability of the inverse problem for determining the right-hand side of a degenerate parabolic equation with integral observation]. Matematicheskie zametki, 2015. Vol. 98. No. 5. Pp. 710–724 (in Russian).
5. Kamynin V.L. Obratnaya zadacha opredeleniya pravoï chasti v vyrozhdaiushemsya parabolicheskom uravnenii s neogranichennymi koeffitsientami [Inverse problem of determining the right-hand side in a degenerating parabolic equation with unbounded coefficients]. Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki, 2017. Vol. 57. No. 5. Pp. 832–841 (in Russian).
6. Kamynin V.L. Unique solvability of direct and inverse problems for degenerate parabolic equations in multidimensional case. Journal of math. Sciences, 2023. Vol. 269. No. 1. Pp. 36–51.
7. Ladyzhenskaya O.A., Solonnikov V.A., Ural'tseva N.N. Lineinye i kvazilineinye uravneniya parabolicheskogo tipa. [Linear and quasilinear parabolic equations of parabolic type]. Moscow, Nauka Publ. 1967, 736 p. (in Russian).
8. Kruzhkov S.N. Kvazilineinye parabolicheskie uravneniya i sistemy s dvumya nezavisimymi peremennymi [Quasilinear parabolic equations and systems with two independent variables]. Trudy Seminara im. I.G. Petrovskogo, 1979. No. 5. Pp. 217–272 (in Russian).

УДК 517.958

О свойствах решений обратных задач восстановления палеотемператур

© 2025 г. О. В. Нагорнов, С. А. Тюфлин, В. Л. Камынин

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

Изучение прошлых температур на поверхности Земли представляет важную задачу для предсказания климатических изменений. Систематические инструментальные измерения температур начались менее двух столетий назад. Таким образом, не прямые оценки прошлых температур представляют главную информацию по прошлому климату. Измеренные температуры в скважинах могут быть использованы, чтобы реконструировать прошлые температуры на поверхности Земли. В работе рассматриваются обратные задачи реконструкции прошлых температур по данным измерений температурного профиля в скважинах горных пород и ледников. В общем случае данная задача не обладает свойством единственности и устойчивости. Различные реконструкции прошлых температур, проведенные ранее различными авторами, не учитывают это. В данной работе доказывается, что в том случае, когда изменения температуры на поверхности в прошлом можно представить в виде конечного отрезка ряда Фурье, решение обратной задачи обладает единственностью и устойчивостью.

Ключевые слова: обратные задачи, реконструкция климата, тепло- и массоперенос.

Введение

Исследование прошлых температур поверхности Земли является важной задачей с точки зрения изучения и прогноза изменений климата. Систематические инструментальные измерения температур начались лишь два столетия назад. Таким образом, для оценки прошлых изменений температур необходимо использовать косвенные источники изменений климата. Так, одним из таких источников о прошлом климате являются данные по температурным измерениям в скважинах.

Распределение температур ниже земной поверхности зависит, в основном, от двух процессов [1–3]. Первый – это процесс изменения температуры на поверхности. Второй – исходящий из недр Земли тепловой поток, который отражает длительные устоявшиеся геологические процессы. Изменения температуры на поверхности происходят на значительно меньших масштабах времени, чем геологические процессы. Таким образом, можно сказать, что измеренный температурный профиль в скважинах содержит в себе информацию о прошлых изменениях климата. Сезонные колебания температуры заметны лишь в приповерхностной области на глубинах до 10–20 м, в то время как длительные колебания фиксируются на глубинах в несколько сотен метров и более.

Процесс распространения тепла описывается одномерным уравнением теплопроводности в горных породах и одномерным уравнением теплопроводности с учетом вертикальной адвекции годовых слоев в ледниках [1–4]. Задача реконструкции прошлых температур представляет собой обратную задачу, содержащую условие переопределения. Таким условием является измеренный температурный профиль в скважине.

Хорошо известные методы реконструкции прошлых температур по профилю температуры в скважинах следующие: метод Монте-Карло [5], метод наименьших квадратов [6] и метод сингулярного раз-

✉ О.В. Нагорнов: nagornov@yandex.ru

Поступила в редакцию: 15.08.2025

После доработки: 04.10.2025

Принята к публикации: 07.10.2025

EDN LOCBGN

ложения [7], [8]. Этими методами были проведены как локальные реконструкции прошлых температур, так и глобальные [5], [9–11]. С математической точки зрения эти реконструкции могут не обладать свойствами единственности и устойчивости.

Постановка задачи

Математическая постановка обратной задачи для ледников включает в себя уравнение теплопроводности с учетом вертикальной адвекции годовых слоев в леднике, начальное и граничное условия и условие переопределения. Условием переопределения является измеренный температурный профиль в скважине $\chi(z)$, где z – вертикальная координата. Тогда обратная задача нахождения температуры на поверхности в прошлом есть решение следующей одномерной обратной задачи:

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} + w(z) \frac{\partial T}{\partial z} = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, & 0 < t < t_f, \quad 0 < z < H, \\ T(0, t) = U_s + \mu(t), & 0 < t \leq t_f, \\ -k \cdot \frac{\partial T}{\partial z}(H, t) = q, & 0 < t \leq t_f, \\ T(z, 0) = U(z), & 0 < z < H, \\ T(z, t_f) = \chi(z), & 0 < z < H. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь H – глубина ледника; a^2 – коэффициент температуропроводности; k – коэффициент теплопроводности; $w(z)$ – скорость вертикальной адвекции годовых слоев в леднике; q – геотермический тепловой поток у основания ледника; $U(z)$ – стационарный профиль температуры, связанный с этим потоком. U_s – начальная температура на поверхности, характеризующая среднюю температуру, которая была на поверхности в прошлом; $\mu(t)$ – изменения температуры на поверхности относительно ее начального значения U_s в момент времени $t = 0$ ($\mu(0) = 0$) до времени измерения температурного профиля в скважине t_f .

Представим температурный профиль в скважине $T(z, t)$ в виде суперпозиции двух температурных профилей: $U(z)$, стационарного температурного профиля, связанного с геотермическим потоком Земли, и $V(z, t)$, остаточного температурного профиля, связанного с изменениями температуры на поверхности:

$$T(z, t) = U(z) + V(z, t). \quad (2)$$

Тогда стационарный температурный профиль $U(z)$ является решением следующей задачи:

$$\begin{cases} a^2 \frac{d^2 U}{dz^2} - w(z) \frac{dU}{dz} = 0, & 0 < z < H, \\ U(0) = U_s, \\ -k \frac{dU}{dz}(H) = q. \end{cases} \quad (3)$$

Обозначим $\theta(z) = \chi(z) - U(z)$ как отклонения от стационарного температурного профиля в измеренном температурном профиле, связанные с изменениями температуры на поверхности. Тогда нахождение изменений температуры на поверхности в прошлом сводится к решению следующей обратной задачи:

$$\begin{cases} \frac{\partial V}{\partial t} + w(z) \frac{\partial V}{\partial z} = a^2 \frac{\partial^2 V}{\partial z^2}, & 0 < t < t_f, \quad 0 < z < H, \\ V(0, t) = \mu(t), & 0 < t \leq t_f, \\ \frac{\partial V}{\partial z}(H, t) = 0, & 0 < t \leq t_f, \\ V(z, 0) = 0, & 0 < z < H, \\ V(z, t_f) = \theta(z), & 0 < z < H. \end{cases} \quad (4)$$

Исследование задачи

Ранее было показано, что обратная задача (4) в общем случае не имеет единственного решения [12].

Предположим, что $\mu(t) = \sum_{k=-m}^m \mu_k \cdot \exp\left(i2\pi k \frac{t}{t_f}\right)$ – конечный отрезок ряда Фурье. Покажем, что в этом случае можно установить единственность определения $\mu(t)$.

Представим $V(z, t)$ из задачи (4) в виде $V(z, t) = \mu(t) + W(z, t)$, тогда задачу нахождения изменений температуры на поверхности в прошлом можно представить в следующем виде:

$$\begin{cases} W_t + w(z)W_z + f(t) = a^2 W_{zz}, & 0 < t < t_f, \quad 0 < z < H, \\ W(0, t) = 0, & 0 < t \leq t_f, \\ W_z(H, t) = 0, & 0 < t \leq t_f, \\ W(z, 0) = 0, & 0 < z < H, \\ W(z, t_f) = s(z), & 0 < z < H. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь $f(t) = \mu'(t)$ и $s(z) = \theta(z) - \mu(t_f)$. Так как $\mu(t)$ – конечный отрезок ряда Фурье, $f(t)$ также является конечным отрезком ряда Фурье, $f(t) = \sum_{k=-m}^m f_k \cdot \exp\left(i2\pi k \frac{t}{t_f}\right)$.

Так как $f(t) = \mu'(t)$; $\mu(0) = 0$ то функция $\mu(t)$ находится однозначно для $f(t) \in \mathbb{C}[0, t_f]$. Таким образом, установив единственность определения $f(t)$, можно установить единственность определения $\mu(t)$.

Для доказательства единственности решения задачи (5) нужно установить, что если $s(z) = 0$, то $W(z, t) \equiv 0$ и $f(t) \equiv 0$.

Решение задачи (5) дается формулой:

$$W(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} I_n e_n(z) \int_0^t e^{-\lambda_n(t-\tau)} \cdot f(\tau) d\tau. \quad (6)$$

Здесь $e_n(z)$ и λ_n – собственные функции и собственные значения соответствующей задачи Штурма – Лиувилля:

$$\begin{cases} a^2 \frac{d^2 Z}{dz^2}(z) - w(z) \frac{dZ}{dz}(z) + \lambda Z(z) = 0, & 0 < z < H; \\ Z(0) = \frac{dZ}{dz}(H) = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Известно, что $\{e_n(z)\}_{n=1}^{\infty}$ – полная ортонормированная система, $\lambda_n \in \mathbb{R}$, $\lambda_n \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$. Из условия $W(z, t_f) = 0$ получим, что $\forall n \in \mathbb{N}$: $I_n \int_0^{t_f} e^{-\lambda_n(t_f-\tau)} \cdot f(\tau) d\tau = 0$. Здесь $I_n = -\int_0^H e^{z^2/2} \cdot e_n(z) dz \neq 0$ на некоторой последовательности номеров согласно следующей лемме.

Лемма

Пусть $\{e_n(z)\}_{n=1}^{\infty}$ и $\{\lambda_n\}_{n=1}^{\infty}$ – собственные функции и собственные значения задачи Штурма – Лиувилля.

Тогда существует такая подпоследовательность $\{k_n\}$, что $I_{k_n} = -\int_0^H e^{z^2/2} \cdot e_{k_n}(z) dz \neq 0$ ($\forall k_n$).

Доказательство

Предположим противное. Следовательно $\exists N \in \mathbb{N}$: $I_n = 0$, $\forall n \geq N$, т.е. функция $\psi(z) = e^{z^2/2}$ ортогональна всем функциям $e_n(z)$ с номерами $n \geq N$. Так как $\{e_n(z)\}_{n=1}^{\infty}$ – ортонормированный базис в $L_2(0, H)$, получим, что $\psi(z) = \sum_{n=1}^{N-1} I_n \cdot e_n(z)$. Но $\psi(0) = 1$, а все $e_n(0) = 0$. Следовательно, получаем противоречие, и лемма доказана.

Таким образом, целая функция $F(\lambda) = \int_0^{t_f} e^{\lambda\tau} \cdot f(\tau) d\tau$ имеет бесконечное число нулей. В случае, когда $f(t)$ – конечный отрезок ряда Фурье, это возможно лишь при $f(t) \equiv 0$. Следовательно, и $\mu(t) \equiv 0$. Таким образом, единственность установлена.

Покажем, что такое решение также обладает свойством устойчивости. Пусть имеются два решения задачи (5) $W_1(z, t), f_1(t)$ и $W_2(z, t), f_2(t)$, отвечающие близким условиям переопределения $s_1(z)$ и $s_2(z)$. Покажем, что эти решения также близки для случая, когда $f(t)$ является конечным отрезком ряда Фурье.

Из формулы (6) и условия переопределения $W(z, t_f) = s(z)$ следует, что:

$$s(z) = \int_0^{t_f} K(z, \tau) f(\tau) d\tau. \quad (8)$$

Здесь ядро $K(z, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} I_n e_n(z) e^{-\lambda_n(t_f-\tau)}$.

Уравнение (8) представляет из себя уравнение Фредгольма первого рода. Это классическая некорректно поставленная задача. Если $f(t)$ – конечный отрезок ряда Фурье, то для уравнения (8) было установлено свойство единственности, т.е. из условия $s(z) = 0$, $z \in [0, H]$ следует, что $f(t) = 0$, $t \in [0, t_f]$.

Так как $\{e_n(z)\}_{n=1}^{\infty}$ – ортонормированный базис в $L_2(0, H)$, то для случая $f(t) = \sum_{k=-m}^m f_k \cdot \exp\left(i2\pi k \frac{t}{t_f}\right)$

уравнение (8) эквивалентно следующей системе линейных уравнений:

$$s_n = I_n \sum_{k=-m}^m f_k \cdot \int_0^{t_f} e^{-\lambda_n(t_f-\tau)} e^{i2\pi k \frac{\tau}{t_f}} d\tau, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

где $s_n = \frac{1}{\|e_n(z)\|^2} \int_0^H s(z) e_n(z) dz$; неизвестными являются f_k , $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm m$.

Число уравнений бесконечно; число неизвестных $2m + 1$, следовательно, система в общем случае при произвольных s_n решения не имеет. Таким образом, исследуемая задача сводится к решению СЛАУ вида:

$$\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{s}, \text{ где } \mathbf{f} = \begin{bmatrix} f_{-m} \\ f_{-m+1} \\ \vdots \\ f_0 \\ \vdots \\ f_m \end{bmatrix}; \mathbf{s} = \begin{bmatrix} s_1 \\ \vdots \\ s_n \end{bmatrix}; \mathbf{A} = (\alpha_{pq})_{p=1,2,\dots; q=1,2,\dots,2m+1}, \alpha_{pq} = I_p \int_0^{t_f} e^{-\lambda_p(t_f-\tau)} e^{i2\pi q \frac{\tau}{t_f}} d\tau.$$

Для исследуемой задачи доказана теорема единственности. Поэтому однородная задача имеет только нулевое решение. Докажем, что в этом случае есть и устойчивость в следующем смысле. Пусть имеется два решения $\mathbf{f}^{(1)}$ и $\mathbf{f}^{(2)}$, отвечающие таким столбцам $\mathbf{s}^{(1)}$ и $\mathbf{s}^{(2)}$, что $\mathbf{s}^{(1)}$ и $\mathbf{s}^{(2)}$ близки по норме $\|\mathbf{s}^{(1)} - \mathbf{s}^{(2)}\| = \sup_{i \in N} |s_i^{(1)} - s_i^{(2)}|$, то и соответствующие решения близки по норме.

Рассмотрим линейный оператор $A: R^n \rightarrow C_0$. Здесь C_0 – пространство числовых последовательностей $(s_1, \dots, s_n, \dots)$ сходящихся к нулю (так как коэффициенты Фурье стремятся к нулю), с матрицей A в некотором базисе. Найдем $\text{Im}A$ – образ этого оператора.

Утверждение

Пусть $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$ – какой-либо базис R_n . Тогда векторы $A\mathbf{e}_1, \dots, A\mathbf{e}_n$ образуют базис в $\text{Im}A$.

Доказательство

Возьмем произвольный вектор $\mathbf{z} \in \text{Im}A$. По определению $\text{Im}A \exists \mathbf{x} \in R^n$ такой, что $A\mathbf{x} = \mathbf{z}$.

Разложим вектор $\mathbf{x}$ по базису $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$: $\mathbf{x} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + \dots + x_n\mathbf{e}_n$. Тогда в силу линейности оператора A : $\mathbf{z} = A\mathbf{x} = x_1A\mathbf{e}_1 + x_2A\mathbf{e}_2 + \dots + x_nA\mathbf{e}_n$. Следовательно, разложение существует.

Докажем единственность такого разложения, т.е. линейную независимость элементов $A\mathbf{e}_1, \dots, A\mathbf{e}_n$.

Если $\alpha_1A\mathbf{e}_1 + \alpha_2A\mathbf{e}_2 + \dots + \alpha_nA\mathbf{e}_n = 0$, тогда в силу линейности получим $A(\alpha_1\mathbf{e}_1 + \alpha_2\mathbf{e}_2 + \dots + \alpha_n\mathbf{e}_n) = 0$. Так как ядро оператора – нулевое, то $\alpha_1\mathbf{e}_1 + \alpha_2\mathbf{e}_2 + \dots + \alpha_n\mathbf{e}_n = 0$. Отсюда в силу линейной независимости $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$ следует, что $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_n = 0$. Утверждение доказано.

Следствие

$\text{Im}A$ – конечномерное (n -мерное) подпространство C_0 .

Линейный оператор A действует из R^n в $V_n = \text{Im}A$ и имеет нулевое ядро. Следовательно, A имеет обратный оператор $A^{-1}: V_n \rightarrow R^n$, A^{-1} – линейный ограниченный оператор.

Если $A\mathbf{f}^{(l)} = \mathbf{s}^{(l)}$, $l = 1, 2$, то $\mathbf{f}^{(l)} = A^{-1}\mathbf{s}^{(l)}$, $l = 1, 2$. Таким образом, $\mathbf{f}^{(2)} - \mathbf{f}^{(1)} = A^{-1}(\mathbf{s}^{(2)} - \mathbf{s}^{(1)})$, и справедлива оценка устойчивости обратной задачи $\|\mathbf{f}^{(2)} - \mathbf{f}^{(1)}\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|\mathbf{s}^{(2)} - \mathbf{s}^{(1)}\|$ в силу ограниченности A^{-1} .

Таким образом, если для двух «близких» переопределений существуют решения обратной задачи в виде отрезка ряда Фурье, то эти решения «близки». Следовательно, в данном случае устойчивость восстановления температуры на поверхности в прошлом доказана.

Заключение

На практике измеренные температуры в скважинах содержат непрерывный набор гармоник. Это связано с ошибками измерений и неизвестной природой климатических изменений. Таким образом, в общем случае задача реконструкции прошлых температур не обладает свойством единственности и устойчивости.

Фактически все предыдущие реконструкции прошлых температур поверхности неявно предполагали, что восстановленные температуры поверхности могут быть представлены конечным набором гармоник. В этих случаях амплитуды гармоник могут быть найдены, а решения единственны и устойчивы.

Финансирование

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации и выполнена по теме государственного задания FSWU-2023-0031.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

О.В. Нагорнов – постановка задачи, разработка математической модели, участие в проведении исследования и обсуждения результатов;

С.А. Тюфлин – участие в постановке задачи и разработке математической модели, проведение вычислений, анализ результатов;

В.Л. Камынин – участие в проведении исследования и обсуждения результатов.

Список литературы

1. Jones P.D., Mann M.E. Climate over past millennia // *Reviews of Geophysics*, 2004. V. 42. RG2002.
2. Paterson W.S.B. The Physics of Glaciers, 3rd ed. Butterworth–Heinemann, Burlington, 1994. 496 p.
3. Нагорнов О.В., Тюфлин С.А., Коновалов Ю.В., Костин А.Б. Обратные задачи палеотермометрии. М.: МИФИ, 2008. 176 с.
4. Kotlyakov V.M., Arkhipov S.M., Henderson K.A., Nagornov O.V. Deep drilling of glaciers in Eurasian Arctic as a source of paleoclimatic records // *Quaternary Science Reviews*, 2004. V. 23. P. 1371–1390.
5. Dahl-Jensen D., Mosegaard K., Gundestrup N., Clow G.D., Johnsen S.J., Hansen A.W., Balling N. Past temperatures directly from the Greenland Ice Sheet // *Science*, 1998. V. 282. P. 268–271.
6. Shen P.Y., Beck A.E. Least squares inversion of borehole temperature measurements in functional space // *Journal of Geophysical Research*, 1991. V. 96. P. 19965–19979.
7. Beltrami H., Cheng L.Z., Mareschal J.C. Simultaneous inversion of borehole temperature data for past climate determination // *Geophysical Journal International*, 1997. V. 129. P. 311–318.
8. Beltrami H., Matharoo G., Tarasov L., Rath V., Smerdon J.E. Numerical studies on the Impact of the Last Glacial Cycle on recent borehole temperature profiles: implications for terrestrial energy balance // *Climate of the Past*, 2014. V. 10. P. 1693–1706.
9. Harris R.N., Chapman D.S. Geothermics and climate change: 1. Analysis of borehole temperatures with emphasis on resolving power // *Journal of Geophysical Research*, 1998. V. 103(B4). P. 7360–7370.
10. Pollack H.N., Demezhko D.Yu., Duchkov A.D., Golovanova I.V., Huang S., Shchapov V.A., Smerdon J.E. Surface temperature trends in Russia over the past five centuries reconstructed from borehole temperatures // *Journal of Geophysical Research*, 2003. V. 108(B4). P. 2-1-2-12.
11. Liu J., Zhang T., Clow G.D., Jafarov E. Application of Tikhonov regularization to reconstruct past climate record from borehole temperature // *Inverse Problems in Science and Engineering*, 2021. V. 29. Iss. 3. P. 3167–3189.
12. Нагорнов О.В., Тюфлин С.А. Об интерпретации результатов палеорекострукций по данным скважинных температурных измерений в ледниках // *Вестник НИЯУ МИФИ*, 2018. Т. 7. № 2. С. 170–174.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 5, pp. 424–430

Properties of the inverse problem solutions for paleotemperature reconstructions

O. V. Nagornov[✉], S. A. Tyufin, V. L. Kamynin

National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409, Russia

[✉] nagornov@yandex.ru

Received August 15, 2025; revised October 04, 2025; accepted October 7, 2025

The studies of the past temperatures at the Earth surface is important problem for prediction of the climate changes. The systematic instrumental temperature measurements took place no more than two centuries. Thus, indirect estimations of the past temperatures present main information on the past

climate. It is considered that the measured temperatures in the boreholes can be used to reconstruct the past surface temperatures at the Earth. The inverse problem on the past surface temperature reconstruction based on the measured borehole temperature in glaciers and rocks is studied. In common case the solution of this problem is not unique and stable. There were many such reconstructions, however, the properties of such solutions have not been derived. We find out that the solution of this problem is not unique and stable. Unfortunately, various previous reconstructions do not take into account these properties. We prove in this paper that the uniqueness and stability properties take place for the inverse problems that assume solution in the form of the finite segments of the Fourier series.

Keywords: inverse problems, climate reconstruction, heat and mass transfer.

References

1. Jones P.D., Mann M.E. Climate over past millennia. *Reviews of Geophysics*, 2004. Vol. 42. RG2002.
2. Paterson W.S.B. *The Physics of Glaciers*, 3rd ed. Butterworth–Heinemann, Burlington, 1994. 496 p.
3. Nagornov O.V., Tyuflyin S.A., Kononov Yu.V., Kostin A.B. Obratnyye zadachi paleotermometrii [Inverse problems of paleothermometry]. Moscow. MEPhI Publ., 2008. 176 p.
4. Kotlyakov V.M., Arkhipov S.M., Henderson K.A., Nagornov O.V. Deep drilling of glaciers in Eurasian Arctic as a source of paleoclimatic records. *Quaternary Science Reviews*, 2004. Vol. 23. Pp. 1371–1390.
5. Dahl-Jensen D., Mosegaard K., Gundestrup N., Clow G.D., Johnsen S.J., Hansen A.W., Balling N. Past temperatures directly from the Greenland Ice Sheet. *Science*, 1998. Vol. 282. Pp. 268–271.
6. Shen P.Y., Beck A.E. Least squares inversion of borehole temperature measurements in functional space. *Journal of Geophysical Research*, 1991. Vol. 96. Pp. 19965–19979.
7. Beltrami H., Cheng L.Z., Mareschal J.C. Simultaneous inversion of borehole temperature data for past climate determination. *Geophysical Journal International*, 1997. Vol. 129. Pp. 311–318.
8. Beltrami H., Matharoo G., Tarasov L., Rath V., Smerdon J.E. Numerical studies on the Impact of the Last Glacial Cycle on recent borehole temperature profiles: implications for terrestrial energy balance. *Climate of the Past*, 2014. Vol. 10. Pp. 1693–1706.
9. Harris R.N., Chapman D.S. Geothermics and climate change: 1. Analysis of borehole temperatures with emphasis on resolving power. *Journal of Geophysical Research*, 1998. Vol. 103(B4). Pp. 7360–7370.
10. Pollack H.N., Demezhko D.Yu., Duchkov A.D., Golovanova I.V., Huang S., Shchapov V.A., Smerdon J.E. Surface temperature trends in Russia over the past five centuries reconstructed from borehole temperatures. *Journal of Geophysical Research*, 2003. Vol. 108(B4). Pp. 2-1-2-12.
11. Liu J., Zhang T., Clow G.D., Jafarov E. Application of Tikhonov regularization to reconstruct past climate record from borehole temperature. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 2021. Vol. 29. Iss. 3. Pp. 3167–3189.
12. Nagornov O.V., Tyuflyin S.A. Ob interpretatsii rezul'tatov paleorekonstruktsiy po dannym Skvazhinnykh temperaturnykh izmereniy v lednikakh. [About paleo-reconstructions based on the borehole temperature measurements in glaciers]. *Vestnik NIYaU MIFI*, 2018. Vol. 7. No. 2. Pp. 170–174 (in Russian).

УДК: 621.383.933:621.3.029.78

Методика определения светотехнических характеристик светодиодов

© 2025 г. К. Н. Орлова¹, А. В. Градобоев², А. В. Беклемишева³, А. Р. Аванесян¹

¹ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

² Отделение экспериментальной физики «Национального исследовательского Томского политехнического университета», Томск, 634034, Россия

³ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, 123182, Россия

Представлена методика анализа светотехнических характеристик светодиодов (далее СД), которые даны широким спектром материалов группы АІІВV, с включением квантовых ям и без, на основе гетероструктур или с использованием монокристаллического материала. Данная методика предназначена для анализа и отбраковки СД, определения их индивидуальных коэффициентов пропорциональности, которые позволяют целенаправленно исследовать вызываемые различными разрушительными воздействиями деградиационные процессы в СД. Показано, что на ВтАХ (ватт-амперной характеристике) выделяются характерные области протекания рабочего тока: область низких токов НТ, область омического сопротивления, СД – R область, область высоких токов ВТ, которые характеризуются собственными коэффициентами пропорциональности и имеют свой физический смысл. Определены физико-математические соотношения, описывающие изменение выходной мощности излучения с ростом прямого тока для СД, изготовленных из перечисленных материалов. Рассмотрена применение настоящей методики с количественной оценкой потерь мощности излучения для выбранного типа СД в области НТ и ВТ. Показана зависимость потерь мощности излучения СД в области ВТ от рабочего тока. Представленная методика оценки светотехнических характеристик СД актуальна в случае воздействия спецфакторов (ионизирующее излучения, длительная эксплуатация, электрические поля и т.д.), где потери мощности излучения будут обусловлены индуцированным введением центров безызлучательной рекомбинации.

Ключевые слова: светодиоды, ватт-амперная характеристика, потери мощности излучения.

Введение

СД можно отнести не только к полупроводниковым приборам, которые широко используются в качестве излучателей в видимом и ИК-областях спектра, но и к эксплуатируемым во всевозможных условиях. К настоящему времени имеется множество источников, в которых довольно подробно рассказывается о применении СД, включая технологию производства и конструкцию, основные параметры и характеристики, а также систематизированы результаты исследования их потребительских свойств [1 – 2].

Подчеркнем, что много устройств на основе СД очень часто эксплуатируется в жестких условиях, например, в условиях космического пространства и на ядерных энергетических объектах [3 – 5]. В этих условиях они подвергаются воздействию различных видов ионизирующего излучения и эксплуатационных факторов, вследствие которых выходная мощность СД снижается, и появляются параметрические (в основном, снижение интенсивности излучения) и катастрофические отказы. При этом в космической, военной и атомных промышленности особое внимание уделяется проблемам их надежности и ради-

✉ К.Н. Орлова: KNOrlova@mephi.ru

Поступила в редакцию: 26.04.2025

После доработки: 15.08.2025

Принята к публикации: 28.08.2025

EDN SUKDFZ

ационной стойкости. Поэтому возможность восстановления деградирующих параметров СД является, несомненно, важным вопросом.

Один из способов восстановления параметров СД в результате облучения, а именно мощности, – радиационно-стимулированный отжиг, однако этот способ позволяет восстановить мощность не более, чем на 20 %. Поэтому основным эффективным способом планирования функционирования СД в жестких условиях является определение их радиационной стойкости, что невозможно без создания физико-математических соотношений, описывающих изменение критериальных параметров СД. Отметим, что существуют разрозненные результаты воздействия ограниченного набора флюенсов и доз на СД, изготовленные из определенных материалов [6, 7]. Однако отсутствует единая методика описания изменений в характеристиках СД, изготовленных из различных материалов, не только при воздействии спецфакторов, но и в их исходном состоянии. Создание качественной методики определения и анализа светотехнических характеристик СД и есть цель данной работы.

Важнейшие характеристики, которые можно получить, исследуя основную светотехническую характеристику СД (ватт-амперную характеристику (далее ВтАХ)), – это индивидуальные коэффициенты пропорциональности и пассивные потери мощности излучения, которые позволяют определить основные причины наблюдаемого как снижения, так и повышения мощности излучения и получить информацию при внешнем воздействии о физических механизмах, протекающих в активной области СД и замыкающих слоях, и информацию о формировании центров рассеяния и/или поглощения в элементах конструкции СД.

Цель работы: создание методики анализа ВтАХ СД для определения индивидуальных коэффициентов пропорциональности и потерь мощности излучения.

Для создания методики оценки светотехнических характеристик СД были взяты светодиоды, полученные из различных источников и изготовленные из различных материалов в условиях серийного производства. Отличительной особенностью части материалов активной области СД является присутствие в ней не только полупроводниковых гетероструктур, но и множественных квантовых ям, что также может иметь значение при оценке их радиационной стойкости [13, 14]. Для сравнения полученных результатов исследования были взяты СД на основе монокристаллического полупроводникового материала GaP. В табл. 1 представлены материалы и исходные спектрометрические характеристики исследуемых СД. По типу конструкции исследуемые СД делились на выводные (на базе корпусов КИ1 и КИ2) и СД поверхностного монтажа.

Типичная конструкция выводных СД (с выводными контактами) корпусного типа с полимерной герметизацией имеет корпус и линзу, изготовленные из оптического компаунда и предназначенные для формирования заданной диаграммы направленности излучения. Для изготовления выводных СД использовались металлические корпуса (КИ1 и КИ2) [9, 10]. Монтаж активного элемента СД формировался одновременно с корпусом и линзой из оптического компаунда. Для формирования направленного пучка излучения использовалась линза ПЭО-90МЭ.

СД с креплением на поверхность печатной платы (поверхностного монтажа) отличаются от выводных СД. Основа корпуса, на которую крепится кристалл, является хорошим проводником тепла, что улучшает отвод тепла от СД. Отметим, что данный факт, согласно литературным источникам, может иметь существенное влияние на радиационную стойкость СД [11, 12]. Иногда для создания нужной цветности между полупроводником и линзой присутствует слой люминофора для задания нужной цветовой температуры. В СД поверхностного монтажа с широким углом излучения линза отсутствует, а сам светодиод имеет форму параллелепипеда. СД поверхностного монтажа представлены под кодом IA590N2 и IA630N2, IB459, IB527 в табл. 1.

Светодиоды с характеристикой типа А и В являются светодиодами поверхностного монтажа, а С и D – выводными. Таким образом, представленное исследование позволило охватить СД с различной шириной запрещенной зоны, на основе гетероструктур и на основе монокристаллического материала, с различным квантовым выходом, с/без наличия квантовых включений. Однако все исследуемые материалы ограничены материалами, принадлежащими к группе материалов АПВВ.

Измерения ВтАХ СД проводились с помощью установки измерения статпараметров светодиодов POLI_500, типовая схема которой изображена на рис. 1.

Таблица 1. Характеристики и обозначения объектов исследования

Тип	I		II	
Активный слой	С множественными квантовыми ямами		Без квантовых ям	
Материал	AlGaInP	InGaN	AlGaInP	GaP
Характеристика типа СД	A	B	C	D
Обозначение	IA590N1, IA587N2, IA630N1, IA624N2	IB459, IB527, IB465	IC590, IC590, IC630	IID567, IID693
Длина волны, нм	590, 587, 630, 624	459, 527, 465	590, 590, 630	567, 693

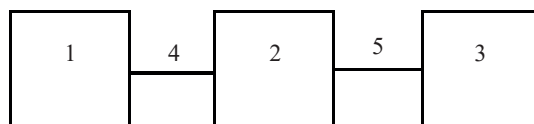


Рис. 1. Блок-схема установки POLI-500: 1 – компьютер; 2 – блок управления; 3 – фотометрический шар; 4 – кабель RS232; 5 – кабель питания

Принцип действия установки состоит в следующем:

- на исследуемый светодиод по управляющей программе подается прямой ток;
- измеряется падение напряжения на светодиоде;
- измеряется ток на выходе фотоприемника, который пропорционален мощности излучения исследуемого светодиода;
- результаты измерений передаются в компьютер по кабелю RS232 для дальнейшей обработки.

Рассмотрим методику анализа ВтАХ СД на примере IC630 СД на основе гетероструктур AlGaInP.

Напомним, что пассивные потери мощности можно выявлять как до воздействия различных внешних факторов (повышенная температура, внешние электрические поля, ультразвук, ионизирующее излучение и т.д.), так и во время и после воздействий.

На рис. 2 показана типичная ВтАХ для IC630 СД. Видно, что на ВтАХ можно выделить наблюдаемые ранее [15] характерные области протекания прямого тока, каждая из которых характеризуется собственной зависимостью мощности излучения активного слоя (кристалла) СД от величины рабочего тока.

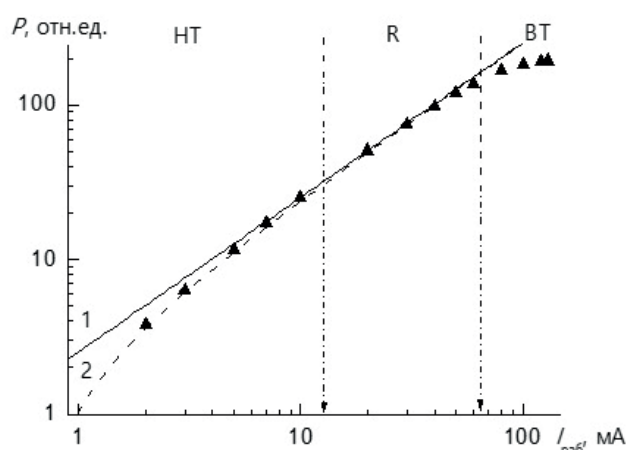


Рис. 2. Типичная ВтАХ IC630 СД на основе гетероструктур AlGaInP красного цвета свечения: символы – экспериментальные данные; вертикальные стрелки – границы между выделенными областями рабочих токов; 1 – расчет по соотношению (2); 2 – расчет по соотношению (4)

Напомним, что независимо от используемого полупроводникового материала, от наличия/отсутствия квантовых ям для всех типов исследуемых СД на прямой ветви ВАХ и ВТАХ были выделены:

область низких токов НТ – на прямой ветви ВАХ и ВТАХ наблюдается характерная нелинейная собственная закономерность роста рабочего тока и мощности излучения;

область средних токов R – прямая ветвь ВАХ описывается омическим сопротивлением, при этом для ВТАХ наблюдается рост с ростом рабочего тока;

область высоких токов ВТ – дополнительный спад мощности излучения за счет повышения температуры активного слоя СД.

1. Определение зависимости мощности излучения СД в области ОС СД от рабочего тока

На ВТАХ можно выделить идентичные области, которые практически совпадают с выделенными ранее на ВАХ [15]. Из представленных на рис. 2 результатов можно сделать вывод о том, что в области R ВТАХ может быть описана достаточно простым соотношением

$$P = A \cdot I_{\text{раб}}, \quad (1)$$

где P – мощность излучения СД [отн. ед.]; $A = 2.75$ – коэффициент пропорциональности, величина которого характеризует квантовый выход индивидуального СД и чувствительность фотодиода, используемого при измерениях в фотометрическом шаре [отн. ед. P /ток фотодиода мА]; $I_{\text{раб}}$ – рабочий ток [мА].

2. Описание ВТАХ в области (НТ + R)

Вернемся к рис. 2. В области НТ наблюдается снижение мощности излучения СД по сравнению с мощностью излучения, которое рассчитано по соотношению (1). Предполагая, что это снижение обусловлено пассивными потерями мощности излучения ΔP , величина которых не зависит от рабочего тока, поскольку с ростом рабочего тока до области R вклад пассивных потерь становится пренебрежимо мал. Таким образом, получаем

$$\Delta P = A \cdot I_{\text{раб}} - P_{\text{изм НТ}}, \quad (2)$$

где $P_{\text{изм НТ}}$ – мощность излучения, измеренная для области НТ.

Тогда все изменение мощности излучения СД в области (НТ + R) можно описать следующим соотношением:

$$P = A \cdot I_{\text{раб}} - \Delta P = 2.75 \cdot I_{\text{раб}} - 1.3. \quad (3)$$

Полученные таким образом для данного СД потери мощности в области НТ показаны на рис. 3. Потери мощности для данного типа СД в области НТ равны 1.30 отн. ед. и не зависят от величины рабочего тока.

Наблюдаемые на рис. 3 отклонения потерь мощности от среднего значения вполне объяснимы погрешностью измерений. Таким образом, наблюдаемые потери мощности можно считать константой, величина которой не зависит от рабочего тока.

Полученное соотношение (3) достаточно хорошо описывает изменение ВТАХ в области (НТ + R), как это показано на рис. 2. Оценка погрешности измерения величины пассивных потерь мощности излучения статистическим методом показала, что максимальная погрешность определения пассивных потерь не превышает 15 % для доверительной вероятности 0.95.

Если изменение мощности в области НТ в явном виде зависит от рабочего тока, а наблюдаемые отклонения нельзя объяснить погрешностью измерений, тогда изменение вклада потерь мощности можно описать наблюдаемой функцией и учесть в соотношении (3).

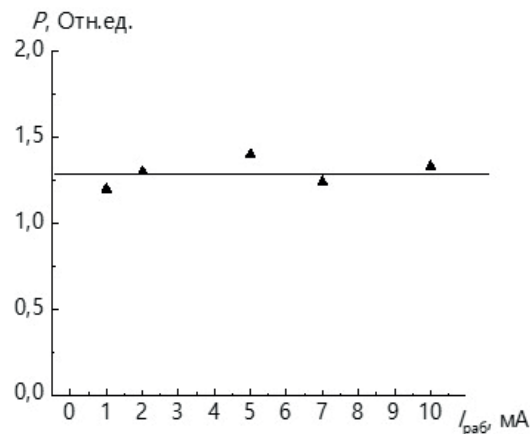


Рис. 3. Изменение потерь мощности в области НТ

3. Описание ВТАХ в области ВТ

Рассмотрим область ВТ. В данном случае с ростом рабочего тока наблюдается снижение рабочего напряжения, что обусловлено ростом температуры активного слоя и сопровождается снижением высоты барьера на р-п переходе СД, что приводит к снижению ширины запрещенной зоны [16, 17]. При этом наблюдается замедление роста мощности излучения с последующим повышением рабочего тока с ее последующим снижением (см. рис. 2).

Для того чтобы описать снижение мощности излучения СД в области ВТ-рассмотрим зависимость потерь мощности δP от рабочего тока, которые можно описать следующим образом:

$$\delta P = A \cdot I_{\text{раб}} - \Delta P - P_{\text{изм ВТ}}, \quad (4)$$

где $P_{\text{изм ВТ}}$ – результаты измерений в области высоких токов.

На рис. 4 показана установленная зависимость δP в области высоких токов от рабочего тока, которая описывается следующим соотношением

$$\delta P = 0.0087 \cdot I_{\text{раб}}^2. \quad (5)$$

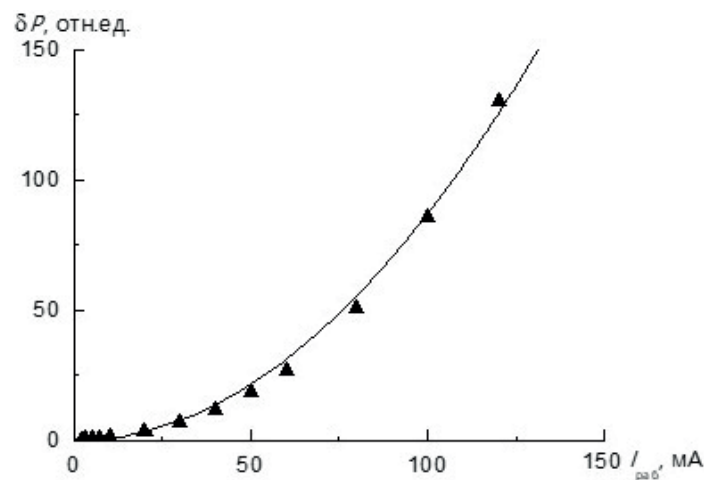


Рис. 4. Изменение потерь мощности в области ВТ в зависимости от рабочего тока

4. Описание ВТАХ во всем диапазоне рабочих токов

Таким образом, изменение ВТАХ во всем диапазоне рабочих токов можно описать следующим соотношением:

$$\begin{aligned} P &= 2.75 \cdot I_{\text{раб}} - 0.0097 \cdot I_{\text{раб}}^2 - 1.30 = A \cdot I_{\text{раб}} - B \cdot I_{\text{раб}}^2 - \Delta P = \\ &= A \cdot I_{\text{раб}} \cdot (1 - C \cdot I_{\text{раб}}) - \Delta P, \end{aligned} \quad (6)$$

где $B = 0.0097$ – коэффициент пропорциональности, величина которого определяет повышение температуры активной области СД и ее вклад в снижение квантовой эффективности; $C = 3.5 \cdot 10^{-3}$ – коэффициент пропорциональности, величина которого определяет повышение температуры активной области СД.

На рис. 5 показано описание ВТАХ для рассматриваемого СД во всем диапазоне рабочих токов.

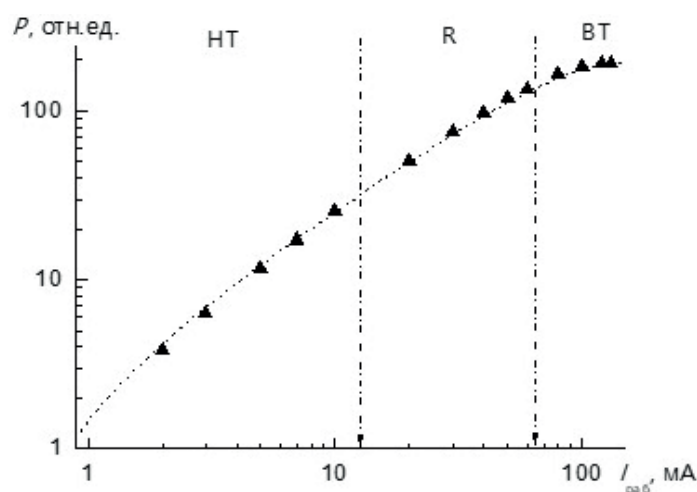


Рис. 5. Изменение ВТАХ во всем диапазоне рабочих токов: символы – экспериментальные данные; линия – расчет по соотношению (6)

Таким образом, учет пассивных потерь и снижения мощности излучения в области ВТ позволяет количественно описать наблюдаемую ВТАХ для индивидуального СД как до, так и после внешнего воздействия, на предмет которого проводятся испытания.

Полученные в результате применения настоящей методики коэффициенты пропорциональности для всех типов исходных СД и их исходные потери представлены ниже в табл. 2.

Таблица 2. Исходные сопротивления и напряжения отсечки СД

Тип СД	A	C	ΔP
IA590N1	2.88	0.012÷0.015	2.3
IA587N2	1.7÷1.95	0.006÷0.007	1.2÷2.6
IA630N1	7.96	0.021÷0.022	3.2÷3.7
IA624N2	4.7÷5.3	0.009÷0.014	2.3÷3.3
IB459	1.68÷.88	0.0072÷0.0078	0.04÷0.1
IB527	2.05÷2.2	0.008÷0.012	0.01÷0.1
IB465	4.02÷4.5	0.014÷0.024	0.4÷2.0
IC590N1	1.1÷1.3	0.0042÷0.0045	1.06÷2.06
IC590N2	0.57÷0.63	0.0029÷0.0035	0.53÷0.68
IC630	2.75÷2.96	0.010÷0.012	1.2÷2.1
IID567	0.55÷0.70	0.0016÷0.0033	0.3÷0.8
IID693	0.20 ÷ 0.35	0.00045 ÷ 0.0009	0.07 ÷ 0.09

Заключение

Установлено, что независимо от используемого полупроводникового материала, от наличия/отсутствия квантовых ям для всех типов исследуемых СД на ВтАХ можно выделить три характерные области рабочих токов: область низких токов НТ – на ВтАХ наблюдается характерная нелинейная собственная закономерность роста рабочего тока и мощности излучения; область средних токов R – для ВтАХ наблюдается рост с повышением рабочего тока, прямая ветвь ВАХ при этом описывается омическим сопротивлением; область высоких токов ВТ – дополнительный спад мощности излучения за счет повышения температуры активного слоя СД.

При анализе результатов воздействия таких различных внешних факторов, как ионизирующее излучение, длительная наработка, высокие температуры – использование изложенной ранее методики позволит предполагать основные причины наблюдаемого как снижения, так и повышения мощности излучения СД. Кроме того, установленные закономерности дают возможность определить пассивные потери мощности излучения СД и составить более достоверный прогноз стойкости СД к воздействию внешних факторов. Показанная в данной работе методика может быть использована для анализа работы всех известных типов СД.

Финансирование

Работа выполнена в рамках финансирования НИОКР «Разработка новых имплантационных методов получения диэлектрических промежуточных слоев в полупроводниковых подложках для систем управления термоядерных установок» № 25 от 09 января 2025.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

К.Н. Орлова – разработка концепции исследования, разработка методик измерения; постановка эксперимента; разработка математической модели; участие в проведении исследования и обсуждении результатов; подготовка текста статьи.

А.В. Градобоев – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования; участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

А.В. Беклемишева – анализ нормативной базы; выполнение измерений; анализ экспериментальных данных; выявление закономерностей; подбор литературных источников, редактирование текста статьи.

А.Р. Аванесян – выполнение экспериментальных работ; обработка результатов; проведение численных расчетов; первичная обработка результатов исследования, выявление закономерностей; проведение расчетов и подготовка заключения.

Список литературы

1. Хайрулин Б.Д. Обзор основного светотехнического оборудования на аэродромах // Молодежь и системная модернизация страны, 2022. С. 230–233.
2. Закгейм А.Л., Иванов А.Е., Черняков А.Е. Особенности работы мощных AlInGaN-светодиодов при больших импульсных токах // Письма в Журнал технической физики, 2021. Т. 47. Вып. 16. С. 32–35.
3. Nakysbekov Z., Ismailov D., Bellucci S., Tukhfatullin T., Bogdanov O., Tronin B., Turmanova K., Suyundykova G., Grichshenko V., Pshikov M., Alzhanova A. Concise review of recent advances and applications of the electron linear accelerator ELU 4 in scientific and technical fields // Physical Sciences and Technology, 2024. V. 11. № 1–2. P. 32–42. DOI: 10.26577/PHST2024V11I1A4
4. Sulaiman N.N., Hasbullah N.F., Saidin N., Javed Y., Khan Z.I. Radiation-induced degradation in optoelectronic devices for satellite applications: a review // Discover Materials, 2025. V. 5. № 1. P. 1–22.
5. Polyakov A.Y., Pearton S.J., Frenzer P., Ren F., Liu L., Kim J. Radiation effects in GaN materials and devices // Journal of Materials Chemistry C, 2013. V. 1. № 5. P. 877–887.
6. Brudnyi V., Prudaev I., Oleinik V., Marmaluk A. Electron irradiation degradation of AlGaInP/GaAs light-emitting diodes // Physica status solidi (A), 2018. V. 215. № 8. P. 1700445. DOI: 10.1002/pssa.201700445.

7. Меишуров О.В., Таперо К.В., Фигуров В.С., Юрченков А.В., Авдюшкин С.А. Исследование деградации отечественных изделий оптоэлектроники вследствие структурных повреждений при воздействии ионизирующего излучения // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру, 2011. № 2. С. 24–28.
8. Ионычев В.К., Шестеркина А.А. Исследование глубоких центров в микроплазменных каналах фосфидгаллиевых светодиодов зеленого спектра излучения // Физика и техника полупроводников, 2017. Т. 51. № 3. С. 386–389.
9. Градобоев А.В., Орлова К.Н., Асанов И.А. Деградация параметров гетероструктур AlGaInP при облучении быстрыми нейтронами и гамма-квантами // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру, 2013. № 2. С. 64–66.
10. Романов Н.М., Мокрушина С.А. Влияние гамма-облучения на МДП-структуры с тонким оксидом Al₂O₃ // Перспективные материалы, 2018. № 2. С. 17–24.
11. Orlova K.N., Gradoboev A.V. Change in radiating power of the algaInP heterostructures under irradiation by fast neutrons // 24th International Crimean Conference Microwave & Telecommunication Technology. IEEE, 2014. P. 874–875.
12. Бурмистров Е.Р., Авакянц Л.П., Афанасова М.М. Пьезоэлектрическая релаксация двумерного электронного газа в гетероструктурах с квантовыми ямами InGa_N/Ga_N // Известия высших учебных заведений, 2021. Т. 64. № 5. С. 9–19.
13. Расул А.Р., Орлова К.Н. Анализ ватт-амперных характеристик светодиодов, изготовленных из различных материалов // Вестник НИЯУ МИФИ, 2024. Т. 13. № 1. С. 52–58. DOI: 10.26583/vestnik.2024.308.
14. Генцарь П.А. Радиационно-стимулированная релаксация внутренних механических напряжений в гомоэпитаксиальных пленках фосфида галлия // Физика и техника полупроводников, 2006. Т. 40. № 9. С. 1051–1053.
15. Gradoboev A.V., Simonova A.V., Orlova K.N. Influence of irradiation by 60 Co gamma-quanta on reliability of IR-LEDs based upon AlGaAs heterostructures // Physica status solidi (C), 2016. V. 13. № 10–12. P. 895–902.
16. Pastuszak J., Węgierek P. Photovoltaic cell generations and current research directions for their development // Materials, 2022. V. 15. № 16. P. 5542. DOI: 10.3390/MA15165542.
17. Сергеев В.А., Ходаков А.М., Фролов И.В. Модель деградации InGa_N/Ga_N светодиода при токовых испытаниях с учетом неоднородного распределения температуры и плотности тока в гетероструктуре // Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии, 2020. Т. 12. № 3. С. 329–334.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 5, pp. 431–439

Determining Method for Lighting Characteristics LEDs

K. N. Orlova^{1,✉}, A. V. Gradoboev², A. V. Beklemisheva³, A. R. Avanesyan¹

¹ National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409, Russia

² Department of Experimental Physics, National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, 634050, Russia

³ National Research Center «Kurchatov Institute», Moscow, 123182, Russia

✉ KNorlova@mephi.ru

Received April 26, 2025; revised August 15, 2025; accepted August 28, 2025

The article presents a technique for analyzing the lighting characteristics of light-emitting diodes (hereinafter referred to as LEDs), which are represented by a wide range of materials of the AIII BV group, with or without quantum wells, based on heterostructures or using a single-crystal material. This technique is intended for analyzing and rejecting LEDs, determining their individual proportionality coefficients, which allow for a targeted study of degradation processes in LEDs caused by various destructive effects. It is shown that characteristic regions of the operating current flow are distinguished on the L-I characteristic: the region of low currents LC, the region of the ohmic resistance of the LED - R region, the region of high currents HC, which are characterized by their own proportionality coefficients and have their own physical meaning. Physical and mathematical relationships are determined that describe the change in the output radiation power with an increase in the forward current for LEDs made of the listed materials. The application of this technique with a quantitative assessment of radiation power losses for a selected LED type in the LC and HC regions is shown. The dependence

of the LED radiation power losses in the HC region on the operating current is shown. The presented method for assessing the lighting characteristics of LEDs is relevant in the case of exposure to special factors (ionizing radiation, long-term operation, electric fields, etc.), where losses in radiation power will be caused by the induced introduction of non-radiative recombination centers.

Keywords: LEDs, watt-ampere characteristics, radiation power loss.

References

1. Hajrulin B.D. Obzor osnovnogo svetotekhnicheskogo oborudovaniya na aerodromah [Overview of the main lighting equipment at airfields]. *Molodezh' i sistemnaya modernizatsiya strany*, 2022. Pp. 230–233 (in Russian).
2. Zakgejm A.L., Ivanov A.E., Chernyakov A.E. Osobennosti raboty moshchnykh AlInGaIn-svetodiodov pri bol'shih impul'snykh tokakh [Features of operation of powerful AlInGaIn LEDs at high pulse currents]. *Pis'ma v Zhurnal tekhnicheskoy fiziki*, 2021. Vol. 47. No. 16. Pp. 32–35 (in Russian).
3. Nakysbekov Z., Ismailov D., Bellucci S., Tukhfatullin T., Bogdanov O., Tronin B., Turmanova K., Suyundykova G., Grichshenko V., Pshikov M., Alzhanova A. Concise review of recent advances and applications of the electron linear accelerator ELU 4 in scientific and technical fields. *Physical Sciences and Technology*, 2024. Vol. 11. No. 1–2. Pp. 32–42. DOI: 10.26577/PHST2024V11I1A4
4. Sulaiman N.N., Hasbullah N.F., Saidin N., Javed Y., Khan Z.I. Radiation-induced degradation in optoelectronic devices for satellite applications: a review. *Discover Materials*, 2025. Vol. 5. No. 1. Pp. 1–22.
5. Polyakov A.Y., Pearton S.J., Frenzer P., Ren F., Liu L., Kim J. Radiation effects in GaN materials and devices. *Journal of Materials Chemistry C*, 2013. Vol. 1. No. 5. Pp. 877–887.
6. Brudnyi V., Prudaev I., Oleinik V., Marmaluk A. Electron irradiation degradation of AlGaInP/GaAs light-emitting diodes. *Physica status solidi (A)*, 2018. Vol. 215. No. 8. Pp. 1700445. DOI: 10.1002/pssa.201700445.
7. Meshchurov O.V., Tapero K.B., Figurov V.S., Yurchenkov A.V., Avdyushkin S.A. Issledovanie degradatsii otechestvennykh izdelij optoelektroniki vsledstvie strukturnykh povrezhdenij pri vozdeystvii ioniziruyushchego izlucheniya [Study of degradation of domestic optoelectronic products due to structural damage when exposed to ionizing radiation]. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Fizika radiatsionnogo vozdeystviya na radioelektronnuyu apparaturu*, 2011. No. 2. Pp. 24–28 (in Russian).
8. Ionychev V.K., Shesterkina A.A. Issledovanie glubokikh centrov v mikroplazmennyykh kanalakh fosfidgallievyykh svetodiodov zelenogo spektra izlucheniya [Study of deep centers in microplasma channels of gallium phosphide LEDs of green emission spectrum]. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*, 2017. Vol. 51. No. 3. Pp. 386–389 (in Russian).
9. Gradoboev A.V., Orlova K.N., Asanov I.A. Degradatsiya parametrov geterostruktur AlGaInP pri obluchenii bystryimi neitronami i gamma-kvantami [Degradation of parameters of AlGaInP heterostructures under irradiation with fast neutrons and gamma rays]. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Fizika radiatsionnogo vozdeystviya na radioelektronnuyu apparaturu*, 2013. No. 2. Pp. 64–66 (in Russian).
10. Romanov N.M., Mokrushina S.A. Vliyanie gamma-oblucheniya na MDP-struktury s tonkim oksidom Al₂O₃ [Effect of gamma irradiation on MIS structures with thin Al₂O₃ oxide]. *Perspektivnye materialy*, 2018. No. 2. Pp. 17–24 (in Russian).
11. Orlova K.N., Gradoboev A.V. Change in radiating power of the algaInP heterostructures under irradiation by fast neutrons. 24th International Crimean Conference Microwave & Telecommunication Technology. IEEE, 2014. Pp. 874–875.
12. Burmistrov E.R., Avakyanc L.P., Afanasova M.M. P'zeoelektricheskaya relaksatsiya dvumernogo elektronnoy gaza v geterostrukturakh s kvantovymi yamami InGaIn/GaN [Piezoelectric Relaxation of Two-Dimensional Electron Gas in InGaIn/GaN Quantum Well Heterostructures]. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenij*, 2021. Vol. 64. No. 5. Pp. 9–19 (in Russian).
13. Rasul A.R., Orlova K.N. Analiz vatt-ampernykh kharakteristik svetodiodov, izgotovlennykh iz razlichnykh materialov [Analysis of watt-ampere characteristics of LEDs made of different materials]. *Vestnik NIYAU MIFI*, 2024. Vol. 13. No. 1. Pp. 52–58. DOI: 10.26583/vestnik.2024.308 (in Russian).
14. Gentsar' P.A. Radiatsionno-stimulirovannaya relaksatsiya vnutrennikh mekhanicheskikh napryazhenii v gomoepitaksial'nykh plenkach fosfida galliya [Radiation-induced relaxation of internal mechanical stresses in homoepitaxial gallium phosphide films]. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*, 2006. Vol. 40. No. 9. Pp. 1051–1053 (in Russian).
15. Gradoboev A.V., Simonova A.V., Orlova K.N. Influence of irradiation by 60 Co gamma-quanta on reliability of IR-LEDs based upon AlGaAs heterostructures [Model of InGaIn/GaN LED degradation during current tests taking into account non-uniform temperature and current density distribution in the heterostructure]. *Physica status solidi (C)*, 2016. Vol. 13. No. 10–12. Pp. 895–902.
16. Pastuszak J., Wegierek P. Photovoltaic cell generations and current research directions for their development. *Materials*, 2022. Vol. 15. No. 16. Pp. 5542. DOI: 10.3390/MA15165542.
17. Sergeev V.A., Khodakov A.M., Frolov I.V. Model' degradatsii InGaIn/GaN svetodioda pri tokovykh ispytaniyakh s uchedom neodnorodnogo raspredeleniya temperatury i plotnosti toka v geterostrukture [Model of InGaIn/GaN LED degradation during current tests taking into account non-uniform temperature and current density distribution in the heterostructure]. *Radioelektronika. Nanosistemy. Informatsionnye tekhnologii*, 2020. Vol. 12. No. 3. Pp. 329–334 (in Russian).

УДК 538.971

Моделирование атомной структуры когерентной границы раздела между железом и магнетитом

© 2025 г. Н. Д. Комаров¹, В. А. Бородин^{1,2}¹ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия² НИЦ «Курчатовский институт», Москва, 123182, Россия

В данной работе проведено моделирование атомной структуры границы раздела между металлическим железом и его оксидом Fe_3O_4 (магнетитом). Такие границы возникают, например, при формировании оксидного слоя на поверхностях труб из ферритно-мартенситных сталей, используемых для защиты от высокотемпературной коррозии в агрессивных кислородосодержащих средах, в частности в среде жидкого свинца и свинцово-висмутовой эвтектики, которые рассматриваются в качестве теплоносителей в перспективных реакторах на быстрых нейтронах. В рамках исследования были рассмотрены теоретически возможные варианты когерентного поверхностного сопряжения кристаллических решеток железа и магнетита и проведены оценки энергий образования соответствующих поверхностей раздела с использованием первопринципных расчетов и различных потенциалов межатомного взаимодействия. В результате расчетов удалось идентифицировать атомное строение границ раздела между железом и магнетитом, выявить конфигурации с минимальной энергией для каждого использованного потенциала, а также определить наиболее подходящий потенциал межатомного взаимодействия для дальнейших исследований влияния облучения на границу раздела «железо-магнетит».

Ключевые слова: сталь, магнетит, окисление, защитные покрытия, межфазные границы, молекулярная динамика, потенциал межатомного взаимодействия.

Введение

Оксидные пленки на поверхностях стальных труб широко используются для защиты от коррозии в агрессивных средах. В зависимости от условий эксплуатации наносимое покрытие либо может иметь состав, отличающийся от защищаемого материала (например, оксид хрома [1]), либо возникать в результате прямого взаимодействия внешней среды со сталью. Защитные покрытия второго типа рассматриваются, в частности, как перспективный способ защиты деталей из ферритно-мартенситных сталей в активной зоне проектируемых реакторов на быстрых нейтронах с расплавленным свинцовым теплоносителем, при котором самоподдерживаемый рост слоя оксида препятствует прямому воздействию свинца на стальные конструкции [2]. Один из ключевых вопросов при использовании защитных покрытий в реакторах – их стойкость к облучению. Из-за значительной сложности прямых реакторных исследований долговременной эволюции защитных оксидных слоев проведение прогнозного многоуровневого моделирования возможной деградации этих слоев в условиях облучения представляется практически важным. Одним из ключевых аспектов такого моделирования является адекватное описание процессов, происходящих на границе раздела оксидного слоя и металла под воздействием облучения. Это, в свою очередь, требует создания корректной модели атомного строения границы раздела между железом и оксидом.

✉ Н. Д. Комаров: komarovnd@mail.ru

Поступила в редакцию: 16.05.2025

После доработки: 15.09.2025

Принята к публикации: 23.09.2025

EDN UXBDWW

В условиях, когда коррозия ферритно-мартенситных сталей в окисляющей среде происходит при достаточно высоких температурах (400–700 °С) и при умеренном содержании кислорода в окружающей среде, слой оксида формирует структуру шпинели на основе Fe_3O_4 [3]. В ходе экспериментальных исследований чаще всего наблюдается образование двухслойной шпинели, в которой внешний слой (относительно металла) состоит из чистого Fe_3O_4 (магнетита), тогда как слой, прилегающий к металлу, содержит значительное количество примесей, преимущественно хрома, и может быть представлен как хромсодержащая шпинель $\text{Fe}_{3-x}\text{Cr}_x\text{O}_4$, где $x = 0.6–0.7$ [4]. Поскольку содержание хрома как в стали, так и в хромсодержащей шпинели относительно невелико, в нулевом приближении при исследовании структуры границы раздела можно пренебречь наличием хрома как в самом металле, так и в оксидном слое, и рассмотреть строение границы раздела $\text{Fe}/\text{Fe}_3\text{O}_4$.

Согласно литературным данным [5, 6], граница раздела $\text{Fe}/\text{Fe}_3\text{O}_4$ имеет высокую степень когерентности со сравнительно небольшим количеством дислокаций несоответствия и иных дефектов. Оксид железа формируется предпочтительно на плоскостях железа типа (001), что обеспечивает ориентацию нормали к границе раздела вдоль направления [001] кубической решетки магнетита, а взаимная ориентация кристаллов магнетита в плоскости раздела такова, что ось [100] магнетита оказывается параллельной направлению [110] железа [5–8]. При этом период решетки магнетита (8.4 Å) превышает удвоенный период решетки железа (~ 4.06 Å для стали, содержащей 12 % хрома) всего на 3.3 %.

Однако, даже с учетом вышеуказанных ориентационных соотношений, при построении конкретной атомистической модели взаимного расположения кристаллов железа и магнетита на гладкой поверхности сопряжения остается значительная неопределенность. Прежде всего, это связано со структурой шпинели, характерной для соединений AB_2O_4 (где A и B – в общем случае различные металлы, хотя это и не обязательно), рис. 1. Атомы A и B размещаются на различных подрешетках, в совокупности образующих катионную подрешетку, и обычно различаются по валентности, даже если это атомы одного металла. В этом смысле даже в чистом магнетите атомы железа типа A и B не являются строго эквивалентными [9, 10]. Как легко заметить на рис. 1а, элементарная ячейка магнетита содержит в направлении типа <001> четыре пары атомных плоскостей, где одна из плоскостей в каждой паре образована катионами только типа A (A -плоскость), а вторая включает в себя катионы типа B и атомы кислорода (B -плоскость). Относительное расположение атомов в плоскости одинаково для всех плоскостей одного и того же типа. Однотипные плоскости в пределах элементарной ячейки различаются только относительным сдвигом вдоль плоскости (001), см. рис. 1б. Соответственно, на атомистически гладкой границе раздела в контакте с железом может оказаться как A -плоскость, так и B -плоскость магнетита. В первом случае граница не содержит атомов кислорода и связь кристаллитов магнетита и железа обеспечивается только взаимодействием между атомами железа, тогда как во втором случае

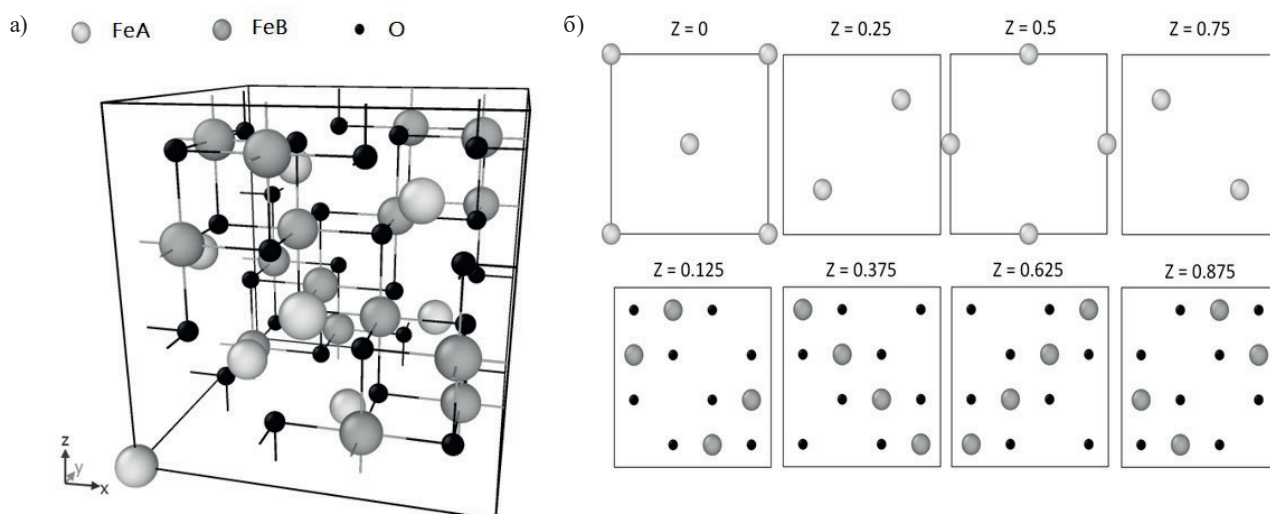


Рис. 1. Атомная структура элементарной ячейки магнетита (а); последовательность плоскостей [001] магнетита на различной относительной высоте z в пределах элементарной ячейки (б). Атомы на катионной подрешетке типа А (Fe^{3+}) показаны светло-серыми, а атомы на катионной подрешетке типа В (Fe^{2+}) – темно-серыми. Атомы кислорода имеют черный цвет

в образовании границы могут принимать участие не только атомы железа, но и атомы кислорода из *B*-плоскости магнетита.

Во-вторых, даже если тип терминирования кристаллита магнетита (*A*- или *B*-плоскостью) задан, остается неопределенным относительный сдвиг кристаллов магнетита и железа в плоскости (001). На это указывают работы [7, 8], в которых проведены первопринципные расчеты энергии двухслойных кристаллитов «железо-магнетит» с границами раздела, терминированными со стороны магнетита плоскостями *A* и *B*. Основной задачей авторов было определение минимума энергии кристаллита при условии, что варьируется только его размер вдоль направления [001], перпендикулярного границам раздела. Поперечные размеры (в плоскости, параллельной границам) фиксированы и соответствуют равновесными параметрами решетки железа, что подразумевает практически важную ситуацию, когда тонкий слой оксида образуется на массивной металлической подложке. Исходя из условия минимума полной энергии системы, авторы указанных работ смогли оценить расстояния между граничными плоскостями железа и магнетита для обоих случаев терминирования поверхности магнетита, а также предложили оценки поверхностной энергии границ раздела. Однако в указанных работах учтены не все возможные случаи взаимного сдвига слоев магнетита и железа (два варианта в случае *B*-терминирования магнетита и один – в случае *A*-терминирования), причем, как показано далее, ни один из них не соответствует наиболее энергетически выгодной границе. Это ограничивает полноту представленной информации и требует дальнейшего исследования. Более того предложенные авторами конкретные значения энергий границ раздела вызывают сомнения, поскольку в предложенном подходе можно однозначно определить только сумму удельных энергий границ раздела с *A*- и *B*-терминированием магнетита, тогда как разделить ее на вклады от границ раздела с конкретным терминированием невозможно в принципе, что подробно объясняется далее в разделе методологии.

В связи с ограниченностью информации, представленной в работах [7, 8], важно провести более детальное исследование вариантов построения границ раздела железо-магнетит и определение границы с наименьшей энергией для каждого возможного варианта терминирования поверхности слоя магнетита. Не менее важна оценка корректности полуэмпирических потенциалов межатомного взаимодействия, в которой можно убедиться путем сравнения с результатами первопринципных расчетов. Актуальность использования подобных потенциалов связана с высокой вычислительной сложностью первопринципных расчетов. Применение последних в молекулярно-динамическом моделировании процессов, происходящих на границах раздела железо-магнетит при внешних термических и радиационных воздействиях, отличается высокими затратами с точки зрения компьютерных ресурсов.

В настоящей работе исследованы возможные способы сопряжения кристаллитов железа и магнетита с *B*-терминированной поверхностью. В отличие от модели, предложенной в работах [7, 8], в данном исследовании использованы кристаллиты увеличенного размера, а результаты первопринципных расчетов сравниваются с результатами наиболее подходящих для данной задачи полуэмпирических потенциалов. Это позволило установить структуру границы раздела с наименьшей энергией и выявить полуэмпирические потенциалы, наиболее точно воспроизводящие результаты первопринципных расчетов. Эти потенциалы могут быть использованы в последующих исследованиях для изучения поведения границ раздела при внешних воздействиях.

Методология

Определение энергий различных конфигураций расчетных ячеек проводилось как с использованием полуэмпирических потенциалов межатомного взаимодействия, так и в рамках первопринципного подхода теории функционала плотности [11].

Для системы железо-кислород в литературе предложен целый ряд потенциалов межатомного взаимодействия, однако в данной работе использовались только потенциалы класса ReaxFF, обеспечивающие адаптивную подстройку зарядов атомов в зависимости от их локального окружения и одинаково пригодные для описания атомных систем как с металлической, так и с ионно-ковалентной связью, что принципиально важно для рассматриваемой задачи, в которой моделируемый кристаллит состоит из контактирующих между собой слоев металлического железа, атомы которого электрически нейтральны, и керамики Fe_3O_4 , где все атомы имеют заряд. В частности, при расчетах использовались три

варианта параметризации потенциала ReaxFF для системы железо-кислород, предложенные в работах [12–14], которые ниже цитируются как Reax(A), Reax(P) и Reax(S), соответственно. Все потенциалы были дополнительно модифицированы добавлением короткодействующего отталкивающего потенциала между парами атомов Fe–O, что позволило предотвратить обнаруженную в предварительных тестовых расчетах с оригинальными потенциалами нефизическую потерю устойчивости структуры магнетита при нагреве до сравнительно небольших температур ~ 700 – 800 К. В качестве конкретного отталкивающего потенциала был использован потенциал вида ZBL [15], встроенный в использованный для минимизации энергии расчетных кристаллитов программный пакет LAMMPS [16]. После ряда тестовых расчетов оптимальный радиус обрезания потенциала ZBL был выбран равным $2.2 \text{ \AA}$.

Расчеты в рамках теории функционала плотности проводились с использованием метода PAW (Projector Augmented Wave) [17] и обменно-корреляционного функционала PBE [18]. Использованные версии псевдопотенциалов учитывали в качестве валентных 8 электронов в атомах железа (электронные конфигурации d^7s^1) и 6 электронов в атомах кислорода (s^2p^4). Параметры расчета включали в себя энергию обрезания плоских волн, равную 500 эВ, и сетку разбиения первой зоны Бриллюэна типа Монхорста – Пака [19], содержащую $2 \times 2 \times 2$ k -точки. Все расчеты проводились с учетом спиновой поляризации атомов.

Использованные для определения удельной поверхностной энергии границ раздела расчетные ячейки представляли собой параллелепипеды, состоящие из соседних кристаллитов магнетита и металлического железа, как показано на рис. 2. Направления сторон расчетных ячеек совпадали с кристаллографическими направлениями [100], [010] и [001] в магнетите и [100], [110] и $[1\bar{1}0]$ в ОЦК-железе, соответственно. Этим обеспечивалось выполнение указанных во введении ориентационных соотношений между кристаллитами магнетита и железа. Слой магнетита в случае использования эмпирических потенциалов содержал $5 \times 2 \times 2$ элементарных ячеек магнетита с одной добавленной плоскостью типа B и включал в себя 160 атомов Fe(A), 336 атомов Fe(B) и 672 атома O, тогда как слой железа содержал 39 монослоев (1248 атомов). Для первопринципных расчетов использовались ячейки размером $2 \times 1 \times 1$ элементарных ячеек магнетита с одной добавленной плоскостью типа B (всего 160 атомов Fe(A), 336 атомов Fe(B) и 672 атома O) и 15 монослоев ОЦК-железа (120 атомов). Сравнительно небольшие размеры кристаллитов вдоль осей y и z оправданы тем, что периодичность в этих направлениях обеспечивает моделирование квазибесконечной границы. Нечетное количество монослоев железа в направлении x являлось необходимым для обеспечения идентичности контакта поверхностей железа и магнетита с обеих сторон слоя магнетита и предотвращения сдвигового деформирования слоев в процессе минимизации энергии.

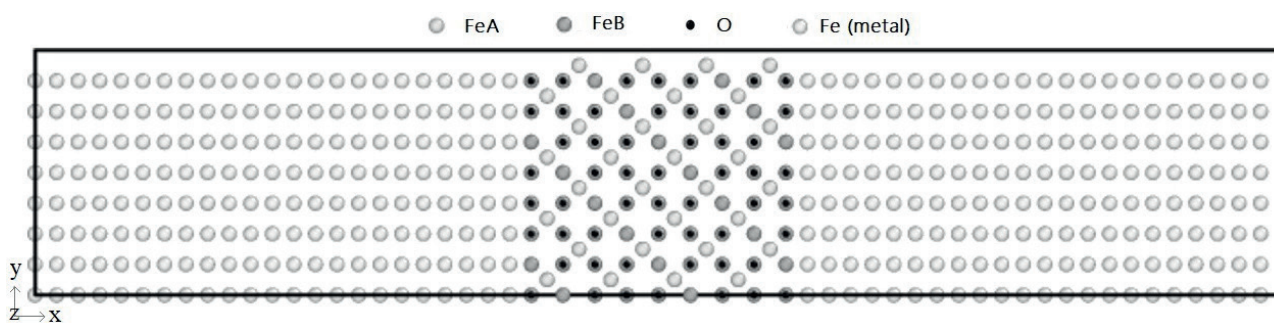


Рис. 2. Пример кристаллита с двумя границами раздела, используемого для определения структуры и устойчивости границ раздела с помощью полуэмпирических потенциалов. Атомы типа A показаны светло-серым цветом, атомы типа B – темно-серым, атомы кислорода – черным, атомы железа в области металла – серым

Для учета возможности различного относительного сдвига кристаллитов железа и магнетита друг относительно друга в плоскости границы раздела были рассмотрены четыре варианта сопряжения слоев, соответствующие представленным на рис. 3 и индексируемые в дальнейшем как варианты 0–3, соответственно.

Построение исходных расчетных ячеек, содержащих граничащие друг с другом слои железа и магнетита, проводилось с использованием программы AtomsK [20]. Размеры кристаллита в направлениях

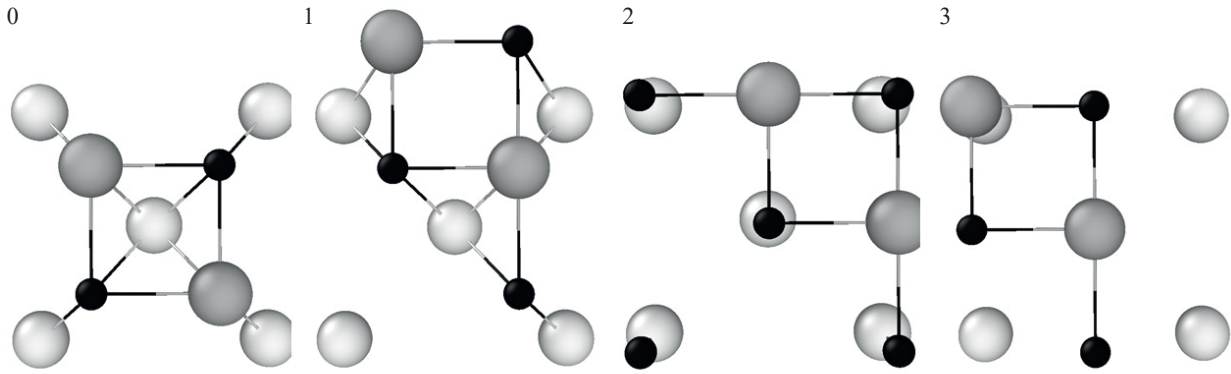


Рис. 3. Четыре рассмотренных варианта наложения граничных монослоев металла и плоскости *B*-типа магнетита (вид в направлении $[100]$). Положение атомов в граничном монослое металла на рисунках остается неизменным, тогда как плоскости магнетита в вариантах 0–3 имеют различный сдвиг вдоль границы раздела. Цветовая схема аналогична рис. 2

y и z при построении исходной расчетной ячейки выбирались так, чтобы расстояние между атомами в слоях железа, параллельных плоскости yOz , соответствовало равновесному межатомному расстоянию в кристаллите чистого железа, рассчитанному с помощью используемого потенциала межатомного взаимодействия. Поскольку при этом удвоенный параметр решетки железа в направлении $\langle 110 \rangle$ ($\sim 8.12 \text{ \AA}$) немного меньше параметра решетки магнетита ($\sim 8.4 \text{ \AA}$ [21]), при когерентном сопряжении кристаллических решеток железа и оксида кристаллы магнетита оказываются двусоно сжаты в плоскости yOz . Поэтому после построения исходных ячеек процесс минимизации энергии включал в себя оптимизацию не только положений атомов в расчетной ячейке, но и размеров ячейки без изменения ее формы.

На основании полученных в результате релаксации значений энергии расчетных кристаллитов и визуального анализа структуры отрелаксированных положений атомов вблизи границ раздела делался вывод об относительной устойчивости и сравнительной энергетической выгоде той или иной границы.

В частности, удельную энергию границы раздела γ можно формально определить как:

$$\gamma = \frac{E_{rel} - E_{bulk}^{met} - E_{bulk}^{mag}}{2S_{yz}}, \quad (1)$$

где E_{rel} – энергия двухслойного кристаллита после релаксации; E_{bulk}^{met} и E_{bulk}^{mag} – энергии слоев того же размера в идеальных кристаллах металлического железа и магнетита, соответственно; S_{yz} – площадь поперечного сечения, параллельного плоскости yOz расчетного кристаллита. Однако релаксация идеального кристалла позволяет определить только энергию, приходящуюся на его структурную единицу. В железе, где все атомы идентичны, энергия структурной единицы не отличается от энергии из расчета на один атом, E_{bulk}^{Fe} , так что энергию для идеального слоя железа легко определить из соотношения:

$$E_{bulk}^{met} = N_{Fe} \cdot E_{bulk}^{Fe}, \quad (2)$$

где N_{Fe} – суммарное количество атомов железа в металлическом слое. Однако в слое магнетита, где для обеспечения идентичности строения обеих границ раздела необходимо добавлять единичный монослой *B*-типа, стехиометричность нарушается, и для оценки энергии слоя как целого необходимо знать не только энергию структурной единицы (Fe_3O_4), но и энергию каждого атома в отдельности (т.е. E_{bulk}^{FeA} , E_{bulk}^{FeB} и E_{bulk}^O для атомов железа на подрешетках *A* и *B* и атомов кислорода, соответственно). В этом случае энергию слоя магнетита можно оценить из соотношения, аналогичного формуле (2),

$$E_{bulk}^{mag} = N_{FeA} \cdot E_{bulk}^{FeA} + N_{FeB} \cdot E_{bulk}^{FeB} + N_O \cdot E_{bulk}^O, \quad (3)$$

где N_{FeA} , N_{FeB} и N_{O} – количество атомов железа A -типа и B -типа и атомов кислорода в слое оксида, соответственно.

Оценки на основе соотношения (3) реальны в случае использования полуэмпирических потенциалов, в которых энергия, приходящаяся на каждый атом, как правило, однозначно определена. Поэтому расчеты с использованием потенциалов типа ReaxFF позволяют непосредственно сравнивать удельные поверхностные энергии границ раздела с различными вариантами относительного сдвига слоя магнетита относительно слоя металла. В то же время, для первопринципных расчетов, где энергии, приходящиеся на отдельный атом в многокомпонентных соединениях, невозможно определить в принципе, абсолютные значения поверхностной энергии также получить нельзя. Однако поскольку в нашем случае различные варианты соединения слоев металла и оксида различаются только относительным сдвигом остальных идентичных слоев, можно однозначно определить наиболее энергетически выгодный вариант (с наименьшей полной энергией $E_{\text{rel}}^{\text{min}}$) и оценить проигрыш в удельной поверхностной энергии остальных вариантов относительно наиболее энергетически выгодного

$$\Delta\gamma^{(i)} = \frac{E_{\text{rel}}^{(i)} - E_{\text{rel}}^{\text{min}}}{2S_{yz}}, \quad (4)$$

где индекс i указывает на тип относительного сдвига слоев согласно рис. 3. Этой информации достаточно для оценки применимости различных типов эмпирических потенциалов для дальнейших исследований поведения границ раздела с помощью молекулярно-динамического моделирования.

Для визуализации результатов расчетов использовалась программа OVITO (Open Visualization Tool) [22].

Результаты моделирования

Минимизация энергии расчетных кристаллитов с использованием разных версий потенциала ReaxFF продемонстрировала, что из-за изначального сжатия магнетита вдоль границы, для всех потенциалов в процессе минимизации энергии расчетной ячейки наблюдается расширение оксида в перпендикулярном границе направлении $[100]$, в результате чего параметр решетки магнетита в этом направлении увеличивается (8.67, 8.68 и 8.52 Å для потенциалов Reax(A), Reax(P) и Reax(S), соответственно). В свою очередь, в плоскости yOz кристаллы железа и магнетита в процессе релаксации подстраиваются друг под друга и параметр решетки магнетита (8.41, 8.38 и 8.37 Å для потенциалов Reax(A), Reax(P) и Reax(S), соответственно) оказывается близким к идеальному.

Общий характер расположения атомов для всех вариантов границ раздела не изменился, но наблюдалось изменение относительного расположения атомов в приграничных монослоях железа и магнетита, которое сильно зависело от типа границы, но сравнительно слабо менялось для разных вариантов потенциала ReaxFF, рис. 4. В частности, при относительных сдвигах слоев по типу 0 и 3 наблюдается сильная перестройка граничных слоев, при которой часть атомов металла сдвигается к поверхностному монослою магнетита, а при типе 3, кроме того, атомы кислорода из этого монослоя заметно смещаются в направлении слоя железа. Для сдвигов по типам 1 и 2 граничные монослои как магнетита, так и железа остаются плоскими, а кислород остается связанным с магнетитом. Основное различие состоит в степени смещения атомов кислорода в направлении слоя железа по сравнению с исходной конфигурацией, довольно заметное для смещения типа 1 и практически отсутствующее для типа 2. За пределами граничного B -монослоя магнетита и первых двух граничных монослоев железа заметных изменений кристаллической структуры не наблюдается ни для слоя магнетита, ни для слоя металла.

Аналогичные расчеты, проведенные в рамках теории функционала плотности, продемонстрировали только взаимную подстройку слоев металла и магнетита, но граничные плоскости и в железе, и в магнетите остаются практически плоскими, а сколько-нибудь заметного смещения кислорода в поверхностном монослое магнетита в направлении металла не наблюдается. В случае использования эмпирических потенциалов, такое поведение демонстрирует только граница типа 2.

Для оценки удельных поверхностных энергий границ раздела с использованием соотношений (3) и (4) для всех рассмотренных комбинаций сдвигов слоев и эмпирических межатомных потенциалов

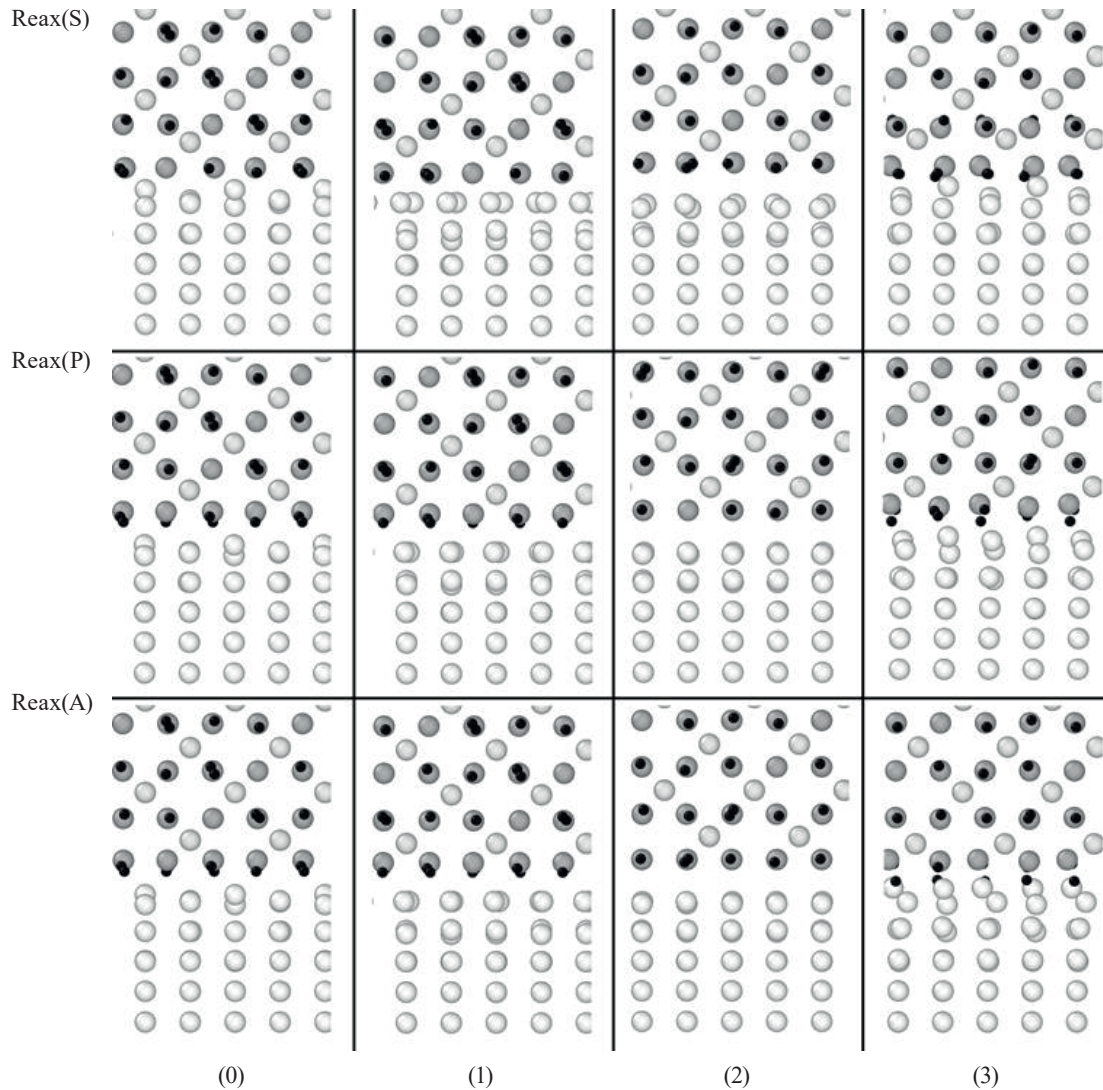


Рис. 4. Конфигурации расчетной ячейки вблизи границы раздела для случаев, когда область магнетита терминирована B -плоскостями, после релаксации с использованием разных полуэмпирических потенциалов. Вид в направлении $[010]$. Цветовая схема аналогична рис. 2. Цифры под колонками указывают на тип относительного сдвига слоев железа и магнетита

были рассчитаны средние значения энергий атомов железа и кислорода (при наличии) в атомных монослоях как функция удаления атомного слоя от границы. Результаты расчета показаны на рис. 5.

Как легко видеть, заметное изменение энергий, приходящихся на один атом в монослой, характерно только для монослоев, непосредственно примыкающих к границе (в пределах одной элементарной ячейки для магнетита и 4–5 монослоев металла). При этом вблизи границы предсказания разных потенциалов заметно различаются, что особенно сильно выражено со стороны магнетита.

Для Reax(S) и Reax(A) графики по своему поведению похожи, в обоих случаях наблюдается стремление граничных атомов металла и атомов типа FeV достичь энергий атомов типа FeA, что облегчает вдавливание граничного слоя металла в оксид. Наиболее адекватно выглядит поведение границы типа 2, в которой граничные атомы FeV не так явно отклоняются от соответствующей средней энергии.

Для Reax(P) энергии граничных атомов не слишком отличаются от соответствующих энергий атомов кристалла. Граничные атомы металла и FeV стремятся к выравниванию своих энергий, а не к увеличению энергий до уровня атомов FeA. Наименьшее отклонение энергий граничных атомов от энергий атомов кристалла демонстрирует граница типа 2, что коррелирует с отмеченной ранее наименее выраженной перестройкой этой границы при релаксации энергии.

На достаточно больших удалениях от границы раздела средние значения энергий на атом выходят на практически постоянные значения, которые и были использованы в качестве энергий E_{bulk}^X , где X

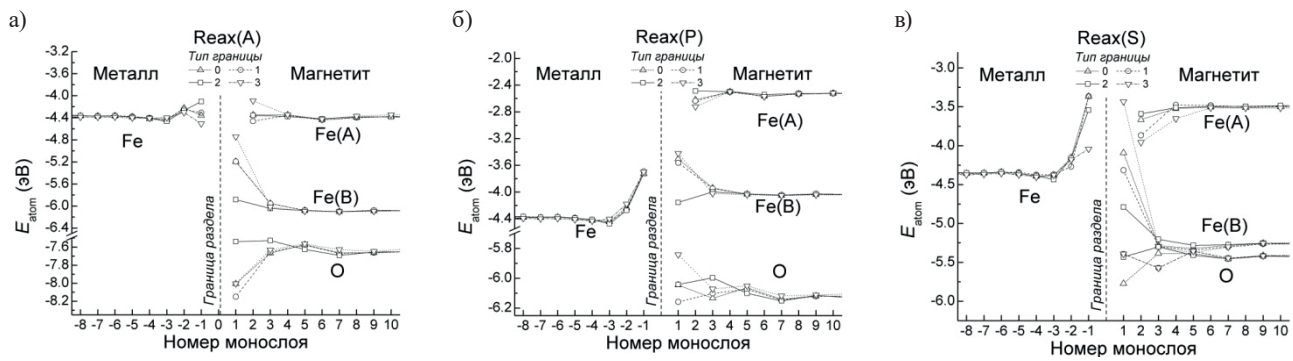


Рис. 5. Распределение энергий разных типов атомов по монослоям для разных потенциалов

указывает тип атома (табл. 1). Следует отметить, что эти величины несколько отличаются от значений, соответствующих релаксированным идеальным кристаллам, и автоматически учитывают поправки, вносимые упругой деформацией слоев железа и магнетита.

Таблица 1. Средние значения энергий разных типов атомов E_{bulk}^X , в эВ, для различных потенциалов межатомного взаимодействия

Тип атома	Reax(S)	Reax(P)	Reax(A)
Fe (металл)	-4.33	-4.36	-4.34
FeA	-3.51	-2.53	-4.39
FeB	-5.27	-4.03	-6.08
O	-5.41	-6.12	-7.66

Результаты вычислений удельной поверхностной энергии для разных потенциалов и типов границ приведены в табл. 2. Как можно видеть, для потенциалов Reax(S) и Reax(P) удельная поверхностная энергия имеет достаточно типичный для границ раздела порядок величины $\sim 1-2$ Дж/м², что согласуется с расчетами других авторов [7, 8]. В то же время, в случае потенциала Reax(A) удельные поверхностные энергии выглядят заметно заниженными, а для границы типа 1 – нереалистичными.

Таблица 2. Удельные поверхностные энергии разных типов границы для трех потенциалов межатомного взаимодействия

Тип границы	γ , Дж/м ²		
	Reax(S)	Reax(P)	Reax(A)
0	2.21	1.65	0.19
1	1.18	1.45	-0.01
2	2.09	1.23	0.77
3	1.47	2.17	0.31

Согласно проведенным расчетам, границы типа 0 и 3 энергетически невыгодны для всех рассмотренных потенциалов. Среди двух оставшихся типов границ наименьшую энергию в случае использования потенциалов Reax(S) и Reax(A) имеет граница типа 1, а в случае потенциала Reax(P) – граница типа 2.

Для сравнения, в случае первопринципных расчетов наиболее выгодной оказывается граница типа 2, тогда как остальные границы имеют более высокую поверхностную энергию ($\Delta\gamma^{(0)} \approx \Delta\gamma^{(1)} \approx 0.7$ Дж/м² и $\Delta\gamma^{(3)} \approx 1.9$ Дж/м²). Исходя из этих данных, наиболее предпочтительным потенциалом для использования при моделировании физических процессов на границе раздела металл-оксид представляется потенциал Reax(P), корректно определяющий границу типа 2 как наиболее энергетически выгодную и правильно указывающий на сравнительно небольшое отличие энергий границ типов 0 и 1 и резкий проигрыш в энергии для границы типа 3 по сравнению с границей типа 2, хотя количественно различия между энергиями границ разного типа для Reax(P) оказываются заметно меньше ($\Delta\gamma^{(0)} \approx 0.4$ Дж/м², $\Delta\gamma^{(1)} \approx 0.2$ Дж/м² и $\Delta\gamma^{(3)} \approx 0.9$ Дж/м²).

Заключение

В ходе проведенного исследования были протестированы различные модели границы раздела металл-оксид для двухслойной системы железо-магнетит. Основные выводы можно сформулировать следующим образом.

1. В случае *B*-терминированного слоя магнетита наименее выраженные искажения в приповерхностных монослоях металла и магнетита при релаксации с потенциалами типа ReaxFF продемонстрировал вариант сопряжения слоев магнетита и металла со сдвигом типа 2. Заметные перестройки положений атомов в приграничных слоях, наблюдавшиеся для границ раздела остальных типов, плохо согласуются с предсказаниями первопринципного моделирования.

2. Для всех использованных потенциалов типа ReaxFF границы раздела типов 0 и 3 оказываются существенно энергетически невыгодными, а наименьшие удельные поверхностные энергии имеют границы типов 1 (для потенциалов ReaxFF(A) и ReaxFF(S)) или 2 (для ReaxFF(P)).

3. Первопринципные расчеты предсказывают, что наиболее низкую удельную поверхностную энергию имеет граница типа 2, причем выигрыш в поверхностной энергии у нее достаточно заметен по сравнению с границами других типов, особенно типа 3.

4. Сравнение результатов первопринципного моделирования с предсказаниями эмпирических потенциалов свидетельствует о том, что только потенциал ReaxFF(P) корректно идентифицирует границы типа 2 как обладающие наименьшей поверхностной энергией, а также более-менее правильно качественно отражает соотношение между энергиями границ других типов. Это позволяет рекомендовать именно эту версию потенциала для проведения молекулярно-динамических расчетов при изучении физических процессов вблизи границ раздела между железом и магнетитом.

Благодарности

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», <http://ckp.nrcki.ru/>.

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

Н.Д. Комаров – проведение численных расчетов, обработка результатов, подбор литературных источников, обсуждение результатов, подготовка текста статьи.

В.А. Бородин – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, проведение численных расчетов, обсуждение результатов, редактирование текста.

Список литературы

1. *Исаев Р.Ш., Джумаев П.С.* Взаимодействие хромового покрытия с оболочкой ТВЭЛа из стали ЭП823-III в диапазоне температур 420–650 °C // Вестник НИЯУ МИФИ, 2024. Т. 13. № 4. С. 273–281. DOI: 10.26583/vestnik.2024.354.
2. *Martinelli L., Jean-Louis C., Fanny B.C.* Oxidation of steels in liquid lead bismuth: Oxygen control to achieve efficient corrosion protection // Nuclear Engineering and Design, 2011. V. 241. № 5. С. 1288–1294. DOI: /10.1016/j.nuceng-des.2010.07.039.
3. *Чичеватов Г.Д., Стегайлов В.В.* Точечные дефекты в шпинелях FeMe₂O₄ (Me = Fe, Cr): исследование в рамках метода DFT+U // Журнал экспериментальной и теоретической физики, 2024. Т. 166. № 3. С. 347–373. DOI: 10.31857/S0044451024090062.

4. Martinelli L., Balbaud-Célrier F. Modelling of the oxide scale formation on Fe-Cr steel during exposure in liquid lead-bismuth eutectic in the 450–600 °C temperature range // *Materials and Corrosion*, 2011. V. 62. P. 531–542. DOI: 10.1002/maco.201005871.
5. Davenport A.J., Oblonsky L.J., Ryan M.P., Toney M.F. The Structure of the Passive Film That Forms on Iron in Aqueous Environments // *Journal of The Electrochemical Society*, 2000. V. 147. Iss. 6. P. 2162–2173. DOI: 10.1149/1.1393502.
6. Pentcheva R., Wendler F., Meyerheim H.L., Moritz W., Jedrecy N. and Scheffler M. Jahn-Teller Stabilization of a Polar Metal Oxide Surface: Fe₃O₄ // *Physical Review Letters*, 2005. V. 94. 126101. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.126101.
7. Forti M.D., Alonso P.R., Gargano P.H., Balbuena P.B., Rubiolo G.H. A DFT study of atomic structure and adhesion at the Fe (BCC)/Fe₃O₄ interfaces // *Surface Science*, 2016. V. 647. P. 55–65. DOI: 10.1016/j.susc.2015.12.013.
8. Forti M.D., Alonso P.R., Gargano P.H., Rubiolo G.H. Adhesion Energy of the Fe(BCC)/ Magnetite Interface within the DFT Approach // *Procedia Materials Science*, 2015. V. 8. P. 1066–1072. DOI: 10.1016/j.mspro.2015.04.169.
9. Rowan A., Patterson C., Gasparov L. Hybrid density functional theory applied to magnetite: Crystal structure, charge order, and phonons // *Physical Review B*, 2009. V. 79. P. 1–18. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.205103.
10. Zhang Z., Satpathy S. Electron states, magnetism, and the Verwey transition in magnetite // *Physical Review B*, 1991. V. 44. P. 13319–13331. DOI: 10.1103/PhysRevB.44.13319.
11. Koch W., Holthausen M.C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. 2nd Ed. Wiley-WCH: Weinheim, 2001. 293 p. DOI: 10.1002/3527600043.
12. Aryanpour M., van Duin A.C.T., Kubicki J.D. Development of a Reactive Force Field for Iron–Oxyhydroxide System // *The Journal of Physical Chemistry A*, 2010. V. 114. Iss. 21. P. 6298–6307. DOI: 10.1021/jp101332k.
13. Pitman M.C., van Duin A.C.T. Dynamics of Confined Reactive Water in Smectite Clay–Zeolite Composites // *Journal of the American Chemical Society*, 2012. V. 134. № 6. P. 3042–3053. DOI: 10.1021/ja208894m.
14. Shin Y.K., Kwak H., Vasenkov A.V., Sengupta D., van Duin A.C.T. Development of a ReaxFF Reactive Force Field for Fe/Cr/O/S and Application to Oxidation of Butane over a Pyrite-Covered Cr₂O₃ Catalyst // *ACS Catal*, 2015. V. 5 (12). P. 7226–7236. DOI: 10.1021/acscatal.5b01766.
15. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. New York: Pergamon, 1985. 321 p.
16. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *Journal of Computational Physics*, 1995. V. 117. I. 1. P. 1–19. DOI: 10.1006/jcph.1995.1039.
17. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // *Physical Review B*, 1999. V. 59. P. 1758. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.1758.
18. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // *Physical Review Letters*, 1996. V. 77. P. 3865. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
19. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin zone integrations // *Physical Review B*, 1976. V. 13. P. 5188–5192. DOI: 10.1103/PhysRevB.13.5188.
20. Hirel P. AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files // *Computer Physics Communications*, 2015. V. 197. P. 212–219. DOI: 10.1016/j.cpc.2015.07.012.
21. Wechsler B.A., Lindsley D.H., Prewitt C.T. Crystal structure and cation distribution in titanomagnetites (Fe₃-xTi_xO₄) // *American Mineralogist*, 1984. V. 69. Iss. 7–8. P. 754–770.
22. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool Modelling // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010. V. 18. Iss. 1. Article id. 015012. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.

Modeling the atomic structure of iron-magnetite interface

N. D. Komarov^{1,*}, V. A. Borodin^{1,2}

¹ National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409, Russia

² National Research Center «Kurchatov Institute», Moscow, 123182, Russia

* komarovnd@mail.ru

Received May 16, 2025; revised September 15, 2025; accepted September 23, 2025

The paper deals with the modeling of atomic structure of an interface between metallic iron and its oxide Fe_3O_4 (magnetite). Such boundaries arise, for example, during the formation of an oxide layer on the surfaces of pipes made of ferritic-martensitic steels used for protection against high-temperature corrosion in aggressive oxygen-containing environments, in particular, in liquid lead and lead-bismuth eutectics, which are considered as coolants in advanced fast neutron reactors. Theoretically possible versions of coherent surface conjugation of the crystal lattices of iron and magnetite are considered and the specific surface energies of corresponding interfaces are estimated using various interatomic interaction potentials and first-principles calculations. This made it possible to identify. The obtained results made it possible to identify the atomic structure of the interface between iron and magnetite, select configurations with the minimum energy for each potential used, and determine the most suitable interatomic interaction potential for further studies of the effects of irradiation on the iron-magnetite interface.

Keywords: steel, magnetite, oxidation, protective coatings, interphase boundaries, molecular dynamics, interatomic interaction potential.

References

1. Isaev R.S., Djumaev P.S. Vsaimodeistvie chromovogo pokritiya s obolochkoy TVELa iz stali EP823-SH v diapazone temperatur 420–650 °C. [Interaction of chromium coating with the cladding of a fuel element made of EP823-Sh steel in the temperature range of 420–650 °C]. Vestnik NIYaU MIFI, 2024. Vol. 13. No. 4. Pp. 273–281 (in Russian). DOI: 10.26583/vestnik.2024.354.
2. Martinelli L., Jean-Louis C., Fanny B.C. Oxidation of steels in liquid lead bismuth: Oxygen control to achieve efficient corrosion protection. Nuclear Engineering and Design, 2011. Vol. 241. No. 5. Pp. 1288–1294. DOI: 10.1016/j.nuceng-des.2010.07.039.
3. Chichevatov G.D., Stegailov V.V. Tochechie defecti v shpinelyah FeMe_2O_4 (Me = Fe, Cr): issledovanie v ramkah metoda DFT+U [Point defects in FeMe_2O_4 spinels (Me = Fe, Cr): a study using the DFT+U method]. Jour. Exp. Teor. Fiz., 2024. Vol. 166. No. 3. Pp. 347–373 (in Russian). DOI: 10.31857/S0044451024090062.
4. Martinelli L., Balbaud-Célérrier F. Modelling of the oxide scale formation on Fe-Cr steel during exposure in liquid lead-bismuth eutectic in the 450–600 °C temperature range. Materials and Corrosion, 2011. Vol. 62. Pp. 531–542. DOI: 10.1002/maco.201005871.
5. Davenport A.J., Oblonsky L.J., Ryan M.P., Toney M.F. The Structure of the Passive Film That Forms on Iron in Aqueous Environments. Journal of The Electrochemical Society, 2000. Vol. 147. Iss. 6. Pp. 2162–2173. DOI: 10.1149/1.1393502.
6. Pentcheva R., Wendler F., Meyerheim H. L., Moritz W., Jedrecy N. and Scheffler M. Jahn-Teller Stabilization of a Polar Metal Oxide Surface: Fe_3O_4 . Physical Review Letters, 2005. 94. 126101. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.126101.
7. Forti M.D., Alonso P.R., Gargano P.H., Balbuena P.B., Rubiolo G.H. A DFT study of atomic structure and adhesion at the Fe (BCC)/ Fe_3O_4 interfaces. Surface Science, 2016.Vol. 647. Pp. 55–65. DOI: 10.1016/j.susc.2015.12.013.
8. Forti M.D., Alonso P.R., Gargano P.H., Rubiolo G.H. Adhesion Energy of the Fe(BCC)/Magnetite Interface within the DFT Approach. Procedia Materials Science, 2015. Vol. 8. Pp. 1066–1072. DOI: 10.1016/j.mspro.2015.04.169.
9. Rowan A., Patterson C., Gasparov L. Hybrid density functional theory applied to magnetite: Crystal structure, charge order, and phonons. Physical Review B, 2009. Vol. 79. Pp. 1–18. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.205103.

10. Zhang Z., Satpathy S. Electron states, magnetism, and the Verwey transition in magnetite. *Physical Review B*, 1991. Vol. 44. Pp. 13319–13331. DOI: 10.1103/PhysRevB.44.13319.
11. Koch W., Holthausen M.C. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*. 2nd Ed. Wiley-WCH, Weinheim, 2001. 293 p. DOI: 10.1002/3527600043.
12. Aryanpour M., van Duin A.C.T., Kubicki J.D. Development of a Reactive Force Field for Iron–Oxyhydroxide System. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2010. Vol. 114. Iss. 21. Pp. 6298–6307. DOI: 10.1021/jp101332k.
13. Pitman M.C., van Duin A.C.T. Dynamics of Confined Reactive Water in Smectite Clay–Zeolite Composites. *Journal of the American Chemical Society*, 2012. Vol. 134. No. 6. Pp. 3042–3053. DOI: 10.1021/ja208894m.
14. Shin Y.K., Kwak H., Vasenkov A.V., Sengupta D., van Duin A.C.T. Development of a ReaxFF Reactive Force Field for Fe/Cr/O/S and Application to Oxidation of Butane over a Pyrite-Covered Cr₂O₃ Catalyst. *ACS Catal*, 2015. Vol. 5(12). Pp. 7226–7236. DOI: 10.1021/acscatal.5b01766.
15. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. *The stopping and range of ions in solids*. New York, Pergamon, 1985. 321 p.
16. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995. Vol. 117. Iss. 1. Pp. 1–19. DOI: 10.1006/jcph.1995.1039.
17. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B*, 1999. V. 59. P. 1758. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.1758.
18. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review B*, 1996. Vol. 77. Pp. 3865. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
19. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin zone integrations *Physical Review B*, 1976. Vol. 13. Pp. 5188–5192. DOI: 10.1103/PhysRevB.13.5188.
20. Hirel P. AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files. *Computer Physics Communications*, 2015. Vol. 197. Pp. 212–219. DOI: 10.1016/j.cpc.2015.07.012.
21. Wechsler B.A., Lindsley D.H., Prewitt C.T. Crystal structure and cation distribution in titanomagnetites (Fe₃-xTi_xO₄). *American Mineralogist*, 1984. Vol. 69. Iss. 7–8. Pp. 754–770.
22. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010. Vol. 18. Iss. 1. Article id. 015012. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.

УДК 539.25, 537.533.35

Полиэнергетическая имплантация ионов гелия в кремний

© 2025 г. С. Г. Шемардов¹, А. В. Беклемишева¹, П. А. Александров¹, А. Л. Васильев^{1,2},
В. Н. Беклемишев^{1,3}

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», г. Москва, 123182, Россия

² Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет),
г. Долгопрудный, Московская область, 141701, Россия

³ Государственный университет управления, г. Москва, Рязанский пр-т, д. 99, 109542, Россия

В работе исследован метод полиэнергетической имплантации ионов гелия в монокристаллический кремний с целью формирования захороненных слоев высокой пористости, перспективных для создания структур типа «кремний на изоляторе». Создание захороненных пористых слоев имплантацией ионов гелия и последующего высокотемпературного отжига весьма перспективно для дальнейшего получения структур «кремний ни на чем» и «кремний на изоляторе». Однако пористость захороненных слоев ограничивают явления блистеринга и флекинга, вызывающие механические повреждения поверхностного кремния при больших дозах имплантации. Цель данной работы – увеличение дозы имплантации ионов гелия и, соответственно, повышение пористости захороненного слоя после высокотемпературного отжига без ухудшения качества поверхностного кремниевого слоя. Представлен метод, заключающийся в создании протяженного концентрационного профиля с концентрацией $4 \cdot 10^{21}$ He⁺/см³ при последовательной имплантации энергиями 70 и 35 кэВ. Высокотемпературный отжиг 150 °С/30 мин приводит к возникновению огромных пор диаметром примерно 130 нм вблизи первоначального концентрационного максимума для энергии 70 кэВ. Сделан вывод о том, что метод полиэнергетической имплантации позволяет существенно повысить дозу имплантации без возникновения поверхностных дефектов, а регулирование температуры отжига открывает возможности управления распределением и размером пор в захороненном слое.

Ключевые слова: имплантации ионов гелия, монокристаллические пластины кремния, докритическая доза имплантации, КНИ, захороненные слои высокой пористости.

Введение

Имплантация ионов гелия в кремний с целью получения захороненных пористых слоев уже длительное время привлекает внимание исследователей, причем подавляющее большинство работ посвящено облучению малыми и средними дозами [1–4], и значительно меньше исследований посвящено имплантации больших доз ($> 10^{17}$ He⁺/см²) [5–7], хотя эта область чрезвычайно перспективна для получения структур «кремний ни на чем» (silicon on nothing) и «кремний на изоляторе» (КНИ).

Постановка задачи

В предыдущих наших работах [5] отмечалось, что серьезными проблемами, которые возникают в случае имплантации больших доз, являются механические повреждения поверхностного кремниевого слоя – блистеринг (вспучивание) и флекинг (шелушение). Причем это наиболее актуально для

✉ А. В. Беклемишева: annabekl@ya.ru

Поступила в редакцию: 08.08.2025

После доработки: 22.09.2025

Принята к публикации: 23.09.2025

EDN YATPCV

энергий более 40 кэВ, когда критическая доза имплантации (доза, при которой при последующем отжиге не наблюдаются блистеринг и флекинг) немного превышает $1 \cdot 10^{17}$ $\text{He}^+/\text{см}^2$. В этом случае необходима разработка специальных методов имплантации и отжига. Одни из них – метод докритических имплантаций и отжигов. Суть метода заключается в том, что процессы облучения и отжига разбиты на циклы. Цикл состоит из имплантации дозы, меньше критической, и отжига при температуре более 800 °С для удаления гелия из газовых пузырьков и образования пор (пустот). Затем цикл повторяется. Количество циклов определяет пористость захороненного слоя.

В настоящей работе рассматривается метод высокодозной имплантации ионов гелия в кремний, разработанный авторами, – полиэнергетическая имплантация. Для энергий имплантации 50–70 кэВ критическая доза имплантаций превышает $1 \cdot 10^{17}$ $\text{He}^+/\text{см}^2$, а для энергии 33 кэВ она составляет $2 \cdot 10^{17}$ $\text{He}^+/\text{см}^2$. Для энергии 70 кэВ концентрация в максимуме распределения составляет $4 \cdot 10^{21}$ $\text{He}^+/\text{см}^3$. Поскольку возникающие при данной концентрации напряжения при перераспределении гелиевых пузырьков не приводят к блистерингу и флекингу при отжиге, авторы предположили, что создание протяженного профиля с постоянной докритической концентрацией ($< 4 \cdot 10^{21}$ $\text{He}^+/\text{см}^3$) не должно вызывать механических повреждений в поверхностном кремнии. Этот результат может быть получен при последовательной имплантации 70 кэВ ($1 \cdot 10^{17}$ $\text{He}^+/\text{см}^2$) и 35 кэВ ($0.9 \cdot 10^{17}$ $\text{He}^+/\text{см}^2$).

Результаты распределения пор в кремнии, возникающие при отжиге после имплантации, проведенной в режимах, приведены далее.

Оборудование и методика эксперимента

Кремниевые пластины (100) облучались ионами гелия на установке ИЛУ-100. Температура имплантации была около 150 °С. Внедрение ионов производилось двумя энергиями 70 и 35 кэВ дозами $1 \cdot 10^{17}$ и $0.9 \cdot 10^{17}$ $\text{He}^+/\text{см}^2$, соответственно, что приводило к созданию протяженного профиля гелия с постоянной концентрацией около $4 \cdot 10^{21}$ $\text{He}^+/\text{см}^3$. Отжиг образца осуществлялся при температуре 1150°/30 мин в воздушной среде.

Исследование поперечных срезов монокристаллического кремния после ионной имплантации и отжига проводим методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Подготовку срезов осуществляли с помощью фокусированного ионного пучка в растровом электронно-ионном микроскопе HeliosNanjLab™600i (Thermo Fisher Scientific, США). Полученные поперечные срезы были ориентированы параллельно плоскостям {110} Si. Исследование срезов осуществляли методом ПЭМ на микроскопе Osiris (Thermo Fisher Scientific, США).

Экспериментальные результаты

На рис. 1 приведен поперечный срез образца, имплантированного в режиме, параметры которого приведены выше, и отожженного при температуре 1150°/30 мин в воздушной атмосфере. Огромные

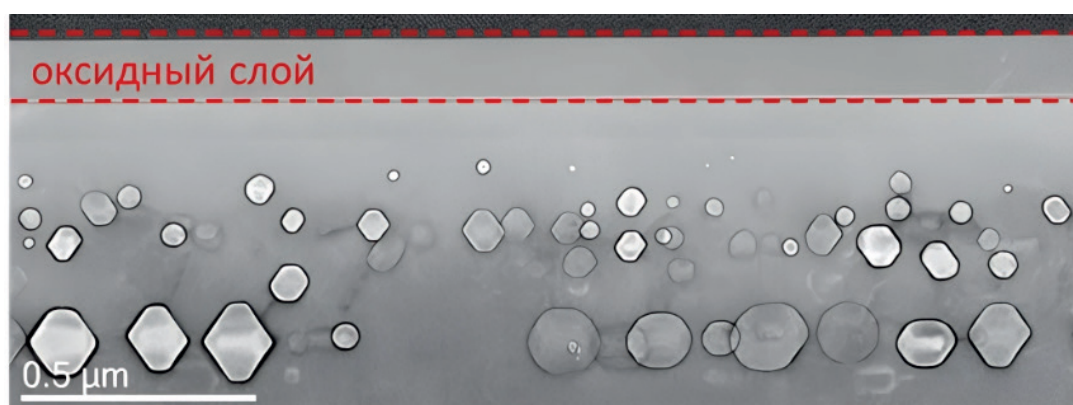


Рис. 1. ПЭМ снимки распределения пор в кремнии, возникающих при отжиге при температуре 1150 °/30 мин в воздушной атмосфере

поры размером до 130 нм расположены в зоне от 420 до 580 нм от нижней границы окисного слоя. Поры полностью отсутствуют в глубине кристалла ниже 580 нм от границы окисного слоя и в зоне 150 нм от него. Между зоной, свободной от преципитатов, и слоем, содержащим огромные преципитаты, расположена область содержащая относительно небольшое количество пор диаметром 80 нм и меньше. Чтобы объяснить наблюдаемую картину распределения, необходимо вернуться к первоначальному распределению имплантируемых ионов. В результате имплантации ионов гелия энергиями 70 и 35 кэВ формируется область постоянной концентрации He^+ от 350 до 550 нм, эти точки соответствуют максимуму концентрации ионов гелия для 35 и 70 кэВ, соответственно. От поверхности до 350 нм и от 550 до 800 нм расположены зоны, где концентрация гелия меняется от нуля до $4 \cdot 10^{21} \text{ He}^+/\text{см}^3$. Если учитывать образование поверхностного окисла, то зона крупных пор совпадает с первоначальным концентрационным максимумом для энергии 70 кэВ, а небольшие поры группируются около концентрационного максимума для энергии 30 кэВ. Отжиг имплантированного образца приводит к резкому перераспределению гелия и гелиевых пузырьков. Полностью исчезает нижняя переходная область от 550 до 800 нм. Аналогичная картина наблюдалась при имплантации ионов гелия энергией 50 кэВ дозой $1 \cdot 10^{17} \text{ He}/\text{см}^2$ [5, 9]. Возможное объяснение наблюдаемого явления заключается в том, что в концентрационный максимум с напряжениями, близкими к пределу прочности, и большой концентрацией микропузырьков гелия является барьером для диффундирующих гелия и точечных дефектов, приводя к созданию в нижней переходной области сильнодефектного кремния. При температуре рекристаллизации (550–600 °С) происходит выдавливание гелия и гелиевых пузырьков из глубины кристалла к первоначальному концентрационному максимуму и образованию огромных гелиевых пузырьков. Вытеснение гелия, вакансий и гелиевых пузырьков при рекристаллизации сильно поврежденной и аморфной области отмечали многие исследователи [6, 8, 9].

В верхней переходной области близость поверхности является стоком для диффундирующего гелия и точечных дефектов и в ней, как и в области постоянной концентрации, при низких температурах отжига наблюдается небольшой рост газовых пузырьков до 10–15 нм.

При температурах свыше 800 °С начинается активный выход гелия из пузырьков и активируются процессы миграции и коалесценции. Зона огромных газовых пузырьков трансформируется в огромные поры, являющиеся эффективным местом стока для более мелких пор.

Таким образом, после отжига 1150 °С формируется зона огромных пор размером до 130 нм в зоне первоначального концентрационного максимума для энергии 70 кэВ, и лишь значительно меньшее количество мелких пор диаметром около 50 нм остается вблизи первоначального концентрационного максимума для энергии 35 кэВ.

Выводы

Метод полиэнергетической имплантации, при котором последовательной имплантацией ионов гелия двумя энергиями (70 и 35 кэВ) создается постоянный протяженный докритический концентрационный профиль гелия ($4 \cdot 10^{21} \text{ He}^+/\text{см}^3$), позволяет значительно увеличить внедренную дозу ионов без явлений блистеринга и флекинга при последующем отжиге. Концентрационный максимум большей энергии имплантации есть центр сосредоточений огромных пор размером ~ 130 нм. В области протяженного концентрационного профиля остаются еще поры меньшего размера 50–70 нм, в основном вблизи концентрационного максимума меньшей энергии (35 кэВ). Увеличение температуры отжига до 1300–1350 °С возможно приведет к сосредоточению всех пор в зоне концентрационного максимума большей энергии имплантации.

Финансирование

Работа выполнена при поддержке Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» НИОКР Центра «Разработка новых имплантационных методов получения диэлектрических промежуточных слоев в полупроводниковых подложках для систем управления термоядерных установок» (приказ № 25 от 9 января 2025 г.).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Вклад авторов

С.Г. Шемардов – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования, разработка концепции исследования, разработка методик измерения, участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

А.В. Беклемишева – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования, разработка концепции исследования, разработка методик измерения, анализ нормативной базы.

П.А. Александров – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования, разработка концепции исследования, разработка методик измерения, участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

А.Л. Васильев – микроскопия образцов, разработка концепции исследования, разработка методик измерения, анализ нормативной базы.

В.Н. Беклемишев – анализ нормативной базы, постановка эксперимента, выполнение экспериментальных работ, обработка результатов, проведение численных расчетов.

Список литературы

1. *Raineri V., Fallica P.G., Percolla G.* Gettering of metals by voids in silicon // *Journal of Applied Physics*, 1995. V.78. Iss.6. P. 3727–3735.
2. *Griffioen C.C., Evans J.H., de Jong P.C.* The annealing of helium-induced cavities in silicon and the inhibiting role of oxygen // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 1987. V. 27. Iss. 3. P. 360–363.
3. *Evans J.H.* Mechanisms of void coarsening in helium implanted silicon // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 2002. V. 196 (1-2). P. 125–134.
4. *Hasanuzzaman M., Haddara Y. M., Knights A.P.* A mathematical model for void evolution in silicon by helium implantation and subsequent annealing process // *Journal of Applied Physics*, 2012. V. 112. № 6. P. 064302–064312. DOI: 10.1063/1.4751437.
5. *Александров П.А., Емельяненко О.Е., Шемардов С.Г., Хмеленин Д.Н., Васильев А.Л.* Проблемы высокодозной ионной имплантации ионов гелия в кремний // *Кристаллография*, 2024. Т. 69. № 3. С. 494–504. DOI: 10.31857/S0023476124030155.
6. *Lockwood D.J., Labbé H.J., Siegele R., Haugen H.K.* Visible photoluminescence from helium-ion implanted carbon in silicon // *Applied Physics Letters*, 1995. V. 78 (10). P. 6185–6188.
7. *Ogura A.* Formation of patterned buried insulating layer in Si substrates by He⁺ implantation and annealing in oxidation atmosphere // *Applied Physics Letters*, 2003. V. 82(25). P. 4480–4482. DOI:10.1063/1.1586783.
8. *Beaufort M.F., Pizzagalli L., Gandy A.S.* Solid-phase epitaxial regrowth of amorphous silicon containing helium bubbles // *Journal of Applied Physics*, 2008. V. 104. Iss. 9. Art. number 094905. DOI: 10.1063/1.3009383.
9. *Vishnyakov V.M., Donnelly S.E., Carter G.* The use of cavities for gettering in silicon microelectronic devices // *Journal of Applied Physics*, 2003. V. 94. P. 422–426.

Poly-energy implantation of helium ions into silicon

S. G. Shemardov¹, A. V. Beklemisheva^{1,✉}, P. A. Alexandrov¹, A. L. Vasiliev^{1,2}, V. N. Beklemishev^{1,3}

¹ National Research Center «Kurchatov Institute», sq. Academician Kurchatova, 1, Moscow, 123182, Russia

² Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University),
Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia

³ State University of Management, Moscow, Ryazansky Prospekt, 99, 109542, Russia

✉ annabekl@ya.ru

Received August 08, 2025; revised September 22, 2025; accepted September 23, 2025

The method of polyenergetic implantation of helium ions into single-crystal silicon was investigated in order to form buried layers of high porosity, promising for creating structures of the “silicon-on-insulator” type. The creation of buried porous layers by implantation of helium ions and subsequent high-temperature annealing is very promising for further obtaining silicon-on-nothing and silicon-on-insulator structures. However, the porosity of the buried layers is limited by the blistering and flecking phenomena, which cause mechanical damage to the surface silicon at high implantation doses. The purpose of this work is to increase the helium ion implantation dose and, accordingly, increase the porosity of the buried layer after high-temperature annealing without deteriorating the quality of the surface silicon layer. We present a method consisting in creating an extended concentration profile with a concentration of $4 \cdot 10^{21}$ He⁺/cm³ with sequential implantation with energies of 70 and 35 keV. High-temperature annealing at 150 °C/30 min leads to the formation of huge pores with a diameter of approximately 130 nm near the initial concentration maximum for the energy of 70 keV. It is concluded that the polyenergetic implantation method allows a significant increase in the implanted dose without the occurrence of surface defects, and the regulation of the annealing temperature opens up possibilities for controlling the distribution and size of pores in the buried layer.

Keywords: helium ion implantation, single-crystal silicon wafers, subcritical implantation dose, buried high-porosity layers.

References

1. Raineri V., Fallica P.G., Percolla G. Gettering of metals by voids in silicon. *Journal of Applied Physics*, 1995. Vol. 78. Iss. 6. Pp. 3727–3735.
2. Griffioen C.C., Evans J.H., de Jong P.C. The annealing of helium-induced cavities in silicon and the inhibiting role of oxygen. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 1987. Vol. 27. Iss 3. Pp. 360–363.
3. Evans J.H. Mechanisms of void coarsening in helium implanted silicon. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 2002. Vol. 196 (1–2). Pp. 125–134.
4. Hasanuzzaman M., Haddara Y. M., Knights A.P. A mathematical model for void evolution in silicon by helium implantation and subsequent annealing process. *Journal of Applied Physics*, 2012. Vol. 112. No. 6. Pp. 064302–064312. DOI: 10.1063/1.4751437.
5. Alexandrov P.A., Emelianenko O.E., Shemardov S.G., Khmelenin D.N., Vasilyev A.L. Problemy vysokodoznoj ionnoj implantacii ionov geliya v kremnij [Problems of High-Dose Ion Implantation of Helium Ions into Silicon]. *Kristallografiya*, 2024. Vol. 69. No. 3. Pp. 494–504. DOI: 10.31857/S0023476124030155 (in Russian).
6. Lockwood D.J., Labbé H.J., Siegle R., Haugen H.K. Visible photoluminescence from helium-ion implanted carbon in silicon. *Applied Physics Letters*, 1995. Vol. 78 (10). Pp. 6185–6188A.
7. Ogura A. Formation of patterned buried insulating layer in Si substrates by He⁺ implantation and annealing in oxidation atmosphere. *Applied Physics Letters*, 2003. Vol. 82 (25). Pp. 4480–4482. DOI:10.1063/1.1586783.
8. Beaufort M.F., Pizzagalli L., Gandy A.S. Solid-phase epitaxial regrowth of amorphous silicon containing helium bubbles. *Journal of Applied Physics*, 2008. Vol. 104. Iss. 9. Art. number 094905. DOI:10.1063/1.3009383.
9. Vishnyakov V.M., Donnelly S.E., Carter G. The use of cavities for gettering in silicon microelectronic devices. *Journal of Applied Physics*, 2003. Vol. 94. Pp. 422–426.

УДК 621.039

Экспериментальное обоснование оптимальных параметров работы оборудования системы охлаждения инертной камеры

© 2025 г. А. В. Носов¹, С. Ю. Каледин¹, Р. Н. Шамсутдинов¹, С. М. Савчиц²

¹АО Научно-производственная фирма «Сосны», Димитровград, 433507, Россия

²АО «Прорыв», Москва, 119607, Россия

Цель работы – исследование параметров системы охлаждения аргона, заполняющего внутренний объем инертной камеры. Достижение указанной цели обеспечивалось последовательным решением следующих задач: выполнение численного моделирования работы блока охлаждения в воздушной среде; экспериментальное определение хладопроизводительности блока охлаждения в воздушной среде и верификация результатов численного моделирования; численное моделирование работы блока охлаждения в аргоне. Практическая значимость исследования определяется возможностью использования полученных результатов для оптимизации проектирования и эксплуатации систем охлаждения инертных камер в технологических процессах с высокими тепловыми нагрузками. Предложенные параметры работы оборудования обеспечивают необходимую температуру, стабильность инертной среды при минимальных энергозатратах и максимальной эффективности теплосъема. Основные результаты исследования показали, что оптимальная работа системы достигается при определенных соотношениях скорости циркуляции аргона, температуры этиленгликоля и частоты вращения вентиляторов. Установлены критические значения параметров, при которых происходит снижение эффективности охлаждения. По результатам выполнения работы были получены данные, которые могут быть использованы при проектировании систем охлаждения газовых сред инертных камер.

Ключевые слова: система охлаждения, пирохимическая переработка отработавшего ядерного топлива, защитная камера с инертной атмосферой.

Введение

Замкнутый ядерный топливный цикл предполагает переработку отработавшего топлива быстрых реакторов с применением как пирохимической, так и гидрометаллургической технологий [1]. Пирохимическая технология подразумевает переработку отработавшего топлива после одного года выдержки, что позволяет снизить затраты на его хранение [2]. В настоящее время разработки пирохимических процессов проводятся в США [3–5], Южной Корее [6] и России [7].

Для верификации переделов бескислородной пирохимической технологии необходимо обеспечивать инертную атмосферу высокой чистоты, которая технологически достижима в радиационно-защитных камерах. Для реализации пирохимических технологий в промышленных масштабах радиационно-защитные камеры должны быть большого объема.

К контролируемым параметрам инертной среды в радиационно-защитной камере относятся чистота (содержание примесей) и температура. Поддержание заданной чистоты инертного газа внутри камеры обеспечивается функционированием замкнутой системы рециркуляции аргона. За поддержание заданной температуры отвечает двухконтурная замкнутая система охлаждения.

✉ А. В. Носов: office@sosny.ru
С. М. Савчиц: savchitssm@pnproryv.ru

Поступила в редакцию: 16.07.2025
После доработки: 20.09.2025
Принята к публикации: 23.09.2025

Описание оборудования системы охлаждения аргона

Система охлаждения аргона предназначена для поддержания температуры газа, поступающего в системы регенерации аргона, не более 40 °С, а также обеспечения охлаждения аргона до требуемой температуры при тепловой мощности источников тепла, находящихся в камере, до 30 кВт.

Основными элементами системы охлаждения являются пять блоков охлаждения (БО), параллельно подключенные к установке охлаждения жидкости УВ-П-1-2-4DES5-R507A. БО размещаются в рабочем объеме инертной камеры на ее стенах, а установка охлаждения жидкости – вне камеры. В состав каждого БО входят радиальный вентилятор и теплообменник, смонтированные в общем корпусе (рис. 1).

На входе радиального вентилятора установлен газоход для отбора аргона из верхней части камеры. Радиальный вентилятор обеспечивает расход охлаждаемой среды (аргона) через межтрубное пространство теплообменника. Трубный пучок теплообменника состоит из шестнадцати рядов труб $\varnothing 6 \times 1$ мм. Площадь теплообменной поверхности составляет 6,8 м². Охлаждающая среда – водный раствор этиленгликоля с концентрацией 35 %. Отвод тепла от раствора этиленгликоля в окружающую среду осуществляется с помощью установки охлаждения жидкости УВ-П-1-2-4DES5-R507A.

Аэродинамическая схема радиального вентилятора представлена на рис. 2. Корпус вентилятора очерчивается по правилу конструкторского квадрата [8]. Сторона квадрата равна четверти раскрытия корпуса. Из вершин этого квадрата радиусами проводятся дуги окружности, по которым очерчивается корпус. Геометрические параметры радиального вентилятора рассчитывали по следующим формулам:

$$a = 0.25 \cdot l = 0.25 \cdot 167 = 42 \text{ мм};$$

$$r_4 = 0.5 \cdot (D_2 + a) = 0.5 \cdot (417 + 41.75) = 271 \text{ мм};$$

$$r_3 = r_4 + a = 229.375 + 41.75 = 271 \text{ мм};$$

$$r_2 = r_3 + a = 271.125 + 41.75 = 313 \text{ мм};$$

$$r_1 = r_2 + a = 312.875 + 41.75 = 355 \text{ мм}.$$

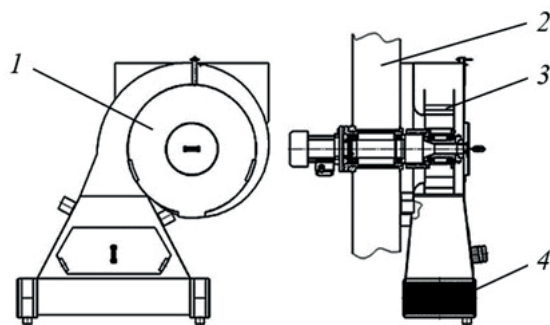


Рис. 1. Блок охлаждения: 1 – корпус; 2 – стенка камеры; 3 – лопаточный венец радиального вентилятора; 4 – теплообменник

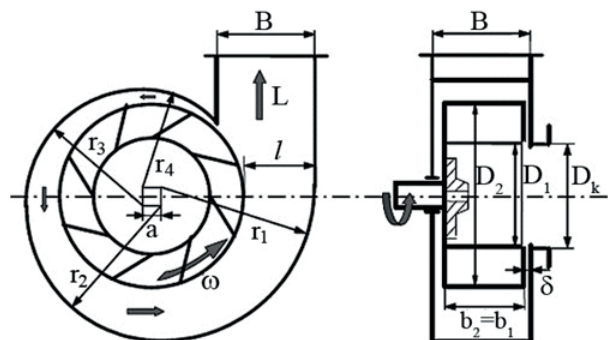


Рис. 2. Аэродинамическая схема радиального вентилятора

Для обеспечения температуры аргона в инертной камере не более 40 °С тепловая мощность, отводимая каждым БО, должна составлять не менее 6 кВт. Проверка выполнения данного требования является основной целью данной работы.

В связи с тем, что в ходе испытаний изделия отсутствовала возможность создания условий, эквивалентных условиям инертной камеры (в частности, по составу и температуре газовой среды), хладопроизводительность БО была определена методом численного моделирования. Верификация расчетной модели выполнена по результатам эксперимента на воздухе.

Таким образом, работа состояла из трех этапов:

– расчетное моделирование работы БО в воздушной среде;

- экспериментальное определение холодопроизводительности БО при работе в воздушной среде;
- верификация расчетной модели и расчетное моделирование работы БО в среде аргона.

Расчетное определение холодопроизводительности БО при работе в воздушной среде

Геометрическая модель БО приведена на рис. 3. Охлаждающая среда – водный раствор этиленгликоля с концентрацией 35 %. Охлаждаемая среда – воздух.

При расчете в качестве исходных данных приняты следующие параметры окружающей среды и режимов работы оборудования:

- температура воздуха – 25 °С;
- влажность воздуха – 40 %;
- скорость вращения радиального вентилятора – 750 об./мин;
- расход раствора этиленгликоля – 3 м³/ч;
- температура раствора этиленгликоля на входе в теплообменник – 1°С.

Теплофизические свойства материалов, используемые в расчетной модели БО, приведены в табл. 1 [9].

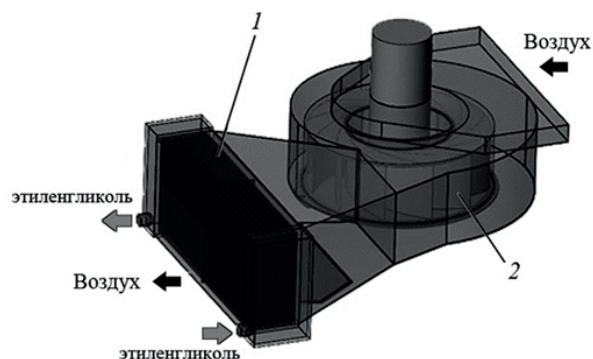


Рис. 3. Геометрическая модель блока охлаждения: 1 – теплообменник; 2 – лопаточный венец радиального вентилятора

Таблица 1. Теплофизические свойства материалов [9]

Материал	T , °С	ρ , кг/м³	λ , Вт/(м·К)	C , Дж/(кг·К)
Сталь 12Х18Н10Т ГОСТ 5632–72	27	7960	15.100	505
	100		16.400	470
	200		17.600	495
	300		18.800	516
Воздух	10	1.247	0.025	1000
	25	1.184	0.026	1000
	30	1.165	0.027	1000
36 % водный раствор этиленгликоля	– 20	1069	0.462	3510
	0	1063	0.466	3560
	20	1055	0.470	3620

Расчет параметров БО на основе представленной модели и исходных данных выполнялся с помощью программного комплекса SolidWorks Flow Simulation [10], позволяющего моделировать потоки жидкости и газа методом конечного объема. Результаты численного моделирования БО представлены в табл. 2 и на рис. 4, 5.

Таблица 2. Результаты расчета параметров БО при работе на воздухе

Расчетный параметр	Значение
Объемный расход воздуха на выходе БО, м³/ч	1190
Массовый расход воздуха на выходе БО, кг/ч	1464
Средняя температура воздуха на выходе БО, °С	12.40
Холодопроизводительность, кВт	5.12

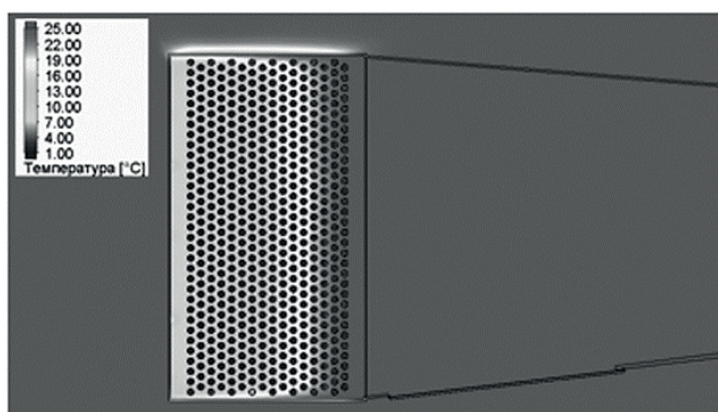


Рис. 4. Распределение температуры в центральном сечении теплообменника при работе на воздухе

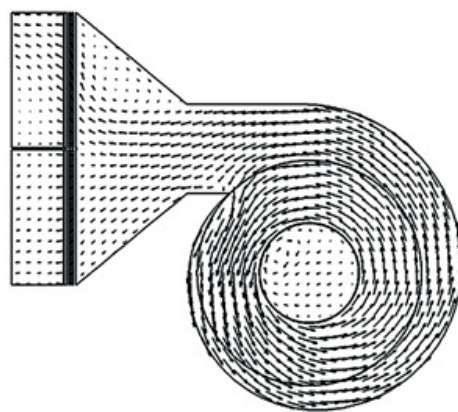


Рис. 5. Траектория газового потока в блоке охлаждения

Экспериментальное определение хладопроизводительности блока охлаждения при работе в воздушной среде

Экспериментальное определение хладопроизводительности БО выполнялось на экспериментальном стенде (рис. 6), состоящем из установки охлаждения жидкости и подключенного к ней БО. Для перемешивания охлажденного газа и усреднения его скорости и температуры на выходе из теплообменника БО устанавливался выпускной газопровод с проходным сечением 280×280 мм.

Хладопроизводительность БО определялась по тепловой мощности, отводимой от воздуха в теплообменнике БО. Для этого экспериментально определялись следующие параметры:

- температура воздуха на входе и выходе БО;
- объемный расход воздуха;
- атмосферное давление.

Температуру воздуха на входе в БО определяли с помощью стеклянного термометра керосинового типа СП-2, расположенного на уровне входа. Объемный расход и температуру воздуха на выходе из БО определяли с помощью анемометра Весоол ВС 9201. Для этого производили девять измерений температуры и влажности воздуха в выходном сечении выпускного газопровода. Положение анемометра

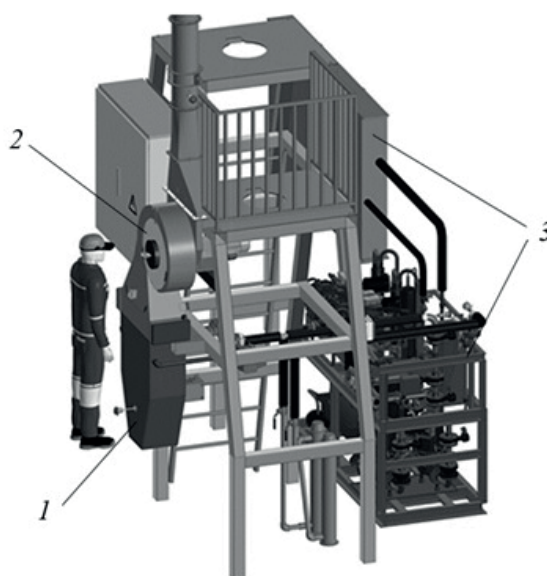


Рис. 6. 3D модель стенда для исследований: 1 – БО; 2 – выпускной газопровод; 3 – установка охлаждения жидкости

при измерениях – по квадратной сетке 3×3 позиции с шагом 95 мм по длине и ширине выходного сечения выпускного газохода. Атмосферное давление определяли с помощью измерителя абсолютного давления Testo 511.

Порядок проведения эксперимента:

- 1) включение установки охлаждения жидкости УВ-П-1-2-4DES5-R507A;
- 2) включение центробежного вентилятора БО;
- 3) регистрация контролируемых параметров после стабилизации температуры воздуха на входе и выходе теплообменника БО;
- 4) повторение измерений по п. 3 трижды с паузой 10 минут.

В случае расхождения температуры воздуха на входе в БО по результатам трех измерений выше 1 °С серию измерений повторяли.

Хладопроизводительность БО определяли по формуле:

$$Q = S \cdot v \cdot \rho \cdot \frac{P}{P_{\text{н.у.}}} (T_{\text{вых}} - T_{\text{вх}}), \quad (1)$$

где Q – хладопроизводительность БО, Вт; S – площадь выходного сечения выпускного газохода, м²; v – средняя скорость воздуха в выходном сечении выпускного газохода, м/с; ρ – плотность воздуха при температуре $T_{\text{вых}}$, кг/м³; P – атмосферное давление во время проведения эксперимента, Па; $P_{\text{н.у.}}$ – атмосферное давление при н.у. (101325 Па); $T_{\text{вх}}$, $T_{\text{вых}}$ – средняя по трем измерениям температура воздуха на входе и выходе БО соответственно, °С; C – теплоемкость воздуха, Дж/(кг×°С).

Результаты измерений регистрируемых параметров в эксперименте по определению хладопроизводительности БО приведены в табл. 3.

Таблица 3. Результаты измерений регистрируемых параметров в эксперименте по определению хладопроизводительности БО при работе в воздушной среде

Параметр	Значение
Площадь выходного сечения выпускного газохода, м ²	0.073
Средняя скорость воздуха в выходном сечении выпускного газохода, м/с	4.600
Средняя температура воздуха на входе БО, °С	30.600
Средняя температура воздуха на выходе БО, °С	17
Плотность воздуха, кг/м ³	1.205 [11]
Теплоемкость воздуха, кДж/(кг·°С)	1.005 [11]

С помощью формулы (1) на основе полученных экспериментальных данных было установлено, что хладопроизводительность БО при работе на воздухе составляет 5.47 кВт. Отклонение расчетного значения хладопроизводительности от значения, определенного экспериментально, составило 4.8%, что свидетельствует о приемлемой сходимости результатов расчета и эксперимента и, следовательно, о корректности расчетной модели БО.

Расчетное определение хладопроизводительности блока охлаждения при работе в аргоне

Задача расчетного исследования на данном этапе – определить хладопроизводительность БО при работе в аргоне при температуре 40 °С.

Геометрическая модель БО, теплофизические свойства материалов и сред, а также исходные данные идентичны принятым в расчете на воздухе. В качестве охлаждаемой среды принят сухой аргон с температурой 40 °С.

Результаты расчета приведены в табл. 4. При частоте вращения лопаточного венца 750 мин^{-1} расчетная хладопроизводительность БО составила 5.5 кВт, что на 8 % меньше максимального проектного значения.

Таблица 4. Результаты расчета хладопроизводительности БО при работе в аргоне

Расчетный параметр	Значение	
Частота вращения лопаточного венца, мин^{-1}	750	1500
Массовый расход аргона на выходе БО, кг/ч	1553	3080
Средняя температура аргона на выходе БО, $^{\circ}\text{C}$	15.8	21.2
Хладопроизводительность, кВт	5.5	9.5

Хладопроизводительность БО может быть повышена за счет увеличения расхода аргона через БО путем повышения частоты вращения лопаточного венца радиального вентилятора. Это подтверждается результатом расчета БО для частоты вращения 1500 мин^{-1} , также приведенным в табл. 4. Принимая линейной зависимость между частотой вращения лопаточного венца и хладопроизводительностью БО, можно определить, что хладопроизводительность БО достигнет 6 кВт при частоте вращения 850 мин^{-1} .

Таким образом, данные, полученные в результате расчетно-экспериментальных исследований хладопроизводительности БО, подтверждают возможность обеспечения требуемого температурного режима газовой среды при работе инертной камеры с максимальной проектной тепловой нагрузкой.

Заключение

В результате проведенной работы была создана численная модель блока охлаждения инертной среды. Результаты расчетов с использованием разработанной модели были верифицированы с помощью натурных испытаний блока охлаждения при работе на воздухе. Численное моделирование параметров работы исследуемой установки в среде аргона подтвердили возможность обеспечения требуемого температурного режима газовой среды при работе инертной камеры с максимальной проектной тепловой нагрузкой.

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

А.В. Носов – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования, выполнение измерений, анализ экспериментальных данных, выявление закономерностей, подбор литературных источников, редактирование текста статьи.

С.Ю. Каледин – постановка эксперимента, выполнение экспериментальных работ, обработка результатов; проведение численных расчетов, разработка математической модели, выполнение измерений, анализ экспериментальных данных, выявление закономерностей, подбор литературных источников, редактирование текста статьи.

Р.Н. Шамсутдинов – разработка математической модели, выполнение экспериментальных работ, обработка результатов; проведение численных расчетов.

С.М. Савчиц – участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

Список литературы

1. Белая книга ядерной энергетики. Замкнутый ЯТЦ с быстрыми реакторами. Под общ. ред. Адамова Е.О. М.: АО «НИКИЭТ», 2020. 502 с.
2. Шадрин А.Ю., Двоеглазов К.Н., Устинов О.А., Масленников А.Г., Кащеев В.А., Третьякова С.Г., Шмидт О.В., Виданов В.П., Волк В.И., Веселов С.Н., Ишунин В.С. РН-процесс – технология переработки смешанного уран-плутониевого топлива реактора БРЕСТ-ОД-300 // Радиохимия, 2016. Т. 58. № 3. С. 234–241.
3. McFarlane H., Lineberry M. Spent fuel pyroprocessing demonstration. / Proc. of the International Conference on Fuel Management and Handling. // British Nuclear Energy Soc. Edinburgh (United Kingdom), 1995. P. 149–155.
4. Chemical Engineering Division Research Highlights. // Rep. ANL-6875, May 1963 – April 1964.
5. Choi E., Jeong S. Electrochemical processing of spent nuclear fuels: an overview of oxide reduction in pyroprocessing technology // Progress in Natural Science, 2015. V. 25. № 6. P. 572–582.
6. Lee H., Park G., Kang K., Hur J., Kim J., Ahn D., Cho Y., Kim E. Pyroprocessing technology development at KAERI. // Nuclear Engineering and Technology, 2011. V. 43. № 4. P. 317–328.
7. Кузьмин И.В., Лещенко А.Ю., Носов А.В., Смирнов В.П., Шамсутдинов Р.Н., Мочалов Ю.С., Суханов Л.П. Создание технологических камер большого объема с инертной атмосферой высокой чистоты для пирохимической переработки отработавшего топлива. // Атомная энергия, 2023. Т. 135. № 1–2. С. 27–31.
8. Пятибрат В.П. Упрощенные способы расчета нагнетателей. Ухта: УГТУ, 2013. 22 с.
9. Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. М.: Атомиздат, 1968. 485 с.
10. Алямовский А.А., Собачкин А.А., Одинцов Е.В., Харитонович А.И., Пономарев Н.Б. SolidWorks 2007/2008. Компьютерное моделирование в инженерной практике. СПб.: БХВ-Петербург, 2008. 1040 с.
11. Луканин В.Н., Шatrov М.Г., Камфер Г.М. Теплотехника: Учебник для вузов. Под ред. Луканина В.Н. 2-е изд., перераб. М.: Высш. шк., 2000. 671 с. ISBN 5-06-003958-7.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 5, pp. 457–464

Experimental substantiation of optimal parameters of cooling system for inert gas cell

A. V. Nosov^{1,✉}, S. Yu. Kaledin¹, R. N. Shamsutdinov¹, S. M. Savchits^{1,✉}

¹AO Sosny Research and Development Company, Dimitrovgrad, 433507, Russia

JSC Propyv, Moscow, 119607, Russia

✉ office@sosny.ru

✉ savchitssm@pnproryv.ru

Received July 16, 2025; revised September 20, 2025; accepted September 23, 2025

The objective of the work presented in this publication was to study the parameters of a cooling system for argon filling the internal volume of an inert chamber. This objective was achieved by sequentially solving the following problems: numerical simulation of the cooling unit operation in an air environment; experimental determination of the cooling capacity of the cooling unit in an air environment and verification of the numerical simulation results; numerical simulation of the cooling unit operation in argon. The practical significance of the study is determined by the possibility of using the obtained results to optimize the design and operation of inert chamber cooling systems in technological processes with high thermal loads. The proposed operating parameters of the equipment ensure the required temperature, stability of the inert environment with minimal energy consumption and maximum heat removal efficiency. The main results of the study showed that optimal operation of the system is achieved at certain ratios of argon circulation rate, ethylene glycol temperature and fan speed. Critical values of the parameters at which the cooling efficiency decreases were established. Based on the results of the work, data were obtained that can be used in the design of cooling systems for gaseous media of inert chambers.

Keywords: cooling system, pyroprocessing treatment of spent nuclear fuel, shielded inert gas cell.

References

1. Belaya kniga yadernoi energetiki. Zamknutyi toplivnyi tsikl s bystryimi reaktorami [White book of nuclear energy. Closed NFC with fast reactors]. Edited by Adamov E.O. Moscow. AO NIKIET Publ., 2020, 502 p. (in Russian).
2. Shadrin A.U., Dvoeglazov K.N., Ustinov A.O., Maslennikov A.G., Kascheev V.A., Tretyakova S.G., Shmidt O.V., Vidanov V.P., Volk V.I., Veselov S.N., Ishunin V.S. RH-process – tekhnologiya pererabotki smeshannogo uran-plutoniyevoogo topliva reaktora BREST-OD-300 [RH-process – technology of reprocessing of mixed uranium-plutonium fuel from the BREST-OD-300 reactor]. Radiokhimiya, 2016. Vol. 58. No. 3. Pp. 234–241 (in Russian).
3. McFarlane H., Lineberry M. Spent fuel pyroprocessing demonstration. Proc. of the International Conference on Fuel Management and Handling. British Nuclear Energy Soc. Edinburgh (United Kingdom), 1995. Pp. 149–155.
4. Chemical Engineering Division Research Highlights. Rep. ANL-6875, May 1963 – April 1964.
5. Choi E., Jeong S. Electrochemical processing of spent nuclear fuels: an overview of oxide reduction in pyroprocessing technology. Progress in Natural Science, 2015. Vol. 25. № 6. Pp. 572–582.
6. Lee H., Park G., Kang K., Hur J., Kim J., Ahn D., Cho Y., Kim E. Pyroprocessing technology development at KAERI. Nuclear Engineering and Technology, 2011. Vol. 43. No. 4. Pp. 317–328.
7. Kuzmin I.V., Leschenko A.U., Nosov A.V., Smirnov V.P., Shamsutdinov R.N., Mochalov Yu.S., Sukhanov L.P. Sozdanie tekhnologicheskikh kamer bolshogo ob'ema s inertnoi atmosferoi vysokoi chistoty dlya pirokhimicheskoi pererabotki otrabotavshogo topliva [Development of large-scale purified inert atmosphere cells for pyroprocessing treatment of spent nuclear fuel]. Atomnaya energiya, 2023. Vol. 135. No. 1–2. Pp. 27–31 (in Russian).
8. Pyatibrat V.P. Uproshchennyye sposoby rascheta nagnetateley [Streamline calculations of blowers]. Ukhta, UGTU Publ., 2013. 22 p. (in Russian).
9. Chirkin V.S. Teplofizicheskie svoystva materialov yadernoi tekhniki [Thermal and physical properties of nuclear engineering materials]. Moscow, Atomizdat Publ., 1968, 485 p. (in Russian).
10. Alyamovskiy A.A., Sobachkin A.A., Odintsov Ye.V., Kharitonovich A.I., Ponomarev N.B. SolidWorks 2007/2008. Computernoe modelirovanie v inzhenernoi practice [SolidWorks 2007/2008. Computer modeling in engineering]. S.-Petersburg, BKhV-Peterburg Publ., 2008. 1040 p. (in Russian).
11. Teplo tekhnika: Uchebnik dlya vuzov [Thermal engineering: Proc. for universities]. Edited by Lukanin V.N., 2nd ed. revised. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 2000. 671 p. ISBN 5-06-003958-7 (in Russian).