

<https://vestnikmephi.elpub.ru>

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА «МИФИ»



Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА «МИФИ»

Том 14 № 6 2025 НОЯБРЬ – ДЕКАБРЬ

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)

Бедриковetsкий 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, № 6, 2025

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

- Аналитические свойства функции Грина уравнения линейных внутренних гравитационных волн в стратифицированных средах с модельными распределениями частоты плавучести**
В. В. Булатов 467
- Аналитическое решение для определения температуры испаряющихся капель на твердой подложке**
С. З. Дунин, О. В. Нагорнов, В. П. Трифоненков, С. А. Тюфлин 478
- Анализ автомодельных решений задач о взаимодействии льда с гидрофильной жидкостью**
О. В. Нагорнов, Т. И. Бухарова, В. С. Загороднов, В. Л. Камынин 486
-

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

- Новые результаты по силам взаимодействия кинков теоретико-полевого модели с полиномиальным потенциалом**
В. А. Гани, О. В. Нагорнов 492
- Точная линеаризация сильно нелинейных уравнений типа Монжа – Ампера**
А. Д. Полянин, А. В. Аксенов 500
- Обратная задача определения коэффициента поглощения в вырождающемся параболическом уравнении дивергентного вида с одной пространственной переменной**
В. Л. Камынин, О. В. Нагорнов 516
-

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

- Компьютерная модель системы амортизации перевозимого квантового водородного стандарта частоты и анализ отклика на ударное воздействие**
С. А. Боим, В. И. Васильев 525
- Методы квантовой молекулярной динамики для моделирования свойств веществ в экстремальной области**
А. С. Смаль, Ю. А. Богданова, А. А. Егоров 534
- Схемы интерполяции оптимальных значений параметров вентиляционного потока в зависимости от значений показателей пациента при искусственной вентиляции легких**
С. Г. Климанов, А. В. Крянев, А. А. Котляров, Д. С. Смирнов, И. В. Сопенко, В. А. Трикозова, Д. Д. Царева 544
-

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

- Высокодозная имплантация ионов гелия малой энергией**
С. Г. Шемардов, А. В. Беклемишева, П. А. Александров, А. Л. Васильев, В. Н. Беклемишев 553

CONTENTS

Volume 14, Number 6, 2025

THEORETICAL AND EXPERIMENTAL PHYSICS

- Analytical properties of the Green's function of the equation of linear internal gravity waves in stratified media with model distributions of buoyancy frequency**
V. V. Bulatov 467
- Analytical solution for temperature of evaporative drops on solid substrate**
S. Z. Dunin, O. V. Nagornov, V. P. Trifonenkov, S. A. Tyufin 478
- Analysis of self-similar solutions for the ice and hydrophilic liquid interaction problems**
O. V. Nagornov, T. I. Bukharova, V. S. Zagorodnov, V. L. Kamynin 486

APPLIED MATHEMATICS AND COMPUTER SCIENCE

- New results on the interaction forces of kinks in a field-theoretical model with a polynomial potential**
V. A. Gani, O. V. Nagornov 492
- Exact linearization of fully nonlinear Monge – Ampère type equations**
A. D. Polyanin, A. V. Aksenov 500
- Inverse problem of determining the absorption coefficient in a degenerate parabolic equation of divergent type with one spatial variable**
V. L. Kamynin, O. V. Nagornov 516

COMPUTER SIMULATION OF PHYSICAL AND TECHNOLOGICAL PROCESSES

- Computer model of the shock absorption system of the transportable quantum hydrogen frequency standard and analysis of the response to impact**
S. A. Boim, V. I. Vasiliev 525
- Methods of quantum molecular dynamics for modeling the properties of substances in the extreme range**
A. S. Smal, Yu. A. Bogdanova, A. A. Egorov 534
- Two schemes for interpolation of optimal values of ventilation flow parameters depending on the values of patient indicators during artificial ventilation of the lungs**
S. G. Klimanov, A. V. Kryanev, A. A. Kotlyarov, D. S. Smirnov, I. V. Sopenko, V. A. Trikozova, D. D. Tsareva 544

CONDENSED MATTER PHYSICS

- High-dose implantation of low-energy helium ions**
S. G. Shemardov, A. V. Beklemisheva, P. A. Alexandrov, A. L. Vasiliev, V. N. Beklemishev 553

УДК 532.59:534.1

Аналитические свойства функции Грина уравнения линейных внутренних гравитационных волн в стратифицированных средах с модельными распределениями частоты плавучести

© 2025 г. В. В. Булатов

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, 119526, Россия

В работе теоретически изучены аналитические свойства функции Грина уравнения внутренних гравитационных волн для двух модельных распределений плотности стратифицированной невязкой среды. В линейной постановке с помощью преобразования Фурье получены интегральные представления решений. Обсуждены вопросы выбора однозначной формы полученных аналитических решений. Построенные аналитические конструкции позволяют, используя операцию интегральной свертки, исследовать волновые поля, возбуждаемые произвольными нелокальными и нестационарными источниками возмущений в реальных природных стратифицированных средах. Полученные асимптотические результаты позволяют исследовать волновые возмущения, которые могут быть зарегистрированы с помощью радиолокационных и оптических систем, и несут информацию не только об источниках генерации, но и о характеристиках морской среды, что важно, в том числе для изучения реакции морской среды на различные гидродинамические возмущения и совершенствования методов дистанционного зондирования морской поверхности. Начальные и граничные условия для конкретных источников возмущений должны определяться из результатов прямого численного моделирования полной системы уравнений гидродинамики или из сугубо оценочных полуэмпирических соображений, позволяющих адекватно аппроксимировать реальные нелокальные источники возмущений некоторой системой модельных источников. Полученные аналитические решения дают возможность рассчитывать основные амплитудно-фазовые характеристики возбуждаемых дальних полей внутренних гравитационных волн при определенных режимах генерации, и, кроме того, качественно анализировать полученные решения, что важно для правильной постановки более сложных математических моделей волновой динамики реальных природных стратифицированных сред. Модельные решения позволяют в дальнейшем получить представления волновых полей с учетом реальной изменчивости и нестационарности таких сред.

Ключевые слова: линейные внутренние гравитационные волны, стратифицированная среда, функция Грина, интегральная свертка, метод Фурье.

Введение

Важным механизмом возбуждения полей внутренних гравитационных волн (ВГВ) в природных (океан, атмосфера Земли) и искусственных стратифицированных средах является их генерация источниками возмущений различной физической природы: природного (движущийся тайфун, ветровое волнение, обтекание неровностей рельефа океана, изменения полей плотности и течений, подветренные горы) и антропогенного (морские технологические конструкции, схлопывание области турбулентного перемешивания, подводные взрывы) характеров. Система уравнений гидродинамики, описывающая волновые возмущения стратифицированных сред в общем виде представляет достаточно сложную

✉ В.В. Булатов: internalwave@mail.ru

Поступила в редакцию: 21.09.2025

После доработки: 20.10.2025

Принята к публикации: 21.10.2025

EDN BHVPLV

математическую задачу как в плане доказательств теорем существования и единственности решений в соответствующих функциональных классах, так и с вычислительной точки зрения. Основные результаты решений задач о генерации ВГВ представляются в самой общей интегральной форме, и в этом случае полученные интегральные решения требуют разработки аналитических, численных и асимптотических методов их исследования, допускающих не только их качественный анализ, но и проведение экспресс-оценок получаемых решений [1–4].

Например, движущиеся атмосферные циклоны, оказывающие значительное влияние на общую циркуляцию Мирового океана и локальную температуру морской поверхности, являются источниками генерации интенсивных внутренних гравитационных волн. Волновые поля, возбуждаемые с помощью этого механизма, могут играть значительную роль в различных механизмах переноса энергии в толще океана, а также вертикальных и горизонтальных обменах импульсов и массы. Касательное напряжение ветра, создаваемое движущимися атмосферными возмущениями, формирует в Мировом океане структуры волновых шлейфов (следов): экспериментальное обнаружение таких устойчивых волновых образований является одним из впечатляющих достижений современной океанологии [5–8].

Взрывные извержения подводных вулканов также могут быть источниками интенсивных внутренних гравитационных волн в Мировом океане. Физика вулканического извержения достаточно сложна, однако можно выделить несколько механизмов интенсивной волновой генерации: землетрясения, инициированные вулканическим извержением; пирокластические потоки со склонов вулкана; обрушение кальдеры; подводные взрывы. Последние два механизма в определенной степени идентичны и проявляются в извержении конечной массы вещества и появлении большого газового пузыря, что приводит к искривлению водной поверхности и дает начало генерации ВГВ большой амплитуды. При этом из-за сжимаемости морской воды возникают сильные ударные волны, частично отражающиеся от водной поверхности, также ее деформируя. В настоящее время не существует общепринятой теоретической модели генерации ВГВ при извержении подводных вулканов, аналогичной достаточно развитой для волн цунами. Однако существуют различные параметрические и полуэмпирические модели волновой генерации. В рамках таких моделей определяющими параметрами являются масса извергнутого материала, высота подводного вулкана, а также время извержения. Наличие нескольких параметров позволяет лучше приблизить результаты расчетов данным наблюдений, при этом математические модели должны использоваться для описания дальнего поля, когда оно становится линейным, и не претендовать на описания волнового поля вблизи самого вулкана. Классические постановки линейных задач о генерации волн источником (как правило, точечным) массы, расположенным на определенной глубине, позволяют моделировать генерацию волн взрывным извержением вулкана. Механизмы генерации ВГВ при извержении подводных вулканов могут быть различны. Первый из них аналогичен генерации поверхностных волн цунами при взрыве и связан с искривлением поверхности раздела слоев разной плотности (изопикн). Второй механизм может быть обусловлен горячими гравитационными пирокластическими потоками со склона вулкана, играющими роль поршня в искривлении изопикн – именно этот механизм (правда, без подтверждения) обычно предлагается для интерпретации спутниковых наблюдений ВГВ во время извержения вулкана. Возможен и другой механизм генерации внутренних гравитационных волн при трансформации длинных поверхностных волн цунами на континентальном склоне, он аналогичен генерации ВГВ на шельфовом склоне при трансформации баротропного прилива взрывным извержением вулкана в рамках первого механизма, когда в результате коллапса кальдеры происходит искривление границы раздела слоев разной плотности [5–7, 9, 10].

Для детального описания широкого круга физических явлений, связанных с динамикой волновых возмущений неоднородных и нестационарных природных стратифицированных сред, необходимо исходить из достаточно развитых математических моделей. Трехмерность структуры природных стратифицированных сред также играет существенную роль, и в настоящее время нет возможности проведения масштабных вычислительных экспериментов по моделированию трехмерных океанических течений на больших временах с достаточной точностью. Однако в ряде случаев первоначальное качественное представление об изучаемом круге волновых явлений можно получить на основе более простых аналитических моделей. В этой связи необходимо отметить классические задачи гидродинамики о построении асимптотических решений, описывающих эволюцию волновых возмущений, возбуждаемых источниками различной природы в тяжелой жидкости. Модельные решения позволяют

в дальнейшем получить представления волновых полей с учетом изменчивости и нестационарности реальных природных стратифицированных сред (океан, атмосфера Земли). Также ряд результатов анализа модельных линейных задач, описывающих различные режимы возбуждения и распространения волновых возмущений, лежат в основе активно развивающейся в настоящее время нелинейной теории генерации волн экстремально большой амплитуды – волн-убийц [7, 11].

Внутренние гравитационные волны, существующие в океане вследствие стратификации его вод, являются принципиально двумерными, а во многих случаях и трехмерными, поэтому в вычислительном плане анализ двумерных и трехмерных нестационарных волновых движений является весьма сложной задачей. Разработан и получил широкое применение численный код MIT, решающий полные уравнения гидродинамики с учетом реального рельефа дна, вращения Земли и турбулентных процессов, разработанная в Массачусетсском технологическом институте (США) вместе со специалистами по численному моделированию океана остального мирового сообщества. Данная модель требует больших компьютерных ресурсов, оправданных только для решения ряда отдельных практических задач океанологии. Тем не менее, даже такие полные модели пока еще не учитывают, например, стабильной фоновой горизонтально-неоднородной стратификации морской воды. Для учета этого гидрофизического эффекта необходимо вводить внешние силы, эту неоднородность стратификации удерживающие, параметризация которых численно затруднительна [1–4, 12].

Существующие в настоящее время методы численного моделирования, в том числе с использованием суперкомпьютеров не всегда позволяют эффективно рассчитывать конкретные физические задачи волновой динамики океана и атмосферы с учетом их реальной изменчивости, так как ориентированы на решение достаточно общих задач, требуют большой вычислительной мощности, не всегда учитывают физическую специфику решаемых задач, что существенно ограничивает их практическую применимость, особенно при расчетах волновых полей в реальных природных средах. Кроме того, использование мощных численных алгоритмов требует верификации и сравнения с аналитическими решениями модельных задач [13–18].

Распространение диспергирующих ВГВ в стратифицированных средах имеет особенности, связанные с зависимостью скорости распространения от длины волны. Если в такой среде перемещается некоторый источник возмущения, то он создает вокруг себя волновую картину, основными особенностями которой являются линии постоянной фазы, поэтому структура волновых картин на больших расстояниях от движущегося источника (много больших его размеров) практически не зависит от его формы и определяется в основном законом дисперсии и скоростью источника [1, 19–21].

Общие решения системы уравнений гидродинамики, описывающих генерацию ВГВ, можно получить только в самой общей интегральной форме или численно. При численных расчетах океан, как правило, представляют упрощенной гидродинамической системой с модельным распределением плотности. Интегральные представления решений требуют разработки асимптотических методов их исследования, допускающих качественный анализ и проведение экспресс-оценок получаемых решений при натурных измерениях внутренних волн в океане. Современные подходы к описанию линейных ВГВ основаны на представлении волновых полей интегралами Фурье и на анализе их асимптотик, а также на геометрическом построении в рамках кинематической теории диспергирующих волн [1–4, 15, 19]. На основе кинематической теории удастся сформулировать аналитические представления только для фазовых поверхностей волновых полей ВГВ. Поэтому в современных научных исследованиях при анализе волновых явлений в реальных стратифицированных средах (океан, атмосфера Земли) широко применяются упрощенные асимптотические и аналитические модели [9, 10, 18, 20, 21]. Целью настоящей работы является исследование аналитических свойств функции Грина уравнения линейных внутренних гравитационных волн для двух модельных распределений плотности среды.

Функция Грина для экспоненциально стратифицированной среды

Малые возмущения гидростатического равновесного основного состояния несжимаемой идеальной стратифицированной среды с экспоненциальным распределением невозмущенной

плотности по глубине $\rho_0(z) = \exp\left(\frac{N^2 z}{g}\right)$ (N – частота плавучести, или частота Брента – Вэй-

ся, g – ускорение свободного падения), вызванные источниками массы $m(x, y, t)\rho_0(z)$, $q(x, y, z, t)$ и силы $f(x, y, z, t) = (f_h(x, y, z, t), f_z(x, y, z, t))$, в приближении Буссинеска определяются из соотношений [1, 20, 21]

$$\begin{aligned} L \frac{\partial \rho_0 \mathbf{v}_h}{\partial t} &= \frac{\partial^2}{\partial t \partial z} \left(\frac{\partial \mathbf{F}_h}{\partial z} - g \nabla q \right) + \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + N^2 \right) \left(\nabla \frac{\partial m \rho_0}{\partial t} \right) - [\nabla [\nabla \mathbf{f}_h]]; \\ L \rho_0 w &= -\nabla \frac{\partial \mathbf{F}_h}{\partial t} + g \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial^3 m \rho_0}{\partial z \partial t^2}; \\ L \rho &= \frac{N^2}{g} \nabla \mathbf{F}_h + \frac{\partial}{\partial t} \left(\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) q - \frac{N^2}{g} \frac{\partial m \rho_0}{\partial z} \right); \\ L p &= \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + N^2 \right) \left(\nabla \mathbf{f}_h - \frac{\partial m \rho_0}{\partial t} \right) + \frac{\partial^2}{\partial t \partial z} \left(\frac{\partial f_z}{\partial z} + g q \right); \\ L &= \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + N^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right), \quad \mathbf{F}_h = \frac{\partial \mathbf{f}_h}{\partial z} - \nabla f_z, \quad \mathbf{v}_h = (v_x, v_y), \quad \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

где ρ и p – малые возмущения плотности и давления соответственно, $\mathbf{U} = (v_x, v_y, w)$ – компоненты малых возмущений скорости поля внутренних гравитационных волн. Для определения особенностей волновых возмущений, связанных с конкретным видом источников удобно использовать представления решений системы (1) с помощью математического аппарата функции Грина [1, 22]. Действительно, каждое из возмущений в системе уравнений (1) можно представить в виде интегральной свертки правой части соответствующего уравнения со скалярной функцией Грина G , определяемой из соотношения:

$$LG(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r})\delta(t), \quad G(\mathbf{r}, t) \equiv 0, \quad t < 0.$$

Для представления решения задачи о генерации полей внутренних гравитационных волн некоторыми заданными распределениями источников $Q(\mathbf{r}, t)$: $L\Psi(\mathbf{r}, t) = Q(\mathbf{r}, t)$ должны быть выполнены определенные условия излучения, описывающие только физически реализуемые режимы волновой генерации. В терминах представления Фурье можно получить следующее представление решений

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = G(\mathbf{r}, t) * Q(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{n+1}} \int \frac{Q_0(\mathbf{k}, \omega)}{D(\mathbf{k}, \omega + i\varepsilon)} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t) d^n \mathbf{k} d\omega,$$

где дисперсионное уравнение основной вертикальной спектральной задачи внутренних гравитационных волн $D(\mathbf{k}, \omega) = 0$ имеет простые вещественные корни $\omega = \omega_j(\mathbf{k})$, $Q_0(\mathbf{k}, \omega)$ – фурье образ заданного распределения источников возмущений $Q(\mathbf{r}, t)$, $n = 3$ в трехмерном случае, $n = 2$ в плоском случае, $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_n)$ – волновой вектор. Тогда свойство причинности (однозначности выбора решения) для определения физически реализуемого режима возбуждения волнового поля находит свое отражение в сдвиге особых точек $\omega = \omega_j(\mathbf{k})$, связанных с решениями дисперсионного уравнения $D(\mathbf{k}, \omega) = 0$ [1, 20, 21]. В этом случае необходимо при интегрировании по переменной ω сдвинуть контур интегрирования на малую положительную величину $\varepsilon > 0$. Из разложений

$$\begin{aligned} D(\mathbf{k}, \omega + i\varepsilon) &\approx D(\mathbf{k}, \omega) + i\varepsilon \frac{\partial D(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega}, \\ D(\mathbf{k} + i\gamma \mathbf{l}, \omega) &\approx D(\mathbf{k}, \omega) + i\gamma \mathbf{l} \nabla_{\mathbf{k}} D(\mathbf{k}, \omega), \quad |\mathbf{l}| = 1, \quad \nabla_{\mathbf{k}} = \left(\frac{\partial}{\partial k_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial k_n} \right) \end{aligned}$$

следует, что такой результат можно также получить сдвигом волнового вектора $\mathbf{k}$ на малый вектор $i\gamma\mathbf{l}$, если выполнены условия: $\varepsilon = \gamma\mathbf{l}\mathbf{c}$, $\mathbf{c} = \nabla_{\mathbf{k}}\omega = -\nabla_{\mathbf{k}}D(\mathbf{k}, \omega)\left(\frac{\partial D(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega}\right)^{-1}$, где $\mathbf{c}$ – вектор групповой скорости распространения внутренних гравитационных волн. Таким образом, выбрав некоторое направление $\mathbf{l}$ в координатном пространстве $\mathbf{r} = r_l\mathbf{l} + \mathbf{r}_p$, $\mathbf{k} = k_l\mathbf{l} + \mathbf{k}_p$, выражение можно представить в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{n+1}} \int \exp(i\mathbf{k}_p \mathbf{r}_p) d^{n-1} \mathbf{k} d\omega \int \frac{Q_0(\mathbf{k}, \omega)}{D\left(\mathbf{k}_p, k_l - i\frac{\varepsilon}{\mathbf{l}\mathbf{c}}, \omega\right)} \exp(ik_l r_l - i\omega t) dk_l.$$

Интеграл по переменной k_l при условии $(\mathbf{l}\mathbf{r})(\mathbf{l}\mathbf{c}) > 0$ сводится к сумме вычетов, определяемых нулями функции $D(\mathbf{k}, \omega)$, при этом функция $Q_0(\mathbf{k}, \omega)$ предполагается аналитической [1, 20, 21]. При $(\mathbf{l}\mathbf{r})(\mathbf{l}\mathbf{c}) < 0$ интеграл по переменной k_l равен нулю, что показывается соответствующей деформацией контура интегрирования в полуокружность большого диаметра. Таким образом, решение разлагается по плоским и затухающим в направлении $\mathbf{l}$ волновым пакетам. Для частного случая $\mathbf{l} = \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|}$ можно получить

неравенство $(\mathbf{l}\mathbf{r})(\mathbf{l}\mathbf{c}) = \mathbf{r}\mathbf{c} > 0$, которое означает, что полученное решение является разложением по плоским волнам с положительной проекцией групповой скорости на направление наблюдения. Принимая во внимание параллельность векторов групповой скорости и потока энергии, можно заключить, что при использовании функции Грина для решения задач излучения волн всегда будет выполняться принцип отвода энергии от источника возмущений (принцип Мандельштама) [1, 22]. В случае внутренних гравитационных волн в экспоненциально стратифицированной среде проекции фазовой и групповой скорости на вертикальное направление имеют противоположные знаки, а на горизонтальные направления – одинаковые.

Каждое из возмущений в системе (1) можно представить в виде интегральной свертки правой части соответствующего уравнения с одной и той же скалярной функцией $G(\mathbf{r}, t)$ [1, 20, 21]. Ограничиваясь равномерно движущимися источниками массы $m(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{V}t)$ единичной интенсивности для возмущения давления p плотности ρ скорости, можно получить

$$p(\mathbf{R}) = -\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + N^2\right) \frac{\partial G^*(\mathbf{R})}{\partial t}, \quad \rho(\mathbf{R}) = -\frac{N^2}{g} \frac{\partial^2 G^*(\mathbf{R})}{\partial t \partial z},$$

$$U = \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} \nabla_3 + N^2 \nabla\right) G^*(\mathbf{R}), \quad G^*(\mathbf{R}) = \int G(\mathbf{R} - \mathbf{V}\tau, -\tau) d\tau,$$

$$\nabla_3 = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right), \quad \mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{V}t,$$

где функция $G^*(\mathbf{R})$ удовлетворяет уравнению: $LG^*(\mathbf{R}) = \delta(\mathbf{R})$.

В средах без дисперсии $\left(L = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2}\right)$ эта функция известна как потенциал Лиенара – Вихтера [1, 22].

В линейном приближении возмущения, которые вызываются иными источниками массы $M(\mathbf{R})$, можно найти, используя интегральную свертку с возмущениями точечного источника: $p(\mathbf{R}) * M(\mathbf{R})$, $\rho(\mathbf{R}) * M(\mathbf{R})$, $U(\mathbf{R}) * M(\mathbf{R})$. Очевидно, что в системе координат, движущейся вместе с источником возмущений, волновая картина является стационарной. Знание поля давления позволяет рассчитать полную энергию излучения внутренних гравитационных волн. В частности, для равномерно движущегося источника в

жидкости без диссипации поток энергии волн, излучаемых в окружающую источник среду, совпадает с полными потерями энергии [1–4].

Используя преобразования Фурье, можно получить следующие представления

$$G^*(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) G(\mathbf{k}, \omega) \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{V}) d^n \mathbf{k} d\omega = \frac{1}{2\pi|\mathbf{V}|} \int G\left(\frac{\omega}{|\mathbf{V}|}, \mathbf{r}_2, \omega\right) \exp\left(i\frac{\omega \mathbf{r}_1}{|\mathbf{V}|}\right) d\omega,$$

$$\mathbf{r}_1 = \frac{\mathbf{R}\mathbf{V}}{|\mathbf{V}|}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{\mathbf{V}\mathbf{r}_1}{|\mathbf{V}|}.$$

Для горизонтально движущегося вдоль оси Ox локализованного источника можно получить [1, 20, 21]

$$\frac{\partial}{\partial t} G^*(\mathbf{R}) = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{V}|} \operatorname{Re} \int_0^\infty \exp(i\omega\xi) \frac{H_0^{(2)}\left(-i\frac{N|\mathbf{r}_2|}{|\mathbf{V}|} \sqrt{\omega^2 - z^2|\mathbf{r}_2|^{-2}}\right)}{\sqrt{\omega^2 - 1}} d\omega, \quad (2)$$

где $\xi = \frac{Nx}{|\mathbf{V}|} - Nt$, $H_0^{(2)}$ – функция Ханкеля [23, 24]. Выражение (2) можно представить в виде

$$2\pi^2|\mathbf{V}| \frac{\partial}{\partial t} G^*(\mathbf{R}) = \int_1^\infty \frac{\sin(i\omega\xi)}{\sqrt{\omega^2 - 1}} K_0\left(\frac{N|\mathbf{r}_2|}{|\mathbf{V}|} \sqrt{\omega^2 - z^2|\mathbf{r}_2|^{-2}}\right) d\omega - \frac{\pi}{2} \int_0^{\frac{|z|}{|\mathbf{r}_2|}} \frac{\sin(i\omega\xi)}{\sqrt{\omega^2 - 1}} J_0\left(\frac{N|\mathbf{r}_2|}{|\mathbf{V}|} \sqrt{\omega^2 - z^2|\mathbf{r}_2|^{-2}}\right) d\omega +$$

$$+ \frac{\pi}{2} \int_0^{\frac{|z|}{|\mathbf{r}_2|}} \frac{\cos(i\omega\xi)}{\sqrt{\omega^2 - 1}} N_0\left(\frac{N|\mathbf{r}_2|}{|\mathbf{V}|} \sqrt{\omega^2 - z^2|\mathbf{r}_2|^{-2}}\right) d\omega - \int_{\frac{|z|}{|\mathbf{r}_2|}}^1 \frac{\cos(i\omega\xi)}{\sqrt{\omega^2 - 1}} K_0\left(\frac{N|\mathbf{r}_2|}{|\mathbf{V}|} \sqrt{\omega^2 - z^2|\mathbf{r}_2|^{-2}}\right) d\omega, \quad (3)$$

где первые два слагаемых отвечают вкладу мнимой части функции Грина, остальные слагаемые отвечают вещественной части функции Грина, J_0 , K_0 , N_0 – функции Бесселя, МакДональда и Неймана соответственно [23, 24].

Для горизонтальной и вертикальной плоскостей, проходящих через ось движущегося источника возмущений, интегральные представления (3) можно представить в виде

$$-2\pi^2|\mathbf{V}| \frac{\partial}{\partial t} G^*(\mathbf{R}) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} K_0(|y|\cos\tau) \cos(\xi\cos\tau) d\tau - \int_0^\infty K_0(|y|\operatorname{ch}\tau) \sin(\xi\operatorname{ch}\tau) d\tau, \quad \text{при } z = 0$$

$$-4\pi|\mathbf{V}| \frac{\partial}{\partial t} G^*(\mathbf{R}) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} J_0(|z|\sin\tau) \cos(\xi\cos\tau) d\tau - \int_0^{\frac{\pi}{2}} N_0(|z|\sin\tau) \cos(\xi\cos\tau) d\tau -$$

$$- \frac{2}{\pi} \int_0^\infty K_0(|z|\operatorname{sh}\tau) \sin(\xi\operatorname{ch}\tau) d\tau, \quad \text{при } y = 0.$$

Функция Грина для двухслойной среды

Если идеальные жидкости с различными плотностями $\rho = \rho_{1,2}$ разделены горизонтальной плоскостью $z = 0$, тогда функция Грина определяется из соотношений [1, 20, 21]

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) G(x, y, z, z_0, t) = \delta(t) \delta(x) \delta(y) \delta(z - z_0),$$

$$G(x, y, z, z_0, t) = 0, \text{ при } t < 0,$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} G(x, y, z, z_0, t) \right] = 0, \text{ при } z = 0,$$

$$\left[\rho \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - g \frac{\partial}{\partial z} \right) G(x, y, z, z_0, t) \right] = 0, \text{ при } z = 0,$$

$$|\nabla_3 G(x, y, z, z_0, t)| \rightarrow 0, \text{ при } \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \rightarrow \infty,$$

$$[f] = f_+ - f_-, \quad f_{\pm} = f(x, y, \pm 0, t),$$

где z_0 – глубина погружения точечного источника возмущений. Применив преобразование Фурье по горизонтальным координатам x, y и времени, можно получить для нахождения Фурье-образа функции Грина $G^*(\mathbf{k}, z, z_0, \omega)$ следующие уравнения

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - |\mathbf{k}|^2 \right) G^*(\mathbf{k}, z, z_0, \omega) &= \delta(z - z_0), \\ \left[\frac{\partial}{\partial z} G^*(\mathbf{k}, z, z_0, \omega) \right] &= 0, \quad \text{при } z = 0, \\ \left[\rho \frac{\omega^2}{g} G^*(\mathbf{k}, z, z_0, \omega) + \rho \frac{\partial}{\partial z} G^*(\mathbf{k}, z, z_0, \omega) \right] &= 0, \quad \text{при } z = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Решение выражения (4) с учетом ограниченности при $z \rightarrow \pm\infty$ имеет вид

$$\begin{aligned} G^*(\mathbf{k}, z, z_0, \omega) &= \frac{\gamma \text{sign } z}{2|\mathbf{k}|} \exp(-|\mathbf{k}|(|z| + |z_0|)) - \frac{1}{2|\mathbf{k}|} \exp(-|\mathbf{k}||z - z_0|) + \\ &+ \frac{\text{sign}(\gamma + \text{sign } z_0)}{2} \frac{\exp(-|\mathbf{k}|(|z| + |z_0|))}{\frac{\omega^2}{\gamma g} - |\mathbf{k}|}, \end{aligned}$$

где $z > 0$ и $\rho = \rho_2$ соответствует нижнему полупространству, $\gamma = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1}$. Можно отметить, что

$G^*(\mathbf{k}, z, z_0, \omega) = G^*(\mathbf{k}, z_0, z, \omega)$, если $zz_0 > 0$. Тогда, выполнив обратное преобразование Фурье, можно получить

$$G(x, y, z, z_0, t) = \delta(t) \left(-\frac{1}{4\pi R_-} + \frac{\gamma \operatorname{sign} z}{4\pi R_+} \right) + \Theta(t) D(x, y, z, z_0, t) D(x, y, z, z_0, t) =$$

$$= -\frac{\operatorname{sign} z}{2\pi \gamma g} (\gamma + \operatorname{sign} z_0) \int_0^\infty \omega^2 \sin(\omega t) \exp\left(-\frac{\omega^2}{\gamma g} (|z| + |z_0|)\right) J_0\left(\frac{\omega^2 \sqrt{x^2 + y^2}}{\gamma g}\right) d\omega,$$

где $\Theta(t) = 0, t < 0, \Theta(t) = 1, t \geq 0, R_\pm = \sqrt{x^2 + y^2 + (z \pm z_0)^2}$.

Заключение

Таким образом, в настоящей работе показано, что аналитические представления функции Грина уравнения линейных внутренних гравитационных волн для модельных распределений плотности описываются сравнительно простыми аналитическими выражениями. В дальнейшем для решения ряда важных практических задач и приложений, используя операцию свертки, можно рассчитать волновые возмущения, возбуждаемые распределенными в пространстве нелокальными и нестационарными источниками возмущений. Полученные асимптотические результаты позволяют исследовать волновые возмущения, которые могут быть зарегистрированы с помощью радиолокационных и оптических систем, и несут информацию не только об источниках генерации, но и о характеристиках морской среды, что важно, в том числе для изучения реакции морской среды на различные гидродинамические возмущения и совершенствования методов дистанционного зондирования морской поверхности.

Начальные и граничные условия для конкретных источников возмущений должны определяться из результатов прямого численного моделирования полной системы уравнений гидродинамики или из сугубо оценочных полуэмпирических соображений, позволяющих адекватно аппроксимировать реальные нелокальные источники возмущений некоторой системой модельных источников. Полученные аналитические решения дают возможность рассчитывать основные амплитудно-фазовые характеристики возбуждаемых дальних полей ВГВ при определенных режимах генерации, и, кроме того, качественно анализировать полученные решения, что важно для правильной постановки более сложных математических моделей волновой динамики реальных природных стратифицированных сред (океан, атмосфера Земли). Модельные решения позволяют в дальнейшем получить представления волновых полей с учетом реальной изменчивости и нестационарности этих сред.

Как правило, физика гидродинамических явлений, описывающих генерацию ВГВ в реальных стратифицированных средах, достаточно сложна, и волновое поле вблизи источников не может быть описано в рамках линейной теории. Однако возможно сформулировать определенные начальные и граничные условия для решения гидродинамических задач в линейном приближении, и исследовать волновое поле в дальней зоне, при этом такие условия могут определяться из результатов прямого численного моделирования ближнего поля с учетом нелинейных уравнений гидродинамики, или из сугубо оценочных (полуэмпирических) соображений. Для проведения оценочных расчетов необходимо подбирать параметры использованной модели источника так, чтобы приблизить смоделированные волновые системы к реально наблюдаемым волновым картинам. Таким образом, математические модели волновой генерации могут быть не только верифицированы, но и использованы для проведения прогнозных оценок, так как в этих заданных априори модельных условиях заложено много реальной информации, на основе которой линейная теория вдали от нелокальных источников возмущений может давать удовлетворительные результаты. Поэтому, используя модельные представления для описания нелокальных источников различной физической природы, дальние поля внутренних гравитационных волн можно описать сравнительно простыми аналитическими формулами.

Финансирование

Работа выполнена в рамках государственного задания № FFGN-2024-0005.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Список литературы

1. Булатов В.В., Владимиров И.Ю. Динамика поверхностных и внутренних гравитационных волн в гидрофизических средах. М.: Физматлит, 2025. 320 с.
2. Ozsoy E. Geophysical fluid dynamics II. Stratified rotating fluid dynamics of the atmosphere-ocean. Springer Textbook in Earth Sciences. Geography and Environment. Switzerland AG Cham: Springer Nature, 2021. 323 p.
3. Pedlosky J. Waves in the ocean and atmosphere: introduction to wave dynamics. Berlin-Heidelberg: Springer, 2010. 260 p.
4. Sutherland B.R. Internal gravity waves. Cambridge: Cambridge University Press, 2010. 394 p.
5. Morozov E.G. Oceanic internal tides. Observations, analysis and modeling. Berlin: Springer, 2018. 317 p.
6. Morozov E.G., Tarakanov R.Yu., Frey D.I. Bottom gravity currents and overflow in deep channels of the Atlantic ocean. Springer Nature Switzerland AG, 2021. 483 p.
7. Velarde M. G., Tarakanov R.Yu., Marchenko A.V. (Eds.). The ocean in motion. Springer Oceanography. Springer International Publishing AG, 2018. 625 p.
8. Voelker G.S., Myers P.G., Walter M., Sutherland B.R. Generation of oceanic internal gravity waves by a cyclonic surface stress disturbance // Dynamics of Atmospheres and Oceans, 2019. V. 86. P. 116–133
9. Talipova T., Pelinovsky E., Didenkulova E. Internal tsunami waves in a stratified ocean induced by explosive volcano eruption: a parametric source // Physics Fluids, 2024. V. 36. P.042110.
10. Talipova T., Pelinovsky E., Didenkulova E. Internal waves generated by explosive eruptions of underwater volcanoes and their effect on the sea surface // Natural Hazards, 2025. V. 121. P. 661–675.
11. Kharif C., Pelinovsky E., Shunyaev A. Rogue waves in the ocean. Berlin: Springer, 2009. 260 p.
12. Adcroft A., Campin J.-M. MITgsm user manual. Cambridge: MIT, 2011. 455 p.
13. Chai J., Wang Z., Yang Z., Wang Z. Investigation of internal wave wakes generated by a submerged body in a stratified flow // Ocean Engineering, 2022. V. 266. P. 112840.
14. Wang J., Wang, S., Chen X., Wang W., Xu Y. Three-dimensional evolution of internal waves rejected from a submarine seamount // Physics Fluids, 2017. V. 29. P. 106601.
15. Gnevyshev V., Badulin S. Wave patterns of gravity-capillary waves from moving localized sources // Fluids, 2020. V. 5. P. 219.
16. Gervais A.D., Swaters G.E., Sutherland B.R. Transmission and reflection of three-dimensional Boussinesq internal gravity wave packets in nonuniform retrograde shear flow // Physical Review Fluids, 2022. V. 7. P. 114802.
17. Meunier P., Dizus S., Redekopp L., Spedding G. Internal waves generated by a stratified wake: experiment and theory // Journal of Fluid Mechanics, 2018. V. 846. P. 752–788
18. Broutman D., Brandt L., Rottman J., Taylor C. A WKB derivation for internal waves generated by a horizontally moving body in a thermocline // Wave Motion, 2021. V. 105. P. 102759.
19. Булатов В.В., Владимиров И.Ю. Аналитические свойства дисперсионных соотношений уравнения внутренних гравитационных волн с модельными и произвольными распределениями частоты плавучести // Вестник Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», 2023. Т. 12. № 1. С. 3–8.
20. Bulatov V.V. Internal gravity waves excited by motionless perturbation sources // Fluid Dynamics, 2023. V. 58. Suppl. 2. P. S240–S252.
21. Bulatov V.V. Asymptotics of far fields of internal gravity waves caused by localized sources in an infinite deep stratified medium // Fluid Dynamics, 2023. V. 58. Suppl. 2. P. S263–273.
22. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том 7. Теория поля. М.: Наука, 1988. 512 с.
23. Абрамович М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука, 1979. 832 с.
24. Никифоров А.Ф., Уваров В.В. Специальные функции математической физики. М.: ИД Интеллект, 2008. 344 с.

Analytical properties of the Green's function of the equation of linear internal gravity waves in stratified media with model distributions of buoyancy frequency

V. V. Bulatov 

Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics RAS, Moscow, 119526, Russia

 internalwave@mail.ru

Received September 21, 2025; revised October 20, 2025; accepted October 21, 2025

This paper presents a theoretical study of the analytical properties of the Green's function for the internal gravity wave equation for two model density distributions of a stratified, inviscid medium. Integral representations of the solutions are obtained in a linear formulation using the Fourier transform. The selection of a single-valued form for the resulting analytical solutions is discussed. The resulting analytical constructs, using integral convolution, enable the study of wave fields generated by arbitrary nonlocal and nonstationary disturbance sources in real natural stratified media. The obtained asymptotic results enable the investigation of wave disturbances that can be recorded using radar and optical systems. They provide information not only about the sources of generation but also about the characteristics of the marine environment. This is important, among other things, for studying the response of the marine environment to various hydrodynamic disturbances and improving methods for remote sensing of the sea surface. Initial and boundary conditions for specific disturbance sources should be determined from the results of direct numerical modeling of the complete system of hydrodynamic equations or from purely evaluative semi-empirical considerations, allowing for the adequate approximation of real non-local disturbance sources by a certain system of model sources. The resulting analytical solutions enable the calculation of the fundamental amplitude-phase characteristics of the excited far fields of internal gravity waves under certain generation conditions, and, furthermore, the qualitative analysis of the resulting solutions, which is important for the correct formulation of more complex mathematical models of the wave dynamics of real natural stratified media. These model solutions subsequently enable the derivation of representations of wave fields taking into account the actual variability and non-stationarity of such media.

Key words: linear internal gravity waves, stratified medium, Green's function, integral convolution, Fourier method.

References

1. *Bulatov V.V., Vladimirov I.Yu.* Dinamika poverhnostnih i vnutrennih gravitacionnih voln v gidrofizicheskikh sredah [Dynamics of surface and internal gravity waves in hydrophysical media]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2025. 320 p. (in Russian).
2. *Morozov E.G.* Oceanic internal tides. Observations, analysis and modeling. Berlin, Springer, 2018. 317 p.
3. *Morozov E.G., Tarakanov R.Yu., Frey D.I.* Bottom gravity currents and overflow in deep channels of the Atlantic ocean. Springer Nature Switzerland AG, 2021. 483 p.
4. *Ozsoy E.* Geophysical fluid dynamics II. Stratified rotating fluid dynamics of the atmosphere-ocean. Springer Textbook in Earth Sciences. Geography and Environment. Switzerland AG Cham, Springer Nature, 2021. 323 p.
5. *Pedlosky J.* Waves in the ocean and atmosphere: introduction to wave dynamics. Berlin-Heidelberg, Springer, 2010. 260 p.
6. *Sutherland B.R.* Internal gravity waves. Cambridge: Cambridge University Press, 2010. 394 p.
7. *Velarde M.G., Tarakanov R.Yu., Marchenko A.V. (Eds.)*. The ocean in motion. Springer Oceanography. Springer International Publishing AG, 2018. 625 p.

8. Voelker G.S., Myers P.G., Walter M., Sutherland B.R. Generation of oceanic internal gravity waves by a cyclonic surface stress disturbance. *Dynamics of Atmospheres and Oceans*, 2019. Vol. 86. Pp. 116–133.
9. Talipova T., Pelinovsky E., Didenkulova E. Internal tsunami waves in a stratified ocean induced by explosive volcano eruption: a parametric source. *Physics Fluids*, 2024. Vol. 36. P. 042110.
10. Talipova T., Pelinovsky E., Didenkulova E. Internal waves generated by explosive eruptions of underwater volcanoes and their effect on the sea surface. *Natural Hazards*, 2025. Vol. 121. Pp. 661–675.
11. Kharif C., Pelinovsky E., Shun'yaev A. *Rogue waves in the ocean*. Berlin, Springer, 2009. 260 p.
12. Adcroft A., Campin J.-M. *MITgcm user manual*. Cambridge, MIT, 2011. 455 p.
13. Chai J., Wang Z., Yang Z., Wang Z. Investigation of internal wave wakes generated by a submerged body in a stratified flow. *Ocean Engineering*, 2022. Vol. 266. P. 112840.
14. Wang J., Wang, S., Chen X., Wang W., Xu Y. Three-dimensional evolution of internal waves rejected from a submarine seamount. *Physics Fluids*, 2017. Vol. 29. P. 106601.
15. Gnevyshev V., Badulin S. Wave patterns of gravity–capillary waves from moving localized sources. *Fluids*, 2020. Vol. 5. Pp. 219.
16. Gervais A.D., Swaters G.E., Sutherland B.R. Transmission and reflection of three-dimensional Boussinesq internal gravity wave packets in nonuniform retrograde shear flow. *Physical Review Fluids*, 2022. Vol. 7. P. 114802.
17. Meunier P., Dizus S., Redekopp L., Spedding G. Internal waves generated by a stratified wake: experiment and theory. *Journal of Fluid Mechanics*, 2018. Vol. 846. Pp. 752–788.
18. Broutman D., Brandt L., Rottman J., Taylor C. A WKB derivation for internal waves generated by a horizontally moving body in a thermocline. *Wave Motion*, 2021. Vol. 105. P. 102759.
19. Bulatov V.V., Vladimirov I.Yu. Analiticheskie svoystva dispersionnih sootnoshenij uravneniya vnutrennih gravitacionnih voln s modelnimi i proizvolnimi raspredelenijami chastoti plavuchesti [Analytical properties of dispersion relations of the internal gravity wave equation with model and arbitrary buoyancy frequency distributions]. *Vestnik NIYaU MIFI*, 2023. Vol. 12(1). Pp. 3–8 (in Russian).
20. Bulatov V.V. Internal gravity waves excited by motionless perturbation sources. *Fluid Dynamics*, 2023. Vol. 58. Suppl. 2. Pp. S240–S252.
21. Bulatov V.V. Asymptotics of far fields of internal gravity waves caused by localized sources in an infinite deep stratified medium. *Fluid Dynamics*, 2023. Vol. 58. Suppl. 2. Pp. S263–273.
22. Landau L.D., Livshitz E.M. *Teoreticheskaja fizika. Tom 7. Teorija polja* [Theoretical physics. Vol.7. Field theory]. Moscow, Nauka Publ., 1988. 512 p. (in Russian).
23. Abramowitz M., Stegun I. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*. USA Department of Commerce: National Bureau of Standards. Applied Mathematics Series 55. Tenth Printing. 1972. 1064 p.
24. Nikiforov A.F., Uvarov V.V. *Specialnije funktsii matematicheskoy fiziki* [Special functions of mathematical physics]. Moscow, Intellect Publ., 2008. 344 p.

УДК 51-32

Аналитическое решение для определения температуры испаряющихся капель на твердой подложке

© 2025 г. С. З. Дунин, О. В. Нагорнов, В. П. Трифоненков, С. А. Тюфлин

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

Процесс испарения жидких капель на твердых поверхностях привлекает внимание исследователей, поскольку оказывается определяющим во многих прикладных задачах: в биологии, распылении пестицидов, печати принтеров, нанофабрикации, создании пленок с заданными свойствами, работе с OLED дисплеями, ДНК анализе и др. Процесс испарения капель сложен, поэтому аналитические модели могут дать понимание закономерностей процесса. Исследуется спонтанное испарение капель жидкости с горизонтальных подложек в неизотермическом приближении. Получены аналитические выражения для температуры и концентрации пара как функции безразмерных параметров, выраженные через термодинамические параметры подложки, жидкости и пара. Учет температурных поправок позволяет рассчитать силу Марангони, определяющую термокапиллярные течения в капле. Определены значения параметров, при которых направление силы Марангони меняет знак, и линии стагнации. Найдены критические значения коэффициентов теплопроводностей жидкости и подложки, при которых возбуждаются разнонаправленные течения. Проведены сравнения температурных полей с экспериментальными данными. Установлены критические параметры соотношения теплопроводностей капли и подложки, при которых меняется монотонное распределение температуры и возможно охлаждение капли.

Ключевые слова: испарение капли, термокапиллярные течения, сила Марангони, точки стагнации.

Введение

Возможность практического использования самоорганизующихся процессов, протекающих в испаряющихся каплях с растворенными в них микрообъектами, привлекает пристальное внимание к проблеме испарения посаженных капель [1–19]. Контроль режима испарения капель на подложке определяет не только время жизни капли, но и управляет скоростными потоками внутри капли и, как следствие, архитектуру осадков растворенных в капле веществ. Такие процессы планируют широко использовать в производстве новейших электронных и оптических материалов, при биохимическом тестировании, в DNA/RNA исследованиях.

Многоплановость процессов, протекающих в испаряющейся капле, одновременный учет температурных и скоростных полей, сложность математического описания из-за возникающих сингулярностей в плотности потока на краях капли (как и проблемы численного счета) заставляют авторов упрощать модели, учитывая те или иные факторы, определяющие процесс испарения. В серии работ [4–8] граничные условия на испаряющейся поверхности капли, скорректированные численными вычислениями методом конечных элементов (FEM), использовались для нахождения полей концентраций водяного пара. При этом концентрация насыщенных паров на поверхности капли не постоянна, что должно

✉ О.В. Нагорнов: ovnagornov@mephi.ru

Поступила в редакцию: 08.09.2025

После доработки: 20.10.2025

Принята к публикации: 21.10.2025

EDN CBESTR

приводить к температурной неоднородности вдоль поверхности. Эта неоднородность определяет силы Марангони, влияющие на скоростные потоки в капле, которые, как было показано в [4–8], при наличии растворенного в капле вещества, могут выносить его не только на периферию, но и в другие части высыхающей капли (наличие стагнационных точек, определяемых силами Марангони) [8]. В работах [5–8] экспериментально подтвержден этот вывод и дан количественный критерий направленности конвективных потоков. Показано, что время испарения капли и динамика любого не малого краевого угла хорошо описываются формулами [8]. В работах [15–17] проведен широкий комплекс экспериментальных исследований зависимости скорости испарения от различных термодинамических параметров сред и установлено сильное влияние теплопроводящих свойств подложки и жидкостей. Температурные поправки к полю концентрации получены численно (FEM).

В настоящей работе получены аналитические выражения для локальных температурных полей и полей концентрации, взаимосвязь которых учтена через граничные условия на границах капли. Знание этих полей позволяет вычислять как интегральные характеристики теплового и массового потока (не очень чувствительных к сингулярным особенностям плотностей потоков в силу их интегрируемости), так и локальные тепловые и массовые потоки с поверхности капли.

Постановка задачи

Рассматривается стационарный режим испарения капли жидкости на горизонтальной теплопроводящей подложке. Капля испаряется в режиме закрепленной контактной линии, краевой угол смачивания θ_c меньше 90° и уменьшается по мере испарения капли. Начальная фаза, когда капля расширяется по подложке, непродолжительна по времени и определяет начальные параметры капли (ее горизонтальный размер R , высоту h и начальный краевой угол θ_c). Капли миллиметрового размера $R \leq 2.7$ мм из-за малости числа Бонда $Bo = \rho g R h_0 / \sigma \sim 0.03 - 0.4$ можно считать сферическим сегментом; R – радиус контактной линии капли, отсчитанный от оси симметрии; θ_c – краевой угол; ρ – плотность жидкости; σ – коэффициент поверхностного натяжения жидкости; g – ускорение свободного падения; h_0 – высота капли (рис. 1). Последнюю фазу жизни капли перед ее быстрым исчезновением мы исключим из нашего рассмотрения.

В силу медленности изменения параметров капли по сравнению с характерным временем распространения тепла в пределах размеров капли ($t \gg R^2 k_{L,S}^{-1} = t_{L,S}$ – время диффузионного выравнивания поля концентрации и температуры на размере капли радиусом R) можно пренебречь временным слагаемым в уравнении теплопроводности и конвективным из-за малости числа Пекле $Pe \ll 1$. Тогда квазitemпературное поле в капле T_L и подложке T_s можно определить из решения уравнений Лапласа

$$\begin{cases} \Delta T_L = 0; \\ \Delta T_s = 0. \end{cases}$$

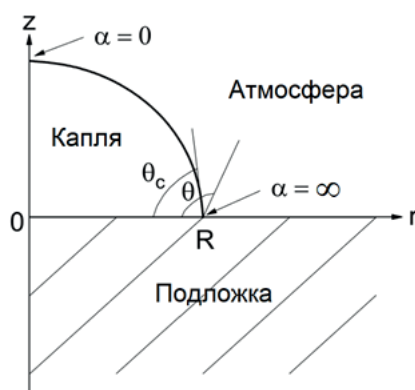


Рис. 1. Сферическая капля на твердой подложке

В газовой фазе массовая концентрация $c(\alpha, \theta)$ удовлетворяет стационарному уравнению Лапласа $\Delta c(\alpha, \theta) = 0$ (считаем газовую фазу неподвижной и пренебрегаем конвективным слагаемым в силу малости числа Пекле $Pe \ll 1$).

Влияния тепловых характеристик подложки и жидкости на массовые и тепловые потоки при спонтанном естественном испарении посаженной капли учитываются через граничные условия (равенство температур и тепловых потоков на границе жидкость – подложка). Предполагается, что основной тепловой поток, стимулирующий процесс испарения, исходит из подложки (пренебрегаем коэффициентом теплопроводности газа) и поступает к поверхности капли, где благодаря фазовому превращению трансформируется в массовый паровой поток, диффундирующий от поверхности капли (тепловым потоком из газовой фазы пренебрегаем). При выбранной конфигурации капли удобно решать систему уравнений Лапласа для полей концентрации и температур в тороидальной системе координат α, θ (см. рис. 1, границы капли совпадают с θ_c – краевым углом капли и $\theta = 0$). Полагаем равенство нулю нормальных производных концентраций в газовой фазе и температур в подложке на их общей границе и равенство температур и тепловых потоков на жидкой границе капли.

Решения для температур и концентрации с указанными граничными условиями на подложках, толщина которых значительно превышает радиус основания капли, можно представить в виде:

$$\begin{aligned} T_L(\alpha, \theta) &= T_\infty + \{2(\operatorname{ch} \alpha + \cos \theta)\}^{\frac{1}{2}} \times \left[\int_0^\infty d\tau P_{-\frac{1}{2}+i\tau}(\operatorname{ch} \alpha) \frac{\operatorname{ch} \tau \theta_c}{\operatorname{ch} \tau \pi} A_s(\tau) \times \frac{\operatorname{ch} \tau \pi \operatorname{ch} \tau \theta + k_R \operatorname{sh} \tau \pi \operatorname{sh} \tau \theta}{\operatorname{ch} \tau \pi \operatorname{ch} \tau \theta_c + k_R \operatorname{sh} \tau \pi \operatorname{sh} \tau \theta_c} \right], \quad 0 < \theta < \theta_c, \\ c_V(\alpha, \theta) &= c_\infty + \{2(\operatorname{ch} \alpha + \cos \theta)\}^{\frac{1}{2}} \times \left[\int_0^\infty d\tau P_{-\frac{1}{2}+i\tau}(\operatorname{ch} \alpha) \frac{\operatorname{ch} \tau \theta_c}{\operatorname{ch} \tau \pi} B_D(\tau) \times \frac{\operatorname{ch} \tau (\pi - \theta)}{\operatorname{ch} \tau (\pi - \theta_c)} \right], \quad \theta_c < \theta < \pi, \\ T_s(\alpha, \theta) &= T_\infty + \{2(\operatorname{ch} \alpha + \cos \theta)\}^{\frac{1}{2}} \times \left[\int_0^\infty d\tau P_{-\frac{1}{2}+i\tau}(\operatorname{ch} \alpha) \frac{\operatorname{ch} \tau \theta_c}{\operatorname{ch} \tau \pi} A_s(\tau) \times \frac{\operatorname{ch} \tau (\pi - \theta)}{\operatorname{ch} \tau \pi \operatorname{ch} \tau \theta_c + k_R \operatorname{sh} \tau \pi \operatorname{sh} \tau \theta_c} \right], \quad \pi < \theta < 2\pi, \end{aligned} \quad (1)$$

где T_L и T_s – температура в жидкости и подложке, соответственно; c_V – концентрация пара; $k_R = k_s/k_L$, T_∞ и c_∞ – окружающая температура и концентрация пара, соответственно; θ_c – краевой угол;

$P_{-\frac{1}{2}+i\tau}(\operatorname{ch} \alpha)$ – функции Лежандра [20], которые можно выразить через гипергеометрические функции Римана и гамма-функцию

$$P_{-\frac{1}{2}+i\tau}(\operatorname{ch} \alpha) = \frac{\Gamma(i\tau)}{\sqrt{\pi} \Gamma(0.5 + i\tau)} (2\operatorname{ch} \alpha)^{-0.5+i\tau} F\left(\frac{3}{4} - i\tau/4, \frac{1}{4} - i\tau/4, 1 + i\tau; \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \alpha}\right) + KC.$$

Это позволяет провести вычисления интегралов в комплексной плоскости τ . Распространив интегрирование на всю действительную ось, и замыкая контур через бесконечную полуокружность в верхней полуплоскости τ , получим ряд по степеням $(r^2/R^2)^{-m}$. Наибольший вклад в окрестности края капли вносят полюса, ближайшие к действительной оси (в работах [1, 2] приведен именно этот вклад полюсов $B_D(\tau)$). Полюс гамма-функции, лежащий на действительной оси, определяет температуру и концентрацию пара на краях капли. Ядра B_D, A_s в интегральных выражениях, определяющие поведение температурных и концентрационных полей в пространстве, находятся из граничных условий на границе капли. Так, считая, что приток тепла к поверхности капли от газовой фазы отсутствует, определяем значения:

$$\begin{aligned} Lj_L(\alpha, \theta_c) &\approx q_L(\alpha, \theta_c), \\ Lj_c(\alpha, \theta_c) &= -L \frac{D}{R} (\operatorname{ch} \alpha + \cos \theta_c) \frac{d}{d\theta_c} c(\alpha, \theta_c) = -\frac{k_L}{R} (\operatorname{ch} \alpha + \cos \theta_c) \frac{d}{d\theta_c} T_L(\alpha, \theta_c), \end{aligned} \quad (2)$$

где L – удельная теплота испарения; j_L – поток массы; q_L – тепловой поток. Считая, что на всей поверхности капли граничные условия такие же, как в окрестности края капли, получим связь между ядрами интегральных представлений

$$-LDB_D(\tau) \tan \tau (\pi - \theta_c) = k_L A_s(\tau) (\operatorname{ch} \tau \pi \operatorname{sh} \tau \theta_c + k_R \operatorname{sh} \tau \pi \operatorname{ch} \tau \theta_c). \quad (3)$$

В квазистационарном режиме испарения на поверхности капли выполнено условие Клапейрона – Клаузиуса, связывающее концентрацию насыщенных паров и температуру в любой точке газовой фазы. Ограничиваясь линейной зависимостью концентрации пара от температуры

$$c_V(\alpha, \theta_c) - c_{s\infty} = c'_{sT} (T_L(\alpha, \theta_c) - T_\infty), \quad (4)$$

определим ядро $B_D(\tau)$, зависящее от параметров жидкости, подложки и газовой фазой

$$\begin{aligned} B_D(\tau) &= B_D(\tau, \theta_c, k_R, \Gamma) = \hat{B}_D(\tau)(c_{s\infty} - c_\infty), \\ \hat{B}_D(\tau) &= \left\{ 1 + \Gamma \tan \tau (\pi - \theta_c) \times \frac{\operatorname{ch} \tau \pi \operatorname{ch} \tau \theta_c + k_R \operatorname{sh} \tau \pi \operatorname{sh} \tau \theta_c}{\operatorname{ch} \tau \pi \operatorname{sh} \tau \theta_c + k_R \operatorname{sh} \tau \pi \operatorname{ch} \tau \theta_c} \right\}^{-1}, \\ \Gamma &= c'_{sT} \frac{DL}{k_L} \frac{p_{atm}}{p}. \end{aligned}$$

Здесь $c_{s\infty}$ – концентрация насыщенного пара в окружающей среде; D – коэффициент диффузии; p – давление. Важно отметить, что в неизотермическом случае ядро зависит как от краевого угла, теплопроводящих свойств жидкости и подложки (k_L, k_s), так и от термодинамических параметров жидкости и газа $\left(c'_{sT} = \frac{dc_n}{dT}, D, L \right)$.

Из (1–5) можно вычислить температурный профиль вдоль поверхности капли:

$$T_L(\alpha, \theta_c) - T_\infty = \frac{c_{s\infty}}{c'_{sT}} (1 - H) \left[-1 + \left\{ 2(\operatorname{ch} \alpha + \cos \theta_c) \right\}^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty d\tau P_{\frac{1}{-2} + i\tau} (\operatorname{ch} \alpha) \frac{\operatorname{ch} \tau \theta_c}{\operatorname{ch} \tau \pi} \operatorname{ch} [\tau (\pi - \theta_c)] \hat{B}_D(\tau) \right]. \quad (6)$$

Тогда находим уравнение для температуры на краю капли:

$$\begin{aligned} \Delta T = \frac{T_L(\infty, \theta_c) - T_\infty}{\frac{c_{s\infty}}{c'_{sT}} (1 - H)} &= \Gamma_{atm} \frac{p_{atm}}{p} \times \frac{\left(1 - \frac{\theta_c}{\pi} \right)}{k_R + \frac{\theta_c}{\pi} + \Gamma_{atm} \frac{p_{atm}}{p} \left(1 - \frac{\theta_c}{\pi} \right)}, \\ \left(\frac{c_{s\infty}}{c'_{sT}} \right)^{-1} &= \frac{\mu L}{RT_\infty^2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Силу Марангони в любой точке поверхности капли можно вычислить через градиент температуры вдоль поверхности капли

$$F_M(\alpha, \theta_c) = \nabla_\tau \sigma(\alpha, \theta_c) = \sigma'_T \nabla_\tau T_L(\alpha, \theta_c) = \frac{\sigma'_T}{R} (\operatorname{ch} \alpha + \cos \theta_c) \frac{d}{d\alpha} T_L(\alpha, \theta_c), \quad \sigma'_T = \frac{d\sigma}{dT}. \quad (8)$$

Результаты и анализ

Аналитические решения для испаряющихся капель на подложке рассматривались ранее в [11–13, 21]. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными, относящимися к ситуации, близкой к постановке задачи рассматриваемой в нашей математической модели. Разность температур не зависит от радиуса капли и при больших k_R стремится к нулю по закону обратной пропорциональности. Таким образом, для подложек с высокой теплопроводностью (из алюминия, золота, меди, силикона) температура края капли близка к температуре окружающей каплю атмосферы (базовая модель в терминологии [16]). Экспериментальные данные измерений разности температур на краю капли на подложках из материалов PTFE, Масог и золота, и окружающего газа при атмосферном давлении ($T_{\text{ambient}} - T_6 \approx 1.3^\circ\text{C}$) [17], что неплохо совпадает с нашими результатами для воды в атмосфере ненасыщенного воздуха $\Gamma_{\text{ref}} \approx 0.11$, $c_{\text{soe}} c'_{sT}{}^{-1} = 17.3^\circ\text{C}$ при $H = 0.55$ на PTFE при $\theta_c = 30^\circ$: $\Delta T_{\text{PTFE}} \approx 1.3^\circ\text{C}$, $\Delta T_{\text{Al}} \approx 0$. Наши результаты показывают не только правильный тренд, но и хорошее численное совпадение с экспериментальными данными. Расчеты указывают, что для спонтанно испаряющейся капли, по мере уменьшения краевого угла, температура в вершине капли при определенных условиях могут быть выше, чем на краях капли. На рис. 2, а дана зависимость безразмерной разности температур произвольной точки поверхности капли и в ее вершине для различных подложек и контактных углов.

По мере уменьшения контактного угла, температура меняется монотонно (увеличивается к краю капли) при $k_R \geq k_c = 0.57$, и становится не монотонной при $k_R \leq 0.57$. В точках стагнации (отмечены крестом), в которых температура достигает минимума, сила Марангони меняет направление (безразмерная сила Марангони приведена на рис. 2, б). Экспериментально эффекты охлаждения капель исследовались в [22]. Изменение направления силы Марангони зависит от краевого угла. Это ранее было отмечено в работах [2, 6].

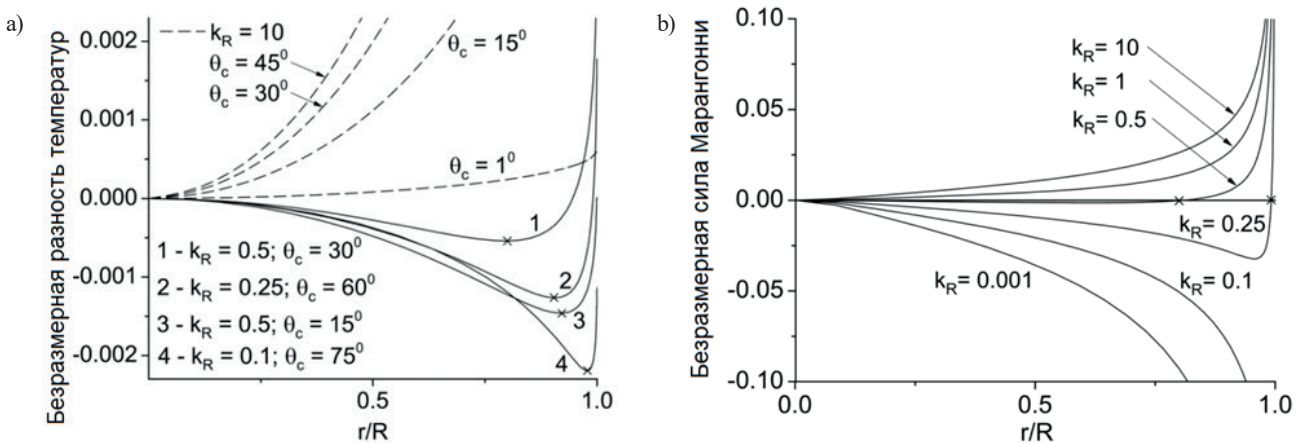


Рис. 2. Безразмерная разность температур (а) и безразмерная сила Марангони (б) вдоль поверхности капли для различных подложек и краевых углов

Заключение

Получены аналитические выражения для температуры и концентрации пара для испарения покоящейся капли с закрепленной линией контакта, учитывающие теплопроводящие свойства подложки и жидкости и термодинамические параметры газовой фазы. Определено критическое значение параметра k_c , при котором поведение системы меняется. Для $k_R \geq k_c = 0.57$ температура на поверхности капли – монотонная и температура вершины ниже, чем температура рядом с линией контакта. В этом

случае возможно формирование течения, направленного к центру около подложки и к краю капли около поверхности капли. Температура на поверхности капли немонотонна при $k_R \leq k_c$, что приводит к возникновению точек стагнации, в которых сила Марангони меняет свое направление. Из-за этого формируются противоположно направленные течения. Положение точек стагнации зависит от материалов жидкости и подложки и от краевого угла. При уменьшении краевого угла линии стагнации перемещаются к краям капли.

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

С.З. Дунин – постановка задачи, участие в проведении вычислений.

О.В. Нагорнов – участие в проведении исследования, анализ и обсуждение результатов.

В.П. Трифоненков – участие в проведении вычислений, анализ и обсуждение результатов.

С.А. Тюфлин – обсуждение результатов.

Список литературы

1. Deegan R.D., Bakajin O., Dupont T.F., Huber G., Nagel S.R., Witten T.A. Capillary flow as the cause of ring stains from dried liquid drops // *Nature*, 1997. V. 389. P. 827–829. DOI: 10.1038/39827.
2. Deegan R.D., Bakajin O., Dupont T.F., Huber G., Nagel S.R., Witten T.A. Contact line deposits in an evaporating drop // *Physical Review E*, 2000. V. 62. P. 756–765. DOI: 10.1103/physreve.62.756.
3. Deegan R.D. Pattern formation in drying drops // *Physical Review E*, 2000. V. 61(1). P. 475–485. DOI: 10.1103/physreve.61.475.
4. Ristenpart W.D., Kim P.G., Domingues C., Wan J., Stone H.A. Influence of Substrate Conductivity on Circulation Reversal in Evaporating Drops // *Physical Review Letters*, 2007. V. 99. P. 234502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.99.234502.
5. Hu H., Larson R.G. Analysis of the Effects of Marangoni Stresses on the Microflow in an Evaporating Sessile Droplet // *Langmuir*, 2005. V. 21(9). P. 3972–3980. DOI: 10.1021/la0475270.
6. Hu H., Larson R.G. Evaporation of a sessile droplet on a substrate // *Journal of Physical Chemistry B*, 2002. V. 106. P. 1334–1344. DOI: 10.1021/jp0118322.
7. Hu H., Larson R.G. Analysis of the microfluid flow in an evaporating sessile droplet // *Langmuir*, 2005. V. 21(9). P. 3963–3971. DOI: 10.1021/la047528s.
8. Hu H., Larson R.G. Marangoni effect reverses coffee-ring depositions // *Journal of Physical Chemistry B*, 2006. V. 110(14). P. 7090–7094. DOI: 10.1021/jp0609232.
9. Watanabe T. Simulation of surface flows on a droplet in an oscillating pressure field // *International Journal of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 2011. V. 5. Iss. 8. P. 1398–1405.
10. Torfi S., Nejad S.M.H. Droplet Simulation, A Case Study: Evaporation. WSEAS Transactions on Fluid Mechanics, 2011. V. 6. Iss. 3. P. 192–197.
11. Nagornov O.V., Starostin N.V. Influence of substrate properties on evaporation of the sessile drop // *Advances in Engineering Mechanics and Materials*, 2014. P. 98–100.
12. Nagornov O.V., Starostin N.V. Influence of properties of liquid and substrate on evaporation of the sessile drop // *Wseas Transactions on Heat and Mass Transfer*, 2014. V. 9. P. 221–225.
13. Dunin S.Z., Nagornov O.V., Starostin N.V., Trifonenkov V.P. Analytical Solution for Evaporating Sessile Drops on Solid Substrates // *Recent Advances in Applied Mathematics, Modelling and Simulation*, 2014. P. 252–255.
14. Popov Y.O. Evaporative deposition patterns: spatial dimensions of the deposit // *Physical Review E*, 2005, V. 71. P. 036313. DOI: 10.1103/PhysRevE.71.036313.
15. Dunn G.J., Wilson S. K., Duffy B.R., David S., Sefiane K. The strong influence of substrate conductivity on droplet evaporation // *Journal of Fluid Mechanics*, 2009. V. 623. P. 329–351. DOI: 10.1017/S0022112008005004.
16. Sefiane K., Wilson S.K., David S., Dunn G.J., Duffy B.R. On the Effect of the Atmosphere on the Evaporation of Sessile droplet of water // *Physics of Fluids*, 2009. V. 21(6). P. 062101. DOI: 10.1063/1.3131062.

17. David S., Sefiane K., Tadrist L. Experimental investigation of the effect of thermal properties of the substrate in the wetting and evaporation of sessile drops // *Colloids and Surfaces A: Physico-chem. Eng. Aspects*, 2007. V. 298 (1). P. 108–114. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2006.12.018.
18. Semenov S., Starov V.M., Rubio R.G., Agogo H., Velarde M.G. Evaporation of sessile water droplets: Universal behaviour in presence of contact angle hysteresis // *Colloids Surf. Aspects*, 2011. V. 391. P. 135–1444.
19. Saada M.A., Chikh S., Tadrist L. Evaporation of a sessile drop with pinned or receding contact line on a substrate with different thermophysical properties // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2013. V. 58, P. 197–208. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.11.026.
20. Lebedev N.N. Special functions and their applications. Prentice-Hall: Englewood Cliffs, NJ, 1965. 322 p.
21. Gossali G.E., Tonini S. Analytical solutions for modelling the evaporation of sessile drops // *Applied Mathematical Modelling*, 2023. V. 114. P. 61–77. DOI: 10.1016/j.apm.2022.09.023.
22. Emelyanenko K.A., Emelyanenko A.M., Boinovich L.B. Supercooling of evaporating water droplets on superhydrophobic surface at low temperatures // *Colloid Journal*, 2025, V. 87. № 4. P. 481–491. DOI: 10.1134/S1061933X25600642.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 6, pp. 478–485

Analytical solution for temperature of evaporative drops on solid substrate

S. Z. Dunin, O. V. Nagornov[✉], V. P. Trifonenkov, S. A. Tyufilin

National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, 115409, Russia

[✉] ovnagornov@mephi.ru

Received September 08, 2025; revised October 20, 2025; accepted October 21, 2025

The evaporation of liquid droplets on solid surfaces attracts the attention because it turns out to be decisive in many applied problems: in biology, pesticide spraying, printing, creating films with given properties, OLED technology, nanofabrication, DNA analysis, etc. The droplet evaporation is complex process, so analytical models can provide insight into process. Free evaporation of sessile liquid non-isothermal drop on solid substrate is analyzed. Exact formulae for temperature and concentration fields are found out as functions of dimensionless parameters. The non-uniform temperature distribution at the drop surface creates the thermocapillar Marangoni forces that change their direction in the vicinity of stagnation points. Direction of the forces and disposition of the stagnation points are derived as function of contact angle and thermodynamic parameters of model. Conditions for the stagnation points to appear are found out. Comparison of calculated and measured temperatures is done. The critical parameters of the ratio of the conductivities of droplet and substrate at which the monotonic temperature distribution changes and the cooling of droplet is possible.

Keywords: drop evaporation, thermocapillar flow, the Marangoni force, stagnation points.

References

1. Deegan R.D., Bakajin O., Dupont T.F., Huber G., Nagel S.R., Witten T. A. Capillary flow as the cause of ring stains from dried liquid drops. *Nature*, 1997. Vol. 389. Pp. 827–829. DOI:10.1038/39827.
2. Deegan R.D., Bakajin O., Dupont T.F., Huber G., Nagel S.R., Witten T.A. Contact line deposits in an evaporating drop. *Physical Review E*, 2000. Vol. 62. Pp. 756–765. DOI: 10.1103/physreve.62.756.
3. Deegan R.D. Pattern formation in drying drops. *Physical Review E*, 2000. Vol. 61(1). Pp. 475–485. DOI: 10.1103/physreve.61.475.
4. Ristenpart W.D., Kim P.G., Domingues C., Wan J., Stone H.A. Influence of Substrate Conductivity on Circulation Reversal in Evaporating Drops. *Physical Review Letters*, 2007. Vol. 99. Pp. 234502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.99.234502.
5. Hu H., Larson R.G. Analysis of the Effects of Marangoni Stresses on the Microflow in an Evaporating Sessile Droplet. *Langmuir*, 2005. Vol. 21(9). Pp. 3972–3980. DOI: 10.1021/la0475270.

6. *Hu H., Larson R.G.* Evaporation of a sessile droplet on a substrate. *Journal of Physical Chemistry B*, 2002. Vol. 106. Pp. 1334–1344. DOI: 10.1021/jp0118322.
7. *Hu H., Larson R.G.* Analysis of the microfluid flow in an evaporating sessile droplet. *Langmuir*, 2005. Vol. 21(9). Pp. 3963–3971. DOI: 10.1021/la047528s.
8. *Hu H., Larson R.G.* Marangoni effect reverses coffee-ring depositions. *Journal of Physical Chemistry B*, 2006. Vol. 110(14). Pp. 7090–7094. DOI: 10.1021/jp0609232.
9. *Watanabe T.* Simulation of surface flows on a droplet in an oscillating pressure field. *International Journal of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 2011. Vol. 5. Iss. 8. Pp. 1398–1405.
10. *Torfi S., Nejad S.M.H.* Droplet Simulation, A Case Study: Evaporation. *WSEAS Transactions on Fluid Mechanics*, 2011. Vol. 6. Iss. 3. Pp. 192–197.
11. *Nagornov O.V., Starostin N.V.* Influence of substrate properties on evaporation of the sessile drop. *Advances in Engineering Mechanics and Materials*, 2014. Pp. 98–100.
12. *Nagornov O.V., Starostin N.V.* Influence of properties of liquid and substrate on evaporation of the sessile drop. *Wseas Transactions on Heat and Mass Transfer*, 2014. Vol. 9. Pp. 221–225.
13. *Dunin S.Z., Nagornov O.V., Starostin N.V., Trifonenkov V.P.* Analytical Solution for Evaporating Sessile Drops on Solid Substrates. *Recent Advances in Applied Mathematics, Modelling and Simulation*, 2014. Pp. 252–255.
14. *Popov Y.O.* Evaporative deposition patterns: spatial dimensions of the deposit. *Physical Review E*, 2005. Vol. 71. Pp. 036313. DOI: 10.1103/PhysRevE.71.036313.
15. *Dunn G.J., Wilson S.K., Duffy B.R., David S., Sefiane K.* The strong influence of substrate conductivity on droplet evaporation. *Journal of Fluid Mechanics*, 2009. Vol. 623. Pp. 329–351. DOI: 10.1017/S0022112008005004.
16. *Sefiane K., Wilson S.K., David S., Dunn G.J., Duffy B.R.* On the Effect of the Atmosphere on the Evaporation of Sessile droplet of water. *Physics of Fluids*, 2009. Vol. 21(6). Pp. 062101. DOI: 10.1063/1.3131062.
17. *David S., Sefiane K., Tadrist L.* Experimental investigation of the effect of thermal properties of the substrate in the wetting and evaporation of sessile drops. *Colloids and Surfaces A: Physico-chem. Eng. Aspects*, 2007. Vol. 298 (1). Pp. 108–114. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2006.12.018.
18. *Semenov S., Starov V.M., Rubio R.G., Agogo H., Velarde M.G.* Evaporation of sessile water droplets: Universal behaviour in presence of contact angle hysteresis. *Colloids Surf. Aspects*, 2011. Vol. 391. Pp. 135–1444.
19. *Saada M.A., Chikh S., Tadrist L.* Evaporation of a sessile drop with pinned or receding contact line on a substrate with different thermophysical properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2013. Vol. 58. Pp. 197–208. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.11.026.
20. *Lebedev N.N.* Special functions and their applications. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1965. 322 p.
21. *Gossali G.E., Tonini S.* Analytical solutions for modelling the evaporation of sessile drops. *Applied Mathematical Modelling*, 2023. Vol. 114. Pp. 61–77. DOI: 10.1016/j.apm.2022.09.023.
22. *Emelyanenko K.A., Emelyanenko A.M., Boinovich L.B.* Supercooling of evaporating water droplets on superhydrophobic surface at low temperatures. *Colloid Journal*, 2025. Vol. 87. No. 4. Pp. 481–491. DOI 10.1134/S1061933X25600642.

УДК 51-32

Анализ автомодельных решений задач о взаимодействии льда с гидрофильной жидкостью

© 2025 г. О. В. Нагорнов¹, Т. И. Бухарова¹, В. С. Загороднов², В. Л. Камынин¹¹ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия² Cryosphere Research Solutions LLC, Columbus, OH, 43221, США

Одномерные автомодельные решения позволяют установить основные аналитические закономерности процессов. В отличие от хорошо известной задачи Стефана о промерзании чистой воды при контакте со льдом, температура фазового перехода не постоянна и зависит от концентрации гидрофильной жидкости, описываемой уравнением диффузии. В работе используется линейное приближение для связи равновесных температуры и концентрации на границе контакта. Температура во льду и в жидкости описывается уравнениями теплопроводности. На фазовой границе происходит тепломассообмен: вода из гидрофильной жидкости намерзает на поверхность льда, ее концентрация увеличивается, или наоборот, происходит растворение льда на границе и понижается концентрация гидрофильной жидкости. Это определяется входными параметрами задачи. В работе анализируются такие решения для случая контакта льда с гидрофильными жидкостями – морской водой и раствором этанола, встречающиеся в задачах взаимодействия шельфовых ледников с океаном и при термическом бурении скважин в ледниках. В работе исследуются особенности выбора значений температуропроводности жидкости в прикладных задачах.

Ключевые слова: автомодельное решение, эффективная температуропроводность, гидрофильная жидкость.

Введение

Детальная постановка задачи рассмотрена ранее в [1]. Для двух контактирующих полупространств, заполненных гидрофильной жидкостью (HL) ($x < 0$) и льдом ($x > 0$) основная система уравнений имеет вид [1–4]:

$$T_{f,t} = a_f^2 T_{f,xx}, \quad -\infty < x < 0, t > 0, \quad (1)$$

$$C_t = a_c^2 C_{xx}, \quad -\infty < x < 0, t > 0, \quad (2)$$

$$T_{i,t} = a_i^2 T_{i,xx}, \quad 0 < x < +\infty, t > 0, \quad (3)$$

$$C(x, 0) = C_0, \quad T_f(x, 0) = T_1, \quad -\infty < x < 0, \quad (4)$$

$$T_i(x, 0) = T_0, \quad 0 < x < +\infty \quad (5)$$

$$k_f T_{f,x} - k_i T_{i,x} = L\rho \xi'(t), \quad x = \xi(t), t > 0, \quad (6)$$

✉ О.В. Нагорнов: ovnagornov@mephi.ru

Поступила в редакцию: 25.09.2025

После доработки: 29.10.2025

Принята к публикации: 05.11.2025

EDN JREVSJ

$$T_f(\xi, t) = T_i(\xi, t) = T_{eq}, t > 0, \quad (7)$$

$$C_{eq} = AT_{eq}, \quad x = \xi(t), t > 0, \quad (8)$$

$$-a_c^2 C_x = C \xi'(t), \quad x = \xi(t), t > 0, \quad (9)$$

где T_f и T_i – температура НЛ и льда, соответственно; C – концентрация НЛ; температуры и концентрация зависят от двух переменных (x, t) , x – координата, t – время; нижние индексы t и x в уравнениях обозначают соответствующие частные производные; a_f^2, a_i^2, a_c^2 – температуропроводности НЛ, льда и коэффициент диффузии НЛ, соответственно; C_0, T_1, T_0 – постоянные; k_f и k_i – коэффициенты теплопроводности НЛ и льда, соответственно; L – теплота плавления; ρ – плотность льда; A – постоянная.

В данной работе анализируется влияние выбора коэффициента температуропроводности гидрофильной жидкости на скорость движения фазовой границы, что необходимо учитывать при математическом моделировании прикладных задач.

Анализ автомодельного решения

Система уравнений (1)–(9) допускает автомодельное решение так, что все неизвестные оказываются функциями комбинации переменных $x/\sqrt{t}$ [1, 4]. Переходя к автомодельной переменной, уравнения в частных производных преобразуются в обыкновенные дифференциальные уравнения. Температуры и концентрация тогда могут быть найдены в следующем виде:

$$T_f(x, t) = B_1 + D_1 \Phi\left(\frac{x}{2a_f\sqrt{t}}\right), \quad T_i(x, t) = B_2 + D_2 \Phi\left(\frac{x}{2a_i\sqrt{t}}\right), \quad C(x, t) = B_3 + D_3 \Phi\left(\frac{x}{2a_c\sqrt{t}}\right), \quad (10)$$

где B и D с индексами обозначают неизвестные постоянные; $\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt$ – функция ошибок.

Фазовая граница подчиняется уравнению $\xi(t) = \alpha\sqrt{t}$, где α – постоянная (автомодельный параметр), подлежащая определению. Исключая неизвестные, получаем трансцендентное уравнение для параметра α :

$$\frac{T_1 G_f}{1 + \Phi_f} - \frac{C_0 \cdot G_f}{A} \left[\frac{1}{1 + \Phi_f} - \frac{\alpha}{\alpha(1 + \Phi_c) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} a_c E_c} \right] + \frac{T_0 G_i}{1 - \Phi_i} - \frac{C_0 G_i}{(1 - \Phi_i)A} \left[1 - \frac{\alpha(1 + \Phi_f)}{\alpha(1 + \Phi_c) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} a_c E_c} \right] = \alpha \rho L, \quad (11)$$

где уравнение (11) представляет исправленное уравнение для α из [1] и введены следующие обозначения:

$$\Phi_f = \Phi\left(\frac{\alpha}{2a_f}\right), \quad \Phi_i = \Phi\left(\frac{\alpha}{2a_i}\right), \quad \Phi_c = \Phi\left(\frac{\alpha}{2a_c}\right), \\ E_c = e^{-\frac{\alpha^2}{4a_c^2}}, \quad E_f = e^{-\frac{\alpha^2}{4a_f^2}}, \quad E_i = e^{-\frac{\alpha^2}{4a_i^2}}, \quad G_f = \frac{2k_f \cdot E_f}{\sqrt{\pi} \cdot a_f}, \quad G_i = \frac{2k_i \cdot E_i}{\sqrt{\pi} \cdot a_i}.$$

В случае взаимодействия чистой воды и льда уравнение (11) упрощается и сводится к уравнению:

$$\frac{T_1 G_f}{1 + \Phi_f} + \frac{T_0 G_i}{1 - \Phi_i} = \alpha \rho L.$$

Когда конвективные движения и стратификация в жидкости отсутствуют, используются табличные значения для молекулярных температуропроводностей и коэффициента диффузии (табл. 1).

Таблица 1. Параметры задачи

a_i^2	a_f^2	a_c^2	k_i	k_f	k_c
$1.33 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-8}$	2.22	0.53	2.0

В таблице размерности температуропроводностей указаны в $\text{м}^2/\text{с}$, коэффициенты теплопроводностей в $\text{Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$, плотность льда $917 \text{ кг}/\text{м}^3$, теплота плавления льда $3.3 \cdot 10^5 \text{ Дж}/\text{кг}$. В реальных задачах, например, взаимодействие океана и шельфового ледника, или процесс термобурения ледников с помощью гидрофильных жидкостей, вследствие образования конвективных ячеек и стратификации, необходимо использовать эффективные турбулентные значения температуропроводности жидкости [6–8]. Поэтому изменение температуропроводности морской воды и НЛ меняется от молекулярных значений порядка $10^{-8} - 10^{-7}$ до значений $0.01 - 0.1$ и выше в случае интенсивного перемешивания жидкости. В частности для областей подо льдом (шельфовые ледники) так называемая подавленная турбулентность (superstressed turbulent thermal diffusivity) составляет величины порядка $10^{-6} - 10^{-5}$, в придонных, верхних перемешанных слоях, в термоклинах, на больших глубинах океана эффективная температуропроводность меняется от 10^{-5} до $0.01 \text{ м}^2/\text{с}$ [6–8].

При моделировании натурных и лабораторных процессов термобурения ледников выбор значений температуропроводностей для гидрофильной жидкости оказывается принципиально влияет на результаты моделирования [4]. В силу отличия характера конвективных ячеек при лабораторном и натурном бурения льда, при моделировании необходимо надлежащим образом выбирать значения температуропроводностей.

На рис. 1 показано влияние значений температуропроводности морской воды на скорость растворения льда (аналогично в случаях бурения льда и последующего смыкания образованных скважин рассчитываемая скорость будет сильно зависеть от выбранного значения температуропроводности НЛ). При малых значениях температуропроводности параметр скорости растворения льда α значительно меняется, а при значениях порядка $10^{-3} \text{ м}^2/\text{с}$ и выше выходит почти на постоянную величину (в расчетах использовались следующие значения: $C_0 = 0.347$, $T_0 = -20^\circ\text{C}$, $T_1 = 1^\circ\text{C}$, $A = -0.01334$).

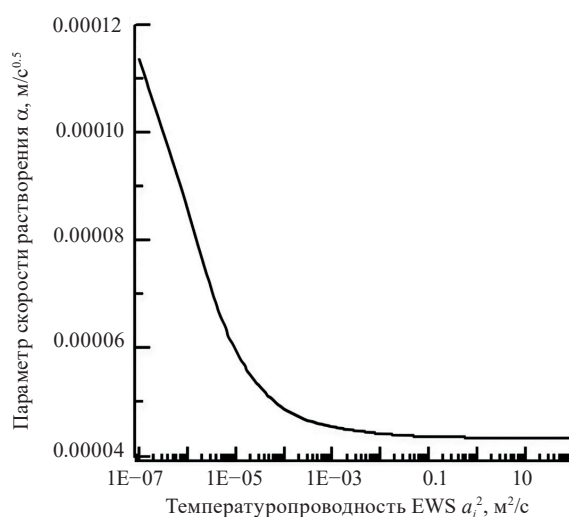


Рис. 1. Влияние эффективной температуропроводности морской воды на скорость фазовой границы

Рис. 2 демонстрирует влияние эффективной температуропроводности воды в условиях подавленной турбулентности. С увеличением температуропроводности скорость изменения скорости фазовой границы уменьшается.

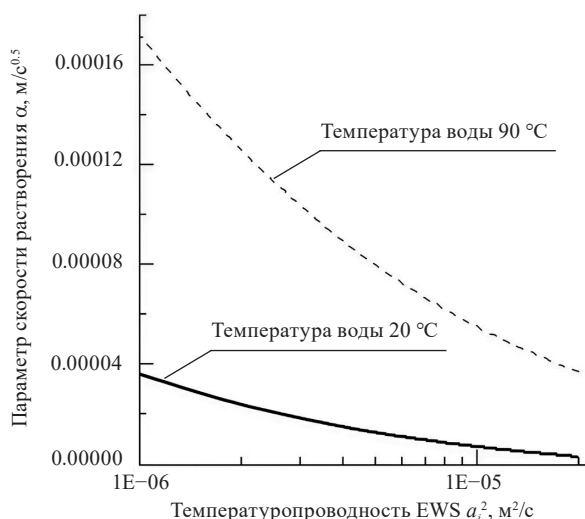


Рис. 2. Влияние эффективной теплопроводности и температуры жидкости на скорость фазовой границы.

Выводы

Найдено автомоделное решение задачи о взаимодействии льда с гидрофильной жидкостью. Фазовая граница движется согласно соотношению $x = \xi(t) = \alpha\sqrt{t}$ подобно хорошо известному решению задачи Стефана. Для параметра α , определяющего решение задачи, получено трансцендентное уравнение и определено численное решение при различных входных параметрах. Температура и концентрация гидрофильной жидкости, а также температура льда найдены в явной форме, удобной для дальнейшего анализа. На основе аналитического решения установлено, что скорость фазовой границы чувствительна к выбору значения эффективной теплопроводности гидрофильной жидкости. Поэтому при моделировании сложных прикладных задач выбор этого параметра заранее не известен, и его нужно определять из дополнительных условий. При высоких значениях теплопроводности гидрофильной жидкости, порядка 10^{-3} м²/с и выше, параметр скорости фазовой границы становится почти постоянным.

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, участие в проведении исследования, анализ и обсуждение результатов.

Т.И. Бухарова – участие в проведении вычислений.

В.С. Загороднов – анализ и обсуждение результатов.

В.Л. Камынин – обсуждение результатов.

Список литературы

1. Нагорнов О.В., Бухарова Т.И. Автомоделное решение задачи о растворении льда гидрофильной жидкостью // Вестник НИЯУ МИФИ, 2025. Т. 14. № 4. С. 352–356.
2. Nagornov O.V., Sergienko O.V. Temperature field of an ice shelf in the vicinity of a hot water-drilled well // Journal of Engineering Physics and Thermophysics, 1998. V. 71. № 1. P. 154–160.

3. Nagornov O.V., Zagorodnov V.S., Kelley J.J. Interaction of hydrophilic liquid with ice // Proceedings of Fourth International Symposium on Thermal Engineering and Science for Cold Regions, September 28 – October 1, 1993.
4. Talalay P.G., Fan X. Alternative clean approaches to accessing subglacial Lake Vostok // Arctic and Antarctic Research, 2024. V. 70(4). P. 499–513.
5. Кудряшов Н.А. Методы нелинейной математической физики. 2010. Долгопрудный: ИД Интеллект. 368 с.
6. Osborn T.R. Estimates of the local rate of vertical diffusion from dissipation measurements // Journal of Physical Oceanography, 1980. V.10(1). P. 83–89.
7. Stillinger D.C., Helland K.N., Van Atta C. W. Experiments on the transition of homogeneous turbulence to internal waves in a stratified fluid // Journal of Fluid Mechanics, 1983. V. 131. P. 91–122.
8. Gregg M.C., D'Asaro E.A., Riley J.J., Kunze E. Mixing efficiency in the ocean // Annual Review of Marine Science, 2018. V. 10. P. 443–473.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 6, pp. 486–491

Analysis of self-similar solutions for the ice and hydrophilic liquid interaction problems

O. V. Nagornov^{1,✉}, T. I. Bukharova¹, V. S. Zagorodnov², V. L. Kamynin¹

¹ National research nuclear university MEPhI, Moscow, 115409, Russia

² Cryosphere Research Solutions LLC, Columbus, OH, 43221, USA

✉ ovnagornov@mephi.ru

Received September 25, 2025; revised October 29, 2025; accepted November 05, 2025

One-dimensional self-similar solutions allow us to establish the fundamental analytical properties for processes. Unlike the well-known Stefan problem concerning the freezing of pure water in contact with ice, the phase transition temperature is not constant and depends on the concentration of the hydrophilic liquid, which is described by a diffusion equation. We use a linear approximation to relate the equilibrium temperature and concentration at the phase boundary. The temperature in the ice and in the liquid is described by the heat conduction equations. Heat and mass transfer occur at the phase boundary when water from the hydrophilic liquid freezes onto the ice surface, increasing its concentration, or conversely, ice melting at the boundary occurs, decreasing the concentration of the hydrophilic liquid. This is determined by the input parameters of the problem. The paper analyzes such solutions for the case of ice – hydrophilic liquids interactions, for example, seawater and an ethanol solution that take place in problems of the interaction of ice shelves with the ocean and in the thermal drilling of boreholes in glaciers. The study also investigates peculiarities of choice of the thermal diffusivity of the liquid in applied problems.

Keywords: self-similar solution, effective thermal diffusivity, hydrophilic liquid.

References

1. Nagornov O.V., Bukharova T.I. Avtomodel'noe reshenie zadachi o rastvorenii l'da gidrofil'noj zhidkost'yu [Self-similar solution of the problem on dissolution of ice by hydrophilic liquid]. Vestnik NIYaU MIFI, 2025. Vol. 14. No. 4. Pp. 352–356 (in Russian).
2. Nagornov O.V., Sergienko O.V. Temperature field of an ice shelf in the vicinity of a hot water-drilled well. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 1998. Vol. 71. No. 1. Pp. 154–160.
3. Nagornov O.V., Zagorodnov V.S., Kelley J.J. Interaction of hydrophilic liquid with ice. Proceedings of Fourth International Symposium on Thermal Engineering and Science for Cold Regions, September 28 – October 1, 1993.
4. Talalay P.G., Fan X. Alternative clean approaches to accessing subglacial Lake Vostok. The Arctic and Antarctic Problems, 2024. Vol. 70(4). Pp. 499–513.

5. *Kudryashov N.A.* Metody nelineinoi matematicheskoi fiziki (Methods of non-linear mathematical physics). Dolgoprudnyj, PH Intellect Publ., 2010. 368 p.
6. *Osborn T.R.* Estimates of the local rate of vertical diffusion from dissipation measurements // *Journal of Physical Oceanography*, 1980. Vol. 10(1). Pp. 83–89.
7. *Stillinger D.C., Helland K.N., Van Atta C. W.* Experiments on the transition of homogeneous turbulence to internal waves in a stratified fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 1983. Vol. 131. Pp. 91–122.
8. *Gregg M.C., D'Asaro E.A., Riley J. J., Kunze E.* Mixing efficiency in the ocean. *Annual Review of Marine Science*, 2018. Vol. 10. Pp. 443–473.

УДК 530.182

Новые результаты по силам взаимодействия кинков теоретико-полевой модели с полиномиальным потенциалом

© 2025 г. В. А. Гани^{1,2}, О. В. Нагорнов¹¹ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, 123182, Россия

Получены асимптотические оценки для сил взаимодействия топологических солитонов (кинков) уравнения Клейна – Гордона с полиномиальной нелинейностью, которое является уравнением движения для действительного скалярного поля в лоренц-инвариантной $(1 + 1)$ -мерной модели ϕ^{12} , важной для многих физических приложений. Рассматриваемая модель не является интегрируемой, поэтому в ней отсутствуют точные двухсолитонные решения. Тем не менее, для приложений важна динамика системы, состоящей из кинка и антикинка, расположенных на некотором расстоянии друг от друга. Такая конфигурация не является решением уравнения движения, однако может быть сконструирована из отдельных солитонных решений. Неинтегрируемость модели приводит к наличию силы взаимодействия между кинками. В данной работе показано, что во всех случаях имеет место притяжение, а сила убывает экспоненциально с расстоянием. Для получения выражений для силы притяжения использовались асимптотики соответствующих кинковых решений, которые в рассматриваемой модели имеют экспоненциальный характер, что, в свою очередь, является следствием вида потенциала теоретико-полевой модели, определяющего самодвижение скалярного поля.

Ключевые слова: кинк, солитон, доменная стенка, кинк-антикинк взаимодействие.

Введение

Кинковые решения в теоретико-полевых моделях с одним действительным скалярным полем в $(1 + 1)$ -мерном пространстве-времени имеют большое значение для современной физики. Кинки и кинкоподобные полевые конфигурации возникают во многих прикладных задачах. Типичным примером является плоский участок космологической доменной стенки, разделяющей области пространства с различным вакуумом: в направлении, перпендикулярном стенке, такая конфигурация представляет собой кинк [1, 2]. В теории конденсированного состояния вещества, например, деформация стенки, разделяющей два магнитных домена, локально моделируется кинком. Такая деформация может двигаться вдоль стенки подобно кинку некоторой теоретико-полевой модели [3]. Еще одним наглядным примером кинковой конфигурации является деформация графеновой наноленты [4]. Кинковые решения возникают также в моделях, описывающих последовательности фазовых переходов, подробности и литературный обзор можно найти в [5], см. также главу 12 в [6]. В частности, модель ϕ^{12} , которой посвящена эта статья, использовалась для описания фазовых переходов в сильно пьезоэлектрических перовскитных материалах [7, 8].

Наиболее известными моделями с кинковыми решениями, по-видимому, являются интегрируемая модель синус-Гордон [9] и неинтегрируемая модель ϕ^4 [6]. Интегрируемость модели синус-Гордон позволяет строить точные многосолитонные решения. В модели ϕ^4 это невозможно. Тем не менее, модель

✉ О.В. Нагорнов: ovnagornov@mephi.ru
В.А. Гани: vagani@mephi.ru

Поступила в редакцию: 17.09.2025

После доработки: 30.10.2025

Принята к публикации: 05.11.2025

EDN KDPKBO

ϕ^4 имеет множество физических приложений и богатую историю изучения динамических свойств ее кинковых решений, начиная с 70-х годов прошлого века [10], см. также обзор [11].

В последнее время наблюдается большой интерес к поиску кинковых решений в различных моделях, а также к изучению динамики кинк-(анти)кинк и мультикинк взаимодействий. В частности, были изучены семейства логарифмических потенциалов [12, 13, 14]; получены точные формулы для кинковых решений в полиномиальных моделях [15]; исследованы кинк-(анти)кинк столкновения в различных моделях с полиномиальными потенциалами степени шесть и выше [16, 17, 18]; рассмотрены некоторые экзотические модели [19, 20, 21], а также рассеяние колеблющихся кинков [22].

Примечательно, что, помимо кинков с экспоненциальной асимптотикой (которыми, в частности, являются кинки упомянутых выше моделей синус-Гордон и ϕ^4) изучаются кинки с другими асимптотиками. В частности, со степенными асимптотиками [15], а также с суперэкспоненциальной [14], супер-суперэкспоненциальной [12] асимптотиками и с асимптотикой типа степенной башни [13].

В этой статье рассматриваются кинки ϕ^{12} , имеющие экспоненциальную асимптотику. На основе явных формул для кинковых решений получены асимптотические оценки сил кинк-антикинк и антикинк-кинк взаимодействий при больших расстояниях между солитонами.

Теоретико-полевая модель ϕ^{12}

Рассмотрим теоретико-полевою модель с одним действительным скалярным полем $\phi(x, t)$ в $(1+1)$ -мерном пространстве-времени, динамика которого задается лагранжианом (т.е. плотностью функции Лагранжа)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 - V(\phi), \quad (1)$$

где потенциал $V(\phi)$, определяющий самодействие поля, представляет собой полином двенадцатой степени специального вида:

$$V(\phi) = \lambda^2 (\phi^2 - a^2)^2 (\phi^2 - b^2)^2 (\phi^2 - c^2)^2. \quad (2)$$

На вещественные параметры, входящие в потенциал, налагаются условия $0 < a < b < c$, $\lambda > 0$. Конкретные значения в том или ином случае обуславливаются решаемой физической задачей. Потенциал (2) имеет шесть вырожденных минимумов при $\phi = \pm a, \pm b, \pm c$, которые разбивают отрезок $-c \leq \phi \leq c$ на пять топологических секторов: $(-c, -b)$, $(-b, -a)$, $(-a, a)$, (a, b) и (b, c) . Соответственно, в модели имеется десять кинковых решений (пять кинков (K) и пять антикинков ($\bar{K}$)). Заметим, что в силу симметрии потенциала асимметричные сектора $(-c, -b)$ и $(-b, -a)$, зеркально симметричны секторам (b, c) и (a, b) соответственно.

Уравнение движения, следующее из лагранжиана (1), представляет собой нелинейное уравнение в частных производных

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{dV}{d\phi} = 0, \quad (3)$$

которое часто называют нелинейным уравнением Клейна – Гордона, а соответствующий функционал энергии имеет вид

$$E[\phi] = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + V(\phi) \right] dx. \quad (4)$$

В силу лоренц-инвариантности рассматриваемой теории, можно ограничиться поиском статических солитонных решений. В этом случае $\varphi = \varphi(x)$, и с учетом граничных условий порядок уравнения (3) можно понизить и получить обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка

$$\frac{d\varphi}{dx} = \pm \sqrt{2V(\varphi)}, \quad (5)$$

см., например, раздел 5.1 в книге [1].

Далее мы ограничимся следующим конкретным выбором параметров:

$$a = \frac{\sqrt{5}-1}{4}, \quad b = \frac{\sqrt{5}+1}{4}, \quad c = 1, \quad \lambda = \frac{8\sqrt{2}}{5}. \quad (6)$$

Тогда кинковые решения во всех топологических секторах могут быть записаны в виде единой формулы (подробнее см., например, [23]):

$$\varphi_{K(\bar{K})}(x) = \cos\left(\frac{1}{5} \arccos(\tanh x) + \frac{\pi s}{5}\right). \quad (7)$$

В этой формуле s пробегает любые десять последовательных целочисленных значений, например, $s = 0, 1, \dots, 9$. При этом получаются все десять кинков и антикинков модели с потенциалом (2).

Массу кинка (антикинка) в любом секторе можно найти, например, подставив (7) в (4), что для набора параметров (6) дает следующие значения:

$$M_K^{(-a,a)} = \frac{25\sqrt{5}+109}{2100} \approx 0.0785, \quad (8)$$

$$M_K^{(a,b)} = \frac{109}{2100} \approx 0.0519, \quad (9)$$

$$M_K^{(b,c)} = \frac{93-25\sqrt{5}}{4200} \approx 0.0088. \quad (10)$$

Видно, что $M_K^{(b,c)} < M_K^{(a,b)} < M_K^{(-a,a)}$, т.е. самым тяжелым является кинк в симметричном секторе $(-a, a)$.

Асимптотические оценки сил взаимодействия между кинком и антикинком в различных топологических секторах

Так как рассматриваемая теоретико-полевая модель не является интегрируемой, в ней не имеется точных многосолитонных решений [1]. Тем не менее, кинк и антикинк, находящиеся на большом расстоянии друг от друга, удовлетворяют уравнению движения с экспоненциальной (по расстоянию) точностью. В то же время нелинейность модели приводит к тому, что между кинком и антикинком возникает сила притяжения.

Для оценки сил притяжения между кинком и антикинком используем асимптотический метод, описанный, например, в разделе 5.2 книги [1]. Идея метода состоит в следующем: импульс конфигурации поля $\varphi(x, t)$ на полубесконечном промежутке $(-\infty, \beta]$ есть соответствующая компонента тензора энергии-импульса:

$$P = - \int_{-\infty}^{\beta} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx. \quad (11)$$

Тогда сила, действующая на полевую структуру, находящуюся на этом промежутке, определяется как производная от импульса по времени:

$$F = \frac{\partial P}{\partial t} = - \int_{-\infty}^{\beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \varphi}{\partial t} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial t} \right) dx. \quad (12)$$

После несложных преобразований с использованием уравнения движения (3) получаем

$$F = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + V(\varphi) \right]_{-\infty}^{\beta}. \quad (13)$$

Например, для оценки силы между статическим кинком и антикинком в топологическом секторе $(-a, a)$ нужно использовать полевую конфигурацию в виде кинка $\varphi_K^{(-a,a)}(x)$ и антикинка $\varphi_{\bar{K}}^{(-a,a)}(x)$, расположенных соответственно в точках $x = -X$ и $x = X$:

$$\varphi_{K\bar{K}}^{(-a,a)}(x) = \varphi_K^{(-a,a)}(x + X) + \varphi_{\bar{K}}^{(-a,a)}(x - X) - a, \quad (14)$$

где предполагается, что $X \gg 1$ и $-X \ll \beta \ll X$, следовательно, $\varphi_{\bar{K}}^{(-a,a)}(x - X) - a$ экспоненциально мало при $x \leq \beta$ и стремится к нулю при $X \rightarrow +\infty$. Далее, подставляя (14) в (13) и линеаризуя (раскладывая до первого порядка) по $\varphi_{\bar{K}}^{(-a,a)}(x - X) - a$, получаем:

$$\begin{aligned} F_{K\bar{K}}^{(-a,a)} &= \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi_{K\bar{K}}^{(-a,a)}(x)}{\partial x} \right)^2 + V(\varphi_{K\bar{K}}^{(-a,a)}(x)) \right]_{-\infty}^{\beta} \cong \\ &\cong \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi_K^{(-a,a)}(x + X)}{\partial x} \right)^2 - \frac{\partial \varphi_K^{(-a,a)}(x + X)}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi_{\bar{K}}^{(-a,a)}(x - X)}{\partial x} + V(\varphi_K^{(-a,a)}(x + X)) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{dV(\varphi_K^{(-a,a)}(x + X))}{d\varphi} \cdot (\varphi_{\bar{K}}^{(-a,a)}(x - X) - a) \right]_{-\infty}^{\beta}. \end{aligned} \quad (15)$$

Эта формула дает оценку силы, действующей на кинк, расположенный в точке $x = -X$ со стороны антикинка, расположенного в точке $x = X$.

С учетом того, что кинк и антикинк удовлетворяют уравнениям (3) и (5), окончательно получаем:

$$F_{K\bar{K}}^{(-a,a)} \cong \left[-\frac{\partial \phi_K^{(-a,a)}(x+X)}{\partial x} \frac{\partial \phi_{\bar{K}}^{(-a,a)}(x-X)}{\partial x} + \left(\phi_{\bar{K}}^{(-a,a)}(x-X) - a \right) \frac{\partial^2 \phi_K^{(-a,a)}(x+X)}{\partial x^2} \right] \Big|_{-\infty}^{\beta}. \quad (16)$$

Точка β находится далеко и от кинка, и от антикинка, поэтому можно применять асимптотические выражения

$$\phi_K^{(-a,a)}(x+X) \approx a - \frac{1}{5} \sqrt{\frac{\sqrt{5}+5}{2}} e^{-(x+X)} \quad (17)$$

и

$$\phi_{\bar{K}}^{(-a,a)}(x-X) \approx a - \frac{1}{5} \sqrt{\frac{\sqrt{5}+5}{2}} e^{x-X}, \quad (18)$$

так что в итоге формула (16) дает

$$F_{K\bar{K}}^{(-a,a)} \cong \frac{5+\sqrt{5}}{25} e^{-R}, \quad (19)$$

где введено обозначение $R = 2X$, т.е. R есть расстояние между кинком и антикинком. Видно, что сила притяжения между кинком и антикинком экспоненциально убывает с расстоянием. Отметим также, что эта сила не зависит от использованного в расчете вспомогательного параметра β .

Аналогичные расчеты выполнены также для кинк-антикинк ($K\bar{K}$) и антикинк-кинк ($\bar{K}K$) взаимодействий в других топологических секторах:

$$F_{\bar{K}K}^{(-a,a)} = F_{\bar{K}K}^{(a,b)} \cong \frac{5+\sqrt{5}}{25} e^{-R}, \quad (20)$$

$$F_{K\bar{K}}^{(a,b)} = F_{\bar{K}K}^{(b,c)} \cong \frac{5-\sqrt{5}}{25} e^{-R}, \quad (21)$$

$$F_{K\bar{K}}^{(b,c)} \cong \frac{32}{625} e^{-2R}. \quad (22)$$

Как видно, кинк-антикинк и антикинк-кинк притяжение одинаково для симметричных кинков в топологическом секторе $(-a, a)$. В то же время кинк-антикинк и антикинк-кинк силы различны для асимметричных кинков в секторах (a, b) и (b, c) .

Можно также заметить, что полученная выше оценка для силы антикинк-кинк в секторе (a, b) совпадает с кинк-антикинк силой в секторе $(-a, a)$, а антикинк-кинк сила в секторе (b, c) совпадает с кинк-антикинк силой в секторе (a, b) . Это является очевидным следствием использованного приближения, в рамках которого сила полностью определяется асимптотическим поведением кинкового решения, которое, в свою очередь, полностью определяется вакуумом, к которому приближается поле.

Заключение

В этой статье получены асимптотические оценки сил взаимодействия топологических солитонов (кинков) (1+1)-мерной модели ϕ^{12} . Рассмотренная теоретико-полевая модель примечательна тем, что имеет пять топологических секторов – один симметричный и четыре асимметричных.

Найдены массы и асимптотики всех кинков, а также получены асимптотические оценки силы взаимодействия кинка и антикинка, находящихся на большом расстоянии друг от друга. Как и можно было ожидать, во всех случаях сила экспоненциально убывает с расстоянием. При этом скорость убывания различается в зависимости от асимптотического поведения поля на больших расстояниях от центра кинка.

Представленное в данной статье исследование может иметь интересное продолжение. В частности, в столкновениях кинков изучаемой модели ϕ^{12} наблюдались резонансные явления – так называемые *окна разлета* [24]. Их появление означает, что происходит резонансный обмен энергией между кинетической энергией кинков и неким «аккумулятором» энергии. Во многих известных случаях роль такого «аккумулятора» играла колебательная мода кинка. Однако было показано, что все кинки в рассматриваемой модели не имеют колебательных мод [24]. Открытым является вопрос о причине возникновения окон разлета, а более конкретно – о поиске «аккумулятора», отбирающего часть кинетической энергии кинков при первом их соударении и возвращающего при втором (именно таков механизм резонансного разлета солитонов, например, в модели ϕ^4 , см. обзор [11]).

Финансирование

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект FSWU-2023-0031.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

Все авторы внесли равный вклад в исследование и в работу над рукописью.

Список литературы

1. Manton N., Sutcliffe P. Topological Solitons. Cambridge University Press, Cambridge U.K. 2004. 493 p. DOI: 10.1017/CBO9780511617034
2. Vachaspati T. Kinks and Domain Walls: An Introduction to Classical and Quantum Solitons. Cambridge University Press, Cambridge U.K., 2006. DOI: 10.1017/CBO9780511535192.
3. Buijsters F.J., Fasolino A., Katsnelson M.I. Motion of Domain Walls and the Dynamics of Kinks in the Magnetic Peierls Potential // *Physical Review Letters*, 2014. V.113. Art. id. 217202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.217202.
4. Yamaletdinov R.D., Slipko V.A., Pershin Y.V. Kinks and antikinks of buckled graphene: A testing ground for ϕ^4 field model // *Physical Review B*, 2017. V. 96. Art. id. 094306. DOI: 10.1103/PhysRevB.96.094306.
5. Khare A., Christov I. C., Saxena A. Successive phase transitions and kink solutions in ϕ^8 , ϕ^{10} , and ϕ^{12} field theories // *Physical Review E*, 2014. V.90. Art. id. 023208. DOI: 10.1103/PhysRevE.90.023208.
6. Kevrekidis P.G., Cuevas-Maraver J., eds. A dynamical perspective on the ϕ^4 model: Past, present and future. Part of the Nonlinear Systems and Complexity book series, V. 26. Springer, 2019. 311 p. DOI: 10.1007/978-3-030-11839-6.
7. Vanderbilt D., Cohen M.H. Monoclinic and triclinic phases in higher-order Devonshire theory // *Physical Review B*, 2001. V. 63. Art. id. 094108. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.094108.
8. Sergienko I. A., Gufan Y. M., Urazhdin S. Phenomenological theory of phase transitions in highly piezoelectric perovskites // *Physical Review B*, 2002. V. 65. Art. id. 144104. DOI: 10.1103/PhysRevB.65.144104.
9. Cuevas-Maraver J., Kevrekidis P. G., Williams F., eds. The sine-Gordon Model and its Applications: from Pendula and Josephson Junctions to Gravity and High-Energy Physics. Part of the Nonlinear Systems and Complexity book series, V. 10. Springer Cham, 2014. 263 p. DOI: 10.1007/978-3-319-06722-3.
10. Кудрявцев А.Е. О солитоноподобных решениях для скалярного поля Хиггса // *Письма в ЖЭТФ*, 1975. Т.22. Вып. 3. С. 178–181.
11. Белова Т.И., Кудрявцев А.Е. Солитоны их взаимодействия в классической теории поля // *Успехи физических наук*, 1997. Т. 167. С. 377–406. DOI: 10.3367/UFNr.0167.199704b.0377.

12. *Khare A., Saxena A.* Logarithmic potential with super-super-exponential kink profiles and tails // *Physica Scripta*, 2020. V. 95. Art.id. 075205. DOI: 10.1088/1402-4896/ab8eeb.
13. *Khare A., Saxena A.* Wide class of logarithmic potentials with power-tower kink tails // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2020. V. 53. Art.id. 315201. DOI: 10.1088/1751-8121/ab84ac.
14. *Kumar P., Khare A., Saxena A.* A minimal nonlinearity logarithmic potential: Kinks with super-exponential profiles // *International Journal of Modern Physics B*, 2021. V. 35(08). Art. id. 2150114. DOI: 10.1142/S0217979221501149.
15. *Blinov P.A., et al.* Kinks in higher-order polynomial models // *Chaos, Solitons and Fractals*, 2022. V. 165(07). 112805. DOI: 10.1016/j.chaos.2022.112805.
16. *Dorey P., Mersh K., Romanczukiewicz T., Shnir Y.* Kink-antikink collisions in the ϕ^6 model // *Physical Review Letters*, 2011. V. 107. 091602. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.091602.
17. *Adam C., et al.* Multikink scattering in the ϕ^6 model revisited // *Physical Review D*, 2022. V. 106. 125003. DOI: 10.1103/PhysRevD.106.125003.
18. *Christov I. C., et al.* Kink-antikink collisions and multi-bounce resonance windows in higher-order field theories // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2021. V. 97. 105748. DOI: 10.1016/j.cnsns.2021.10574897:105748.
19. *Demirkaya A., et al.*, Kink dynamics in a parametric ϕ^6 system: a model with controllably many internal modes // *J. High Energy Phys.*, 2017 (12), 071 (2017). DOI: 110.1007/JHEP12(2017)071.
20. *Mohammadi M., Dehghani R.* Kink-antikink collisions in the periodic ϕ^4 model // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2021. V. 94. art. id. 105575. DOI: 10.1016/j.cnsns.2020.105575.
21. *Mohammadi M., Momeni E.* Scattering of kinks in the $B\phi^4$ model // *Chaos, Solitons and Fractals*, 2022. V. 165(P2). Art. id. 112834. DOI: 10.1016/j.chaos.2022.112834.
22. *Alonso-Izquierdo A., Nieto L.M., Queiroga-Nunes J.* Scattering between wobbling kinks // *Physical Review D*, 2021. V.103. Art. id. 045003. DOI: 10.1103/PhysRevD.103.045003.
23. *Bazeia D., González León M.A., Losano L., Guilarte J. M.* Deformed defects for scalar fields with polynomial interactions // *Physical Review D*, 2006. V. 73. Art. id. 105008. DOI: 10.1103/PhysRevD.73.105008.
24. *Marjaneh A.M., et al.* Kink Dynamics in a High-Order Field Model // *Journal of Nonlinear Science*, 2025. V. 35, art. number 99. DOI: 10.1007/s00332-025-10196-x.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 6, pp. 492–499

New results on the interaction forces of kinks in a field-theoretical model with a polynomial potential

V. A. Gani^{1,2,✉}, O. V. Nagornov^{1,✉}

¹ National Research Nuclear University MPhI, Moscow, 115409, Russia

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

✉ vagani@mephi.ru

✉ ovnagornov@mephi.ru

Received September 17, 2025; revised October 30, 2025; accepted November 05, 2025

We obtain asymptotic estimates for the interaction forces between topological solitons(kinks) of the Klein – Gordon equation with a polynomial nonlinearity. This equation is the equation of motion for a real scalar field in the Lorentz-invariant $(1 + 1)$ -dimensional ϕ^{12} model, which is important for many physical applications. The model under consideration is not integrable, so it lacks exact two-soliton solutions. Nevertheless, the dynamics of a system consisting of a kink and an antikink located at some distance from each other is important for applications. Such a configuration is not a solution to the equation of motion, but can be constructed from individual soliton solutions. The nonintegrability of the model leads to the presence of an interaction force between the kinks. In this paper, we show that

attraction occurs in all cases, and the force decreases exponentially with distance. To obtain expressions for the attractive force, we used the asymptotics of the corresponding kink solutions, which in the model under consideration have an exponential nature, which, in turn, is a consequence of the type of potential of the field-theoretic model that determines the self-interaction of the scalar field.

Keywords: kink, soliton, domain wall, kink-antikink interaction.

References

1. Manton N., Sutcliffe P. Topological Solitons. Cambridge University Press, Cambridge U.K. 2004. 493. P. DOI: 10.1017/CBO9780511617034.
2. Vachaspati T. Kinks and Domain Walls: An Introduction to Classical and Quantum Solitons. Cambridge University Press, Cambridge U.K., 2006. DOI:10.1017/CBO9780511535192.
3. Buijnsters F.J., Fasolino A., Katsnelson M.I. Motion of Domain Walls and the Dynamics of Kinks in the Magnetic Peierls Potential. *Physical Review Letters*, 2014. Vol. 113. Art. id. 217202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.217202.
4. Yamaletdinov R.D., Slipko V.A., Pershin Y.V. Kinks and antikinks of buckled graphene: A testing ground for ϕ^4 field model. *Physical Review B*, 2017. Vol. 96. Art. id. 094306. DOI: 10.1103/PhysRevB.96.094306.
5. Khare A., Christov I. C., Saxena A. Successive phase transitions and kink solutions in ϕ^8 , ϕ^{10} , and ϕ^{12} field theories. *Physical Review E*, 2014. Vol. 90. Art. id. 023208. DOI: 10.1103/PhysRevE.90.023208.
6. Kevrekidis P.G., Cuevas-Maraver J., eds. A dynamical perspective on the ϕ^4 model: Past, present and future. Part of the Nonlinear Systems and Complexity book series, Vol. 26. Springer, 2019. 311. Pp. DOI: 10.1007/978-3-030-11839-6.
7. Vanderbilt D., Cohen M.H. Monoclinic and triclinic phases in higher-order Devonshire theory. *Physical Review B*, 2001. Vol. 63. Art. id. 094108. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.094108.
8. Sergienko I.A., Gufan Y.M., Urazhdin S. Phenomenological theory of phase transitions in highly piezoelectric perovskites. *Physical Review B*, 2002. Vol. 65. Art.id. 144104. DOI: 10.1103/PhysRevB.65.144104.
9. Cuevas-Maraver J., Kevrekidis P. G., Williams F., eds. The sine-Gordon Model and its Applications: from Pendula and Josephson Junctions to Gravity and High-Energy Physics. Part of the Nonlinear Systems and Complexity book series, Vol. 10. Springer Cham, 2014. 263 p. DOI: 10.1007/978-3-319-06722-3.
10. Kudryavtsev A.E. Solitonlike solutions for a Higgs scalar field. *JETP Letters*, 1975. Vol. 22. Iss. 3. Pp. 82.
11. Belova T.I., Kudryavcev A.E. Solitony ih vzaimodejstviya v klassicheskoy teorii polya [Solitons and their interactions in classical field theory]. *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 1997. Vol. 167. Pp. 377–406. DOI: 10.3367/UFNr.0167.199704b.0377.
12. Khare A., Saxena A. Logarithmic potential with super-super-exponential kink profiles and tails. *Physica Scripta*, 2020. Vol. 95. Art.id. 075205. DOI: 10.1088/1402-4896/ab8eeb.
13. Khare A., Saxena A. Wide class of logarithmic potentials with power-tower kink tails. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2020. Vol. 53. Art. id. 315201. DOI: 10.1088/1751-8121/ab84ac.
14. Kumar P., Khare A., Saxena A. A minimal nonlinearity logarithmic potential: Kinks with super-exponential profiles. *International Journal of Modern Physics B*, 2021. Vol. 35(08). Art. id. 2150114. DOI: 10.1142/S0217979221501149.
15. Blinov P.A., et al. Kinks in higher-order polynomial models. *Chaos, Solitons and Fractals*, 2022. Vol.165(07), 112805. DOI: 10.1016/j.chaos.2022.112805.
16. Dorey P., Merish K., Romanczukiewicz T., Shnir Y. Kink-antikink collisions in the ϕ^6 model. *Physical Review Letters*, 2011. Vol. 107. 091602. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.091602.
17. Adam C., et al. Multikink scattering in the ϕ^6 model revisited. *Physical Review D*, 2022. Vol. 106. 125003. DOI: 10.1103/PhysRevD.106.125003.
18. Christov I.C., et al. Kink-antikink collisions and multi-bounce resonance windows in higher-order field theories. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2021. Vol. 97. 105748. DOI: 10.1016/j.cnsns.2021.10574897:105748.
19. Demirkaya A., et al. Kink dynamics in a parametric ϕ^6 system: a model with controllably many internal modes // *J. High Energy Phys.*, 2017 (12), 071 (2017). DOI: 10.1007/JHEP12(2017)071.
20. Mohammadi M., Dehghani R., Kink-antikink collisions in the periodic ϕ^4 model. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2021. Vol. 94. Art. id. 105575. DOI: 10.1016/j.cnsns.2020.105575.
21. Mohammadi M., Momeni E. Scattering of kinks in the ϕ^4 model. *Chaos, Solitons and Fractals*, 2022. Vol. 165(P2). Art. id. 112834. DOI: 10.1016/j.chaos.2022.112834.
22. Alonso-Izquierdo A., Nieto L.M., Queiroga-Nunes J. Scattering between wobbling kinks. *Physical Review D*, 2021. Vol. 103. Art. id. 045003. DOI: 10.1103/PhysRevD.103.045003.
23. Bazeia D., González León M.A., Losano L., Guilarte J. M. Deformed defects for scalar fields with polynomial interactions. *Physical Review D*, 2006. Vol. 73, Art. id. 105008. DOI: 10.1103/PhysRevD.73.105008.
24. Marjaneh A.M., et al. Kink Dynamics in a High-Order Field Model. *Journal of Nonlinear Science*, 2025. Vol. 35. Art. number 99. DOI: 10.1007/s00332-025-10196-x.

УДК 517.9

Точная линеаризация сильно нелинейных уравнений типа Монжа – Ампера© 2025 г. А. Д. Полянин¹, А. В. Аксенов²¹ Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, 119526, Россия² Механико-математический факультет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, 119991, Россия

Описаны новые классы сильно нелинейных уравнений типа Монжа – Ампера достаточно общего вида, зависящих от одной до шести произвольных функций одного или двух аргументов, которые допускают точную линеаризацию в замкнутой форме. Для линеаризации использованы контактные преобразования Эйлера и Лежандра и специальные точечные преобразования (включая неклассическое преобразование годографа) их комбинации. Особое внимание уделяется уравнениям Монжа – Ампера, встречающимся в метеорологии и геофизике. Рассматриваются также преобразования эквивалентности отдельных классов уравнений Монжа – Ампера. Для некоторых нелинейных уравнений получены точные решения, зависящие от произвольных функций. Были также рассмотрены два нестационарных сильно нелинейных уравнений типа Монжа – Ампера с тремя независимыми переменными, которые встречаются в электронной магнитной гидродинамике и геофизической гидродинамике. Для них в переменных типа бегущей волны были построены двумерные редукции к более простым уравнениям, допускающим точную линеаризацию.

Ключевые слова: уравнения Монжа – Ампера, сильно нелинейные уравнения с частными производными, точная линеаризация в замкнутой форме, преобразования Эйлера и Лежандра, преобразование годографа, контактные и точечные преобразования.

Введение

Сильно нелинейные уравнения типа Монжа – Ампера встречаются в дифференциальной геометрии [1–4], газовой динамике [5, 6], теории упругости [7, 8], магнитной гидродинамике [9], механике двухфазных сред [10], метеорологии и геофизике [11, 12], задачах оптимизации [3] и некоторых других приложениях [4, 13]. Качественные особенности, симметрии, преобразования, редукции, промежуточные интегралы и точные решения уравнений Монжа – Ампера с двумя независимыми пространственными переменными, содержащих квадратичную нелинейность относительно комбинации старших производных вида $u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2$, рассматривались во многих работах (см., например, [1, 2, 6, 13–19]).

1. Уравнения газовой динамики для плоских одномерных течений с переменной энтропией сводятся к неоднородному уравнению Монжа – Ампера [5, 6]:

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 = F(x, y), \quad (1)$$

где $u = u(x, y)$ – искомая функция; $F(x, y)$ – заданная функция.

✉ А. Д. Полянин: polyanin@ipmnet.ru

Поступила в редакцию: 23.09.2025

После доработки: 19.10.2025

Принята к публикации: 21.10.2025

EDN KREEFH

Уравнение (1) с нулевой правой частью называется однородным уравнением Монжа – Ампера.

Общее решение однородного уравнения Монжа – Ампера (1) при $F(x, y) = 0$ можно записать в параметрической форме [14] (см. также [13, 19]):

$$\begin{aligned} u &= \beta x + \varphi(\beta)y + \psi(\beta), \\ x + \varphi'(\beta)y + \psi'(\beta) &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где β – свободный параметр, а $\varphi = \varphi(\beta)$ и $\psi = \psi(\beta)$ – произвольные функции.

Отметим, что однородное уравнение Монжа – Ампера (1) при $F(x, y) = 0$ имеет простое точное решение

$$u = \varphi(k_1x + k_2y) + k_3x + k_4y,$$

где $\varphi(z)$ – произвольная функция; k_1, k_2, k_3, k_4 – произвольные постоянные.

Общее решение неоднородного уравнения Монжа – Ампера (1) при $F(x, y) = -a^2$, где $a \neq 0$ – произвольная постоянная, также можно представить в параметрическом виде [14] (см. также [13, 19]):

$$x = \frac{\beta - \lambda}{2a}, \quad y = \frac{\psi'(\lambda) - \varphi'(\beta)}{2a}, \quad u = \frac{(\beta + \lambda)[\psi'(\lambda) - \varphi'(\beta)] + 2\varphi(\beta) - 2\psi(\lambda)}{4a}, \quad (3)$$

где β и λ – свободные параметры, а $\varphi = \varphi(\beta)$ и $\psi = \psi(\lambda)$ – произвольные функции. Отметим, что уравнение (1) при $F(x, y) = -a^2$ является гамильтоновым [20].

Отметим, что неоднородное уравнение Монжа – Ампера (1) при $F(x, y) = -a^2$ имеет два точных решения, которые можно представить в явном виде

$$u = \varphi(k_1x + k_2y) + C_1x^2 + \left(2C_1 \frac{k_2}{k_1} \pm a\right)xy + \left(C_1 \frac{k_2^2}{k_1^2} \pm a \frac{k_2}{k_1}\right)y^2 + C_2x + C_3y,$$

где $\varphi(z)$ – произвольная функция; k_1, k_2, C_1, C_2, C_3 – произвольные постоянные ($k_1 \neq 0$); перед a берутся либо верхние, либо нижние знаки.

Общие решения (2) и (3) уравнения Монжа – Ампера (1) в указанных специальных случаях можно получить путем использования контактного преобразования Эйлера, которое рассматривается далее в разд. 1.

Симметрии и инвариантные решения уравнения (1) рассматривались в [16, 21] (см. также [13, 18]). В [13, 19] получен ряд неинвариантных решений с обобщенным и функциональным разделением переменных уравнения (1), правая часть которого зависит от одной или двух произвольных функций одного аргумента. В [22, 23] рассматривались точные решения уравнения (1) с квадратичной и более сложной полиномиальной правой частью.

Далее описаны два полезных утверждения о преобразованиях эквивалентности неоднородного уравнения Монжа – Ампера (1).

Утверждение 1. Преобразование [16, 18]:

$$\begin{aligned} \bar{x} &= a_1x + b_1y + c_1, \quad \bar{y} = a_2x + b_2y + c_2, \quad \bar{u} = ku + a_3x + b_3y + c_3, \\ \bar{F} &= k^2(a_1b_2 - a_2b_1)^{-2}F, \quad a_1b_2 - a_2b_1 \neq 0, \end{aligned}$$

где $a_1, a_2, a_3, b_1, b_2, b_3, c_1, c_2, c_3, k$ – произвольные постоянные, преобразует неоднородное уравнение Монжа – Ампера (1) в уравнение аналогичного вида.

Утверждение 2. Преобразование [16, 18]:

$$\bar{x} = x(1 + \alpha x + \beta y)^{-1}, \quad \bar{y} = y(1 + \alpha x + \beta y)^{-1}, \quad \bar{u} = u(1 + \alpha x + \beta y)^{-1}, \quad \bar{F} = F(1 + \alpha x + \beta y)^4,$$

где α, β – произвольные постоянные, преобразует неоднородное уравнение Монжа – Ампера (1) в уравнение аналогичного вида.

В [16, 24] (см. также далее разд. 1 и 3) показано, что уравнение (1) может быть линеаризовано в следующих двух случаях:

$$1) \quad F(x, y) = f_1(x); \quad 2) \quad F(x, y) = x^{-4} f_2(y/x), \quad (4)$$

где $f_1(x)$ и $f_2(z)$ – произвольные функции.

Из утверждения 1 и выражений (4) следует, то уравнение (1) линеаризуется также для более общих функций

$$1) \quad F(x, y) = f_1(a_1 x + b_1 y + c_1); \quad (5)$$

$$2) \quad F(x, y) = \frac{1}{(a_1 x + b_1 y + c_1)^4} f_2\left(\frac{a_2 x + b_2 y + c_2}{a_1 x + b_1 y + c_1}\right), \quad (6)$$

где $f_1(z_1)$ и $f_2(z_2)$ – произвольные функции, $a_1, a_2, b_1, b_2, c_1, c_2$ – произвольные постоянные; при $a_1 b_2 - a_2 b_1 = 0$ функция (6) сводится к (5).

Отметим, что квадратичное относительно старших производных уравнение (1) является сильно нелинейным и имеет свойства, необычные для квазилинейных уравнений, которые линейны относительно старших производных. В частности, качественные особенности этого уравнения зависят от знака функции $F = F(x, y)$, поскольку при $F < 0$ уравнение (1) является уравнением гиперболического типа, а при $F > 0$ – уравнением эллиптического типа [2, 13]. Кроме того, при $F > 0$ задача Дирихле для этого уравнения с нулевым условием на границе имеет не единственное решение.

2. В [13] было показано, что уравнение Монжа – Ампера

$$u_{xx} u_{yy} - u_{xy}^2 = f(u),$$

в правой части которого стоит произвольная функция $f(u)$, допускает точное решение с функциональным разделением переменных вида

$$u = U(z), \quad z = C_1 x^2 + C_2 xy + C_3 y^2 + C_4 x + C_5 y,$$

где $C_1, \dots, C_5$ – произвольные постоянные, а функция $U(z)$ описывается обыкновенным дифференциальным уравнением

$$2(Az + B)U_z U_{zz} + AU_z^2 = f(U); \\ A = 4C_1 C_3 - C_2^2, \quad B = C_1 C_5^2 + C_3 C_4^2 - C_2 C_4 C_5.$$

При $A = 0$ общее решение этого уравнения можно выразить в квадратурах в неявном виде.

3. В общем случае уравнение Монжа – Ампера с двумя независимыми переменными имеет вид

$$F_1(u_{xx} u_{yy} - u_{xy}^2) + F_2 u_{xx} + F_3 u_{xy} + F_4 u_{yy} + F_5 = 0, \quad (7)$$

где F_1, F_2, F_3, F_4, F_5 – гладкие функции, зависящие от x, y, u, u_x, u_y , причем $F_1 \neq 0$. Уравнения этого типа встречаются, например, в дифференциальной геометрии [1, 2], метеорологии и геофизике [11] и теории конечно деформированных несжимаемых упругих материалов [7, 8] (при $F_2 = F_3 = F_4 = 0$). Точные решения некоторых таких и других сильно нелинейных уравнений, содержащих квадратичные комбинации старших производных, можно найти в [13, 19].

Тип сильно нелинейного уравнения (7) зависит от знака дискриминанта [2]:

$$\Delta = (F_3^2 - 4F_2F_4 + 4F_5)F_1^{-2}, \quad (8)$$

который не содержит вторых производных u_{xx}, u_{xy}, u_{yy} . При $\Delta > 0$ уравнение (7) будет гиперболическим, при $\Delta < 0$ – эллиптическим, а при $\Delta = 0$ – параболическим.

Отметим, что уравнения Монжа – Ампера вида (7) при $F_1 = 1, F_2 = F_3 = F_4 = 0$ и $F_5 = F_5(x, y, u, u_x, u_y) < 0$ могут иметь не единственное решение задачи Дирихле для замкнутой выпуклой области [25].

4. Стационарное неоднородное уравнение Монжа – Ампера с квадратичной нелинейностью по старшим производным (1) допускает многомерное обобщение на случай произвольного числа пространственных переменных

$$\det[u_{x_i x_j}] = F(\mathbf{x}), \quad (9)$$

где $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ и $u_{x_i x_j}$ – вторая производная искомой функции u по переменным x_i и x_j . Матрица вторых производных $[u_{x_i x_j}]$, входящая в это уравнение, описывает локальную кривизну функции многих переменных и называется *матрицей Гессе*.

Симметрии и точные решения нелинейного однородного уравнения (9) с нулевой правой частью исследовались в [26, 27]. В [28–31] были описаны некоторые редукции и точные решения соответствующего неоднородного уравнения и более сложных, чем (9), родственных уравнений, содержащих сильную нелинейность вида $\det[u_{x_i x_j}]$.

5. Качественные особенности, симметрии, преобразования, редукции и точные решения параболических уравнений типа Монжа – Ампера с тремя независимыми переменными, которые содержат первую производную по времени u_t и квадратичную нелинейность относительно комбинации старших производных по пространственным переменным вида $u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2$, рассматривались в [13, 32–38].

Данная работа посвящена точной линеаризации в замкнутой форме различных классов уравнений Монжа – Ампера достаточно общего вида, зависящих от одной до шести произвольных функций одного или двух аргументов. Для линеаризации использованы контактные преобразования Эйлера и Лежандра и специальные точечные преобразования (включая преобразование годографа) их комбинации, которые приводят уравнение (7) к уравнению аналогичного вида с другими функциональными коэффициентами F_n .

Замечание 1. Под точной линеаризацией в замкнутой форме в данной статье понимаются невырожденные преобразования, записанные в виде аналитических формул, связывающих старые и новые независимые и зависимые переменные и их первые производные, которые приводят нелинейные уравнения с частными производными к линейным уравнениям с частными производными. При этом не допускаются никакие упрощения и аппроксимации. Считается также, что все члены, входящие в используемые преобразования, известны и выписаны явно.

1. Преобразование Эйлера и линеаризация уравнений

1. Для упрощения, линеаризации и поиска точных решений нелинейных уравнений в частных производных применяется контактное преобразование Эйлера, которое определяется формулами (см., например, [13, 39, 40]):

$$x = X, \quad y = U_y, \quad u = YU_y - U \quad (\text{прямое преобразование}), \quad (10)$$

$$X = x, \quad Y = u_y, \quad U = yu_y - u \quad (\text{обратное преобразование}), \quad (11)$$

где $u = u(x, y)$ и $U = U(X, Y)$, а первые производные u_x и U_X и вторые производные связаны соотношениями [13, 40]:

$$u_x = -U_X, \quad u_{xx} = \frac{U_{XY}^2 - U_{XX}U_{YY}}{U_{YY}}, \quad u_{xy} = -\frac{U_{XY}}{U_{YY}}, \quad u_{yy} = \frac{1}{U_{YY}}. \quad (12)$$

Из (12) также следует, что

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 = -\frac{U_{XX}}{U_{YY}}.$$

Преобразование Эйлера (10)–(11), как и другие контактные преобразования, не повышает порядок уравнений, к которым оно применяется. Пусть $U = U(X, Y)$ будет решением преобразованного уравнения. Тогда формулы (10) определяют соответствующее решение исходного уравнения в параметрической форме.

При применении преобразований Эйлера отдельные решения могут быть потеряны, если в некоторой подобласти вторая производная u_{xx} (или u_{yy}) тождественно равна нулю.

Альтернативное преобразование Эйлера можно получить из (10)–(11) путем переобозначений независимых переменных $x \rightleftharpoons y$ и $X \rightleftharpoons Y$.

2. Преобразование Эйлера (10) приводит более общее, чем (1), уравнение Монжа – Ампера вида

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 = F(x, y, u_x, u_y), \quad (13)$$

к более простому уравнению, линейному относительно старших производных:

$$U_{XX} = -F(X, U_Y, -U_X, Y)U_{YY}. \quad (14)$$

Отсюда, в частности, следует, что уравнение Монжа – Ампера

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 = F(x, u_y) \quad (15)$$

линеаризуется преобразованием Эйлера для любой функции двух аргументов $F(x, z)$. Отметим, что линеаризация уравнения (15) для частного случая, когда F зависит только от x , была доказана в [16, 24].

Замечание 2. Преобразование Эйлера (10)–(11) позволяет получить общие решения уравнения Монжа – Ампера (1) при $F(x, y) = 0$ и $F(x, y) = -a^2$ в параметрическом виде, эквивалентном (2) и (3). Это следует из решений преобразованного уравнения (14) при $F = 0$ и $F = -a^2$.

3. Более общее, чем (15), уравнение Монжа – Ампера

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 = F(x, u_y) + G(x, u_y)u_{yy} \quad (16)$$

с помощью преобразования Эйлера (10) приводится к линейному уравнению с частными производными

$$U_{XX} = -F(X, Y)U_{YY} - G(X, Y). \quad (17)$$

Рассмотрим два специальных случая, когда можно получить в явном виде общее решение преобразованного уравнения (17).

Случай 1. При $F \equiv 0$ общее решение уравнения (17) можно представить в виде

$$U = \varphi(Y)X + \psi(Y) - \int_{X_0}^X (X - \xi)G(\xi, Y)d\xi,$$

где $\varphi(Y)$ и $\psi(Y)$ – произвольные функции; X_0 – произвольная постоянная.

Случай 2. При $F = -a^2 > 0$, $G(X, Y) = G_1(X) + G_2(Y)$ общее решение уравнения (17) записывается так:

$$U = \Phi(Y + aX) + \Psi(Y - aX) - \int_{X_0}^X (X - \xi)G_1(\xi)d\xi + \frac{1}{a^2} \int_{Y_0}^Y (Y - \eta)G_2(\eta)d\eta,$$

где $\Phi(Y)$ и $\Psi(Y)$ – произвольные функции; X_0 и Y_0 – произвольные постоянные.

4. Нетрудно показать, что следующие пять уравнений Монжа – Ампера:

$$\begin{aligned} u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 &= F(x, u_y) + G(x, u_y)u_{xy}, \\ u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 &= F(x, u_y) + yG(x, u_y)u_{yy}, \\ u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 &= F(x, u_y) + uG(x, u_y)u_{yy}, \\ u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 &= F(x, u_y) + u_x G(x, u_y)u_{yy}, \\ u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 &= F(x, u_y)u_{xy} + G(x, u_y)u_{yy}, \end{aligned} \quad (18)$$

где F и G – произвольные функции двух аргументов, линейризуются с помощью преобразования Эйлера (10).

5. Более общее, чем (16) и (18), уравнение Монжа – Ампера

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 + [f(x, u_y)u_x + g(x, u_y)u + h(x, u_y)y + p(x, u_y)]u_{yy} + q(x, u_y)u_{xy} + r(x, u_y) = 0, \quad (19)$$

где f, g, h, p, q, r – произвольные функции двух аргументов, с помощью преобразования Эйлера (10) приводится к линейному уравнению с частными производными

$$U_{XX} + q(X, Y)U_{XY} - r(X, Y)U_{YY} + f(X, Y)U_X - [g(X, Y)Y + h(X, Y)]U_Y + g(X, Y)U - p(X, Y) = 0. \quad (20)$$

При $g = h = r = 0$ уравнение (20) подстановкой $W = U_X$ сводится к линейному уравнению с частными производными первого порядка.

6. Другое линейризуемое уравнение Монжа – Ампера, зависящее от шести произвольных функций двух аргументов, можно получить с помощью альтернативного преобразования Эйлера, переобозначив независимые переменные $x \rightleftharpoons y$ и $X \rightleftharpoons Y$ в (10), (11) и (19), (20).

2. Преобразование Лежандра и линейаризация уравнений

1. Помимо преобразования Эйлера (10) для линейаризации и упрощения нелинейных уравнений с частными производными используется также контактное преобразование Лежандра, которое определяется формулами (см., например, [2, 13, 39]):

$$x = U_X, \quad y = U_Y, \quad u = XU_X + YU_Y - U \quad (\text{прямое преобразование}), \quad (21)$$

$$X = u_x, \quad Y = u_y, \quad U = xu_x + yu_y - u \quad (\text{обратное преобразование}), \quad (22)$$

где $u = u(x, y)$ и $U = U(X, Y)$, а вторые производные вычисляются по формулам

$$u_{xx} = JU_{YY}, \quad u_{xy} = u_{yx} = -JU_{XY}, \quad u_{yy} = JU_{XX}, \quad J = u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2, \quad 1/J = U_{XX}U_{YY} - U_{XY}^2. \quad (23)$$

Пусть $U = U(X, Y)$ будет решением преобразованного уравнения. Тогда формулы (21) определяют соответствующее решение исходного уравнения в параметрической форме. При применении преобразования Лежандра отдельные решения могут быть потеряны, если в некоторой подобласти якобиан J тождественно равен нулю.

2. Более общее, чем (1), уравнение Монжа – Ампера (13) с помощью преобразования Лежандра (21)–(22) приводится к уравнению аналогичного вида

$$U_{XX}U_{YY} - U_{XY}^2 = G(X, Y, U_X, U_Y), \quad G(X, Y, U_X, U_Y) = \frac{1}{F(U_X, U_Y, X, Y)}. \quad (24)$$

Отсюда, в частности, следует, что уравнение Монжа – Ампера

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 = F(u_x, u_y) \quad (25)$$

преобразованием Лежандра сводится к более простому уравнению вида (1).

Замечание 3. Нестационарное (параболическое) уравнение Монжа – Ампера

$$u_t = u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2,$$

которое встречается в электронной магнитной гидродинамике [9], допускает двумерные решения [35]:

$$u = U(\xi, \eta) + ct, \quad \xi = x + at, \quad \eta = y + bt,$$

где a, b, c – произвольные постоянные, а функция $U = U(\xi, \eta)$ описывается уравнением Монжа – Ампера вида (25):

$$U_{\xi\xi}U_{\eta\eta} - U_{\xi\eta}^2 = aU_{\xi} + bU_{\eta} + c.$$

Это уравнение может быть линеаризовано, см. далее п. 1 в разд. 4.

3. Уравнение Монжа – Ампера

$$\begin{aligned} & [up(u_x, u_y) + xq(u_x, u_y) + yr(u_x, u_y) + s(u_x, u_y)](u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2) + \\ & + f(u_x, u_y)u_{xx} + g(u_x, u_y)u_{xy} + h(u_x, u_y)u_{yy} = 0, \end{aligned} \quad (26)$$

где f, g, h, p, q, r, s – произвольные функции двух аргументов, преобразованием Лежандра приводится к линейному уравнению

$$\begin{aligned} & f(X, Y)U_{YY} - g(X, Y)U_{XY} + h(X, Y)U_{XX} + [q(X, Y) + X]U_X + \\ & + [r(X, Y) + Y]U_Y - p(X, Y)U + s(X, Y) = 0. \end{aligned} \quad (27)$$

Из (26), в частности, следует, что могут быть линеаризованы следующие два уравнения:

$$\begin{aligned} u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 &= f(|\nabla u|)\Delta u, \\ u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 &= u^{-1}f(|\nabla u|)\Delta u, \end{aligned} \quad (28)$$

где $f(z)$ – произвольная функция; $|\nabla u| = (u_x^2 + u_y^2)^{1/2}$; $\Delta u = u_{xx} + u_{yy}$. Эти уравнения входят в класс обобщенных уравнений типа Монжа – Ампера, которые рассматривались в [31].

3. Неклассическое преобразование годографа и линеаризация уравнений

1. Для упрощения и анализа некоторых нелинейных уравнений математической физики используется неклассическое преобразование годографа [13, 40, 41]. Для уравнения с двумя независимыми переменными x и y и искомой функцией $u = u(x, y)$ неклассическое преобразование годографа заключается в том, что решение ищется в неявном виде (x и y можно поменять местами):

$$x = x(u, y), \quad (29)$$

т.е. u и y принимаются за независимые переменные, а x – за неизвестную функцию. Преобразование годографа (29) не меняет порядок уравнения и является важным частным случаем точечного преобразования (его можно записать в эквивалентном виде: $x = \bar{u}$, $y = \bar{y}$, $u = \bar{x}$).

Дифференцируя (29) по обеим переменным как неявную функцию и учитывая, что $u = u(x, y)$, можно получить следующие формулы для производных [13, 40]:

$$u_x = \frac{1}{x_u}, \quad u_y = -\frac{x_y}{x_u}, \quad u_{xx} = -\frac{x_{uu}}{x_u^3}, \quad u_{xy} = -\frac{x_u x_{uy} - x_y x_{uu}}{x_u^3}, \quad u_{yy} = \frac{-x_u^2 x_{yy} + 2x_u x_y x_{uy} - x_y^2 x_{uu}}{x_u^3}. \quad (30)$$

Из (30) также следует, что

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 = x_u^{-4} (x_{uu}x_{yy} - x_{uy}^2).$$

Неклассическое преобразование годографа (29) в комбинации с контактными преобразованиями Эйлера и Лежандра можно использовать для линеаризации некоторых классов уравнений Монжа – Ампера.

2. Применив преобразование годографа (29) к линеаризуемому уравнению Монжа – Ампера (15), получим другое линеаризуемое уравнение Монжа – Ампера, которое после обратных переобозначений ($u \Rightarrow x$) можно записать в виде

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 = u_x^4 H(u, u_y/u_x), \quad (31)$$

где $H(x, z) = F_1(x, -z)$ – произвольная функция двух аргументов. Отметим, что уравнение (31) из других соображений было получено в [24].

Применяя далее преобразование Лежандра (21) с частному случаю линеаризуемого уравнения (31) при $H(x, z) = h(z)$, после очевидных переобозначений приходим к линеаризуемому уравнению Монжа – Ампера

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 = x^{-4} f(y/x),$$

где $f(z)$ – произвольная функция (см. случай 2) в (4)).

Более сложные линеаризуемые уравнения Монжа – Ампера можно получить, например, применив преобразование годографа (29) к линеаризуемым уравнениям (16) и (18).

4. Линеаризация уравнений Монжа – Ампера, встречающихся в метеорологии и геофизике

Ниже рассматриваются некоторые линеаризуемые уравнения типа Монжа – Ампера (7), которые встречаются в метеорологии и геофизике [11, 12].

1. Рассмотрим уравнение Монжа – Ампера (25) специального вида

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 = au_x + bu_y + c, \quad (32)$$

где a, b, c – свободные параметры. Некоторые точные решения этого уравнения и его модификаций приведены в [11, 13].

Уравнение (32) преобразованием Лежандра (21)–(22) сводится к уравнению

$$U_{XX}U_{YY} - U_{XY}^2 = \frac{1}{aX + bY + c},$$

которое является частным случаем линеаризуемого уравнения Монжа – Ампера вида (1) с правой частью (5).

Отметим, что уравнение Монжа – Ампера (32) допускает точное решение

$$u = \varphi(ay - bx) + bC_1x - \left(aC_1 + \frac{c}{b}\right)y + C_2,$$

где $\varphi(z)$ – произвольная функция; C_1 и C_2 – произвольные постоянные. На этом решении левая часть уравнения (32) обращается в нуль, поэтому оно будет потеряно при использовании преобразования Лежандра.

2. Уравнение Монжа – Ампера

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 + au_{xx} + bu_{xy} + g(x)u_{yy} + h(x) = 0, \quad (33)$$

где $g(x), h(x)$ – произвольные функции, a, b – свободные параметры, заменой

$$u = w(x, y) - \int_0^x (x-t)g(t)dt + \frac{1}{2}bxy - \frac{1}{2}ay^2 \quad (34)$$

приводится к допускающему линеаризацию более простому уравнению вида (15) при $F = F(x)$:

$$w_{xx}w_{yy} - w_{xy}^2 + h(x) - ag(x) + \frac{1}{4}b^2 = 0.$$

3. Более общее, чем (33), уравнение Монжа – Ампера

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 + au_{xx} + f(x)u_{xy} + g(x)u_{yy} + h(x) = 0, \quad (35)$$

где $f(x), g(x), h(x)$ – произвольные функции; a – свободный параметр, заменой

$$u = V(x, y) - \frac{1}{2}ay^2 \quad (36)$$

приводится к частному случаю уравнению вида (19):

$$V_{xx}V_{yy} - V_{xy}^2 + f(x)V_{xy} + g(x)V_{yy} + h(x) - ag(x) = 0,$$

которое допускает точную линеаризацию с помощью преобразования Эйлера (10).

4. Уравнение Монжа – Ампера

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 + au_{xy} + f(x)u_{yy} + g(x)u_y + h(x) = 0, \quad (37)$$

где $f(x)$, $g(x)$, $h(x)$ – произвольные функции; a – свободный параметр, заменой

$$u = W(x, y) + \frac{1}{2}axy$$

приводится к уравнению

$$W_{xx}W_{yy} - W_{xy}^2 + f(x)W_{yy} + g(x)W_y + \frac{1}{4}a^2 + \frac{1}{2}axg(x) + h(x) = 0.$$

Это уравнение является частным случаем уравнения (16) при $F(x, z) = g(x)z + \frac{1}{4}a^2 + \frac{1}{2}axg(x) + h(x)$, $G(x, z) = f(x)$ (и после переобозначения W на u), которое линеаризуется преобразованием Эйлера (10).

5. Уравнение Монжа – Ампера вида

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 + au_{xx} + bu_{xy} + cu_{yy} = \Phi(x, y), \quad (38)$$

где a , b , c – свободные параметры, заменой

$$u = w(x, y) - \frac{1}{2}cx^2 + \frac{1}{2}bxy - \frac{1}{2}ay^2 \quad (39)$$

приводится к более простому уравнению вида (1):

$$w_{xx}w_{yy} - w_{xy}^2 = \Phi(x, y) + ac - \frac{1}{4}b^2. \quad (40)$$

Сопоставление (40) с уравнением (1) в случаях (5) и (6) показывает, что исходное уравнение (38) может быть точно линеаризовано для следующих двух функций:

$$1) \quad \Phi(x, y) = f_1(a_1x + b_1y + c_1);$$

$$2) \quad \Phi(x, y) = -ac + \frac{1}{4}b^2 + \frac{1}{(a_1x + b_1y + c_1)^4} f_2\left(\frac{a_2x + b_2y + c_2}{a_1x + b_1y + c_1}\right),$$

где $f_1(z_1)$ и $f_2(z_2)$ – произвольные функции; $a_1, a_2, b_1, b_2, c_1, c_2$ – свободные параметры.

Замечание 4. При $\Phi(x, y) = k = \text{const}$ и $k + ac - \frac{1}{4}b^2 < 0$ общее решение преобразованного уравнения (40) (и соответственно исходного уравнения (38)) можно получить с помощью очевидных переобозначений в формулах (3).

6. Уравнение Монжа – Ампера

$$u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 + au_{xx} + bu_x + c = 0, \quad (41)$$

где a, b, c – свободные параметры, заменой (36) приводится к более простому линеаризуемому уравнению вида (32):

$$V_{xx}V_{yy} - V_{xy}^2 + bV_x + c = 0.$$

7. Нестационарное уравнение с нелинейностью типа Монжа – Ампера [37]:

$$u_{tt} = u_{xx}u_{yy} - u_{xy}^2 \quad (42)$$

в переменных бегущей волны имеет двумерное симметричное решение

$$u = U(\xi, \eta), \quad \xi = x + at, \quad \eta = y + bt,$$

где a, b – произвольные постоянные, а функция $U = U(\xi, \eta)$ описывается линеаризуемым уравнением Монжа – Ампера вида (33):

$$U_{\xi\xi}U_{\eta\eta} - U_{\xi\eta}^2 = a^2U_{\xi\xi} + 2abU_{\xi\eta} + b^2U_{\eta\eta}.$$

Замечание 5. Уравнение (42) встречается в геофизической гидродинамике. Симметрии и точные решения этого уравнения рассматривались в [43].

Краткие выводы

Рассмотрены различные классы уравнений типа Монжа – Ампера с двумя независимыми переменными, зависящих от одной до шести произвольных функций одного или двух аргументов, которые допускают точную линеаризацию. Для линеаризации использованы контактные преобразования Эйлера и Лежандра, а также неклассическое преобразование годографа и другие точные преобразования. Найдены также некоторые точные решения рассматриваемых уравнений. Особое внимание уделяется уравнениям Монжа – Ампера, которые встречаются в метеорологии и геофизике.

Финансирование

Работа выполнена по темам государственного задания (номера госрегистрации 124012500440-9 и FSWU-2023-0031).

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

А.Д. Полянин – выбор нелинейных уравнений, преобразования, линеаризация, точные решения, подготовка текста статьи, обсуждение результатов.

А.В. Аксенов – выбор нелинейных уравнений, преобразования, линеаризация, точные решения, подготовка текста статьи, обсуждение результатов.

Список литературы

1. *Погорелов А.В.* Внешняя геометрия выпуклых поверхностей. М.: Наука, 1969. 759 с.
2. *Курант Р.* Уравнения с частными производными. М.: Мир, 1964. 830 с.
3. *Caffarelli L.A., Milman M.* (eds). Monge – Ampère Equation: Applications to Geometry and Optimization. Providence: American Mathematical Society, 1999.
4. *Figalli A.* The Monge – Ampère Equation and Its Applications. Zürich: European Mathematical Society, 2017. 212 p.
5. *Martin M.N.* The propagation of a plane shock into a quiet atmosphere // Canadian Journal of Mathematics, 1953. V. 5. P. 37–39. DOI: 10.4153/CJM-1953-004-2.
6. *Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н.* Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике, изд. 2-е. М.: Наука, 1978. 687 с.
7. *Hill J.M., Arrigo D.J.* New families of exact solutions for finitely deformed incompressible elastic materials // IMA Journal of Applied Mathematics, 1995. V. 54(2). P. 109–123. DOI: 10.1093/imamat/54.2.109.
8. *Hill J.M., Arrigo D.J.* Transformations and equation reductions in finite elasticity I: Plane strain deformations // Mathematics and Mechanics of Solids, 1996. V. 1. Iss. 2. P. 155–175.
9. *Zaburdaev V.Yu., Smirnov V.V., Chukbar K.V.* Nonlinear dynamics of electron vortex lattices // Plasma Phys. Reports, 2014. V. 30. № 3. P. 214–217.
10. *Жабборов Н.М., Коробов П.В., Имомназаров Х.Х.* Применение дифференциальных тождеств Меграбова к уравнениям двухскоростной гидродинамики с одним давлением // Журн. Сибир. федер. университета (СФУ). Сер. Матем. и физ., 2012. Т. 5. № 2. С. 156–163.
11. *Розендорн Э.Р.* Некоторые классы частных решений уравнения $z_{xx}z_{yy} - z_{xy}^2 + a\nabla z = 0$ и их приложение к задачам метеорологии // Вестник Московского университета. Серия 1. Математика. Механика, 1984. № 2, С. 56–58.
12. *Розендорн Э.Р.* Поверхности отрицательной кривизны. Итоги науки и техники. Сер. Соврем. проблемы математики. Фунд. направления, 1989. Т. 48. С. 98–195.
13. *Polyanin A.D., Zaitsev V.F.* Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations, 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2012.
14. *Гурса Э.* Курс математического анализа. Т. 3. Ч. 1. М.: Гостехиздат, 1933. 1764 с.
15. *Овсянников Л.В.* Групповой анализ дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1978. 399 с.
16. *Хабиров С.В.* Неизэнтропические одномерные движения газа, построенные с помощью контактной группы неоднородного уравнения Монжа – Ампера // Математический сборник, 1990. Т. 181. № 12. С. 1607–1622.
17. *Фушич В.И., Штелень В.М., Серов Н.И.* Симметричный анализ и точные решения нелинейных уравнений математической физики. Киев: Наукова думка, 1989.
18. *Ibragimov N.H.* (ed.) CRC Handbook of Lie Group Analysis of Differential Equations. Vol. 1. Symmetries, Exact Solutions and Conservation Laws. Boca Raton: CRC Press, 1994.
19. *Polyanin A.D.* Handbook of Exact Solutions to Mathematical Equations. Boca Raton: CRC Press, 2025.
20. *Gutshabash E.S.* Legendre transformation in the Born – Infeld model, Monge – Ampère equation and exact solutions // Journal of Mathematical Sciences, 2024. V. 284. P. 673–680. DOI: 10.1007/s10958-024-07378-5.
21. *Feroze T., Umair M.* Optimal system and exact solutions of Monge – Ampère equation // Communications in Mathematics and Applications, 2021. V. 12. № 4. P. 825–833. DOI: 10.26713/cma.v12i4.1516.
22. *Aminov Yu., Arslan K., Bayram B., Bulca B., Murathan C., Öztürk G.* On the solution of the Monge – Ampère equation $Z_{xx}Z_{yy} - Z_{xy}^2 = f(x, y)$ with quadratic right side // Журн. матем. физ., анализ, геом., 2011. Т. 7. № 3. P. 203–211.
23. *Аминов Ю.А.* О полиномиальных решениях уравнения Монжа – Ампера // Математический сборник, 2014. Т. 205. № 11. С. 3–38. DOI: 10.4213/sm8356.

24. Arrigo D.J., Hill J.M. On a class of linearizable Monge – Ampère equations // J. Nonlinear Math. Phys., 1998. V. 5. № 2. P. 115–119. DOI: 10.2991/jnmp.1998.5.2.1
25. Бакельман И.Я., Красносельский М.А. Нетривиальные решения задачи Дирихле для уравнений с операторами Монжа – Ампера // ДАН СССР, 1961. Т. 137. № 5. С. 1007–1010.
26. Фуцич В.И., Серов Н.И. Симметрия и некоторые точные решения многомерного уравнения Монжа – Ампера // Докл. АН СССР, 1983. Т. 273. № 3. С. 543–546.
27. Leibov O.S. Reduction and exact solutions of the Monge – Ampère equation // Journal of Nonlinear Mathematical Physics, 1997. V. 4. № 1–2. P. 146–148. DOI:10.2991/jnmp.1997.4.1-2.17
28. Fedorchuk V.M., Fedorchuk V.I. On the symmetry reduction of the (1+3)-dimensional inhomogeneous Monge – Ampère equation to algebraic equations // Journal of Mathematical Sciences, 2024. V. 282 (5). P. 1–10. DOI: 10.1007/s10958-024-07208-8.
29. Рахмелевич И.В. Многомерное уравнение Монжа – Ампера со степенными нелинейностями по первым производным // Вестн. Воронежского гос. ун-та. Сер. Физика. Математика, 2020. № 2. С. 86–98.
30. Косов А.А., Семенов Э.И. О многомерных точных решениях обобщенного уравнения Монжа – Ампера // Дифференциальные уравнения, 2024. Т. 60. № 10. С. 1334–1349.
31. Косов А.А., Семенов Э.И. Обобщенное уравнение типа Монжа – Ампера и его многомерные точные решения // Вестн. Удмуртск. ун-та. Матем. Мех. Компьют. науки, 2025. Т. 35. № 2. С. 215–230.
32. Dubinov A.E., Kitayev I.N. New exact solutions of the equation of non-linear dynamics of a lattice of electronic vortices in plasma in the framework of electron magnetohydrodynamics // Magnetohydrodynamics, 2020. V. 56. № 4. P. 369–375.
33. Рахмелевич И.В. Неавтономное эволюционное уравнение типа Монжа – Ампера с двумя пространственными переменными // Известия вузов. Математика, 2023. № 2. С. 66–80.
34. Аксенов А.В., Полянин А.Д. Групповой анализ, редукции и точные решения уравнения Монжа – Ампера магнитной гидродинамики // Дифференциальные уравнения, 2024. Т. 60. № 6. С. 750–763.
35. Polyanin A.D., Aksenov A.V. Unsteady magnetohydrodynamics PDE of Monge – Ampère type: Symmetries, closed-form solutions, and reductions // Mathematics, 2024. V. 12. № 13. 2127.
36. Полянин А.Д. Точные решения и редукции нестационарных уравнений математической физики типа Монжа – Ампера // Вестник НИЯУ «МИФИ», 2023. Т. 12. № 5. С. 276–288.
37. Galaktionov V.A., Svirshchevskii S.R. Exact Solutions and Invariant Subspaces of Nonlinear Partial Differential Equations in Mechanics and Physics. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press, 2007.
38. Aksenov A.V., Polyanin A.D. Symmetries, reductions and exact solutions of nonstationary Monge – Ampère type equations // Mathematics, 2025. V. 13. № 3. 525. DOI: 10.3390/math13030525.
39. Zwillinger D. Handbook of Differential Equations, 3rd ed. San Diego: Academic Press, 1998.
40. Polyanin A.D. Exact Methods for Nonlinear PDEs. Boca Raton–London: Chapman and Hall/CRC Press, 2025.
41. Clarkson P.A., Fokas A.S., Ablowitz M.J. Hodograph transformations of linearizable partial differential equations // SIAM J. Appl. Math., 1989. V. 49. № 4. P. 1188–1209.
42. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. Handbook of Ordinary Differential Equations: Exact Solutions, Methods, and Problems. Boca Raton: CRC Press, 2018.
43. Polyanin A.D., Aksenov A.V. Geophysical Monge-Ampère-type equation: Symmetries and exact solutions // Mathematics, 2025. V. 13. № 21. 3522.

Exact linearization of fully nonlinear Monge – Ampère type equations

A. D. Polyanin¹, A. V. Aksenov²

¹ Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119526 Russia

² Lomonosov Moscow State University, 1 Leninskie Gory, Main Building, Moscow, 119991 Russia

Received September 23, 2025; revised October 19, 2025; accepted October 21, 2025

New classes of Monge – Ampère equations of a fairly general form are described, depending on one to six arbitrary functions of one or two arguments that allow exact linearization in closed form. For linearization, contact Euler and Legendre transformations and special point transformations (including the nonclassical hodograph transformation) of their combinations are used. Special attention is given to the Monge – Ampère equations encountered in meteorology and geophysics. Equivalence transformations of classes of Monge – Ampère equations of a special kind are also considered. For some nonlinear equations, exact solutions were obtained depending on arbitrary functions. Two nonstationary, strongly nonlinear Monge-Ampère type equations with three independent variables, encountered in electron magnetohydrodynamics and geophysical fluid dynamics, were also considered. For these equations, two-dimensional reductions to simpler equations that allow exact linearization were constructed in traveling-wave variables.

Keywords: Monge – Ampère equations, fully nonlinear PDEs, exact linearization, Euler and Legendre transformations, hodograph transformation, contact and point transformations.

References

1. Pogorelov A.V. Vneshnyaya geometriya vypuklykh poverhnostej [Extrinsic Geometry of Convex Surfaces]. Moscow, Nauka Publ., 1969. 759 p.
2. Courant R. Uravneniya s chastnymi proizvodnymi [Partial differential equations]. Moscow, Mir Publ., 1964. 830 p.
3. Caffarelli L.A., Milman M. (eds). Monge – Ampère Equation: Applications to Geometry and Optimization. Providence, American Mathematical Society, 1999.
4. Figalli A. The Monge – Ampère Equation and Its Applications. Zürich, European Mathematical Society, 2017. 212 p.
5. Martin M.N. The propagation of a plane shock into a quiet atmosphere. Canadian Journal of Mathematics, 1953. Vol. 5. Pp. 37–39. DOI: 10.4153/CJM-1953-004-2.
6. Rozhdestvenskii B.L., Yanenko N.N. Sistemy kvazilineynykh uravnenij i ih prilozheniya k gazovoj dinamike, izd. 2-e. [Systems of Quasilinear Equations and Their Applications to Gas Dynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1978. 687 p.
7. Hill J.M., Arrigo D.J. New families of exact solutions for finitely deformed incompressible elastic materials. IMA Journal of Applied Mathematics, 1995. Vol. 54(2). Pp. 109–123. DOI: 10.1093/imamat/54.2.109.
8. Hill J.M., Arrigo D.J. Transformations and equation reductions in finite elasticity I: Plane strain deformations. Mathematics and Mechanics of Solids, 1996. Vol. 1. Iss. 2. Pp. 155–175.
9. Zaburdaev V.Yu., Smirnov V.V., Chukbar K.V. Nonlinear dynamics of electron vortex lattices. Plasma Phys. Reports, 2014. Vol. 30. No. 3. Pp. 214–217.
10. Zhabborov N.M., Korobov P.V., Imomnazarov Kh.Kh. Primeneniye differentsial'nykh tozhdestv Megrabova k uravneniyam dvukhskorostnoy gidrodinamiki s odnim davleniyem [Application of Megrabov's differential identities to the two-velocity hydrodynamics equations with one pressure]. Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics, 2012. Vol. 5. No. 2. Pp. 156–163 (in Russian).
11. Rozendorn E.R. Nekotoryye klassy chastnykh resheniy uravneniya $z_{xx}z_{yy} - z_{xy}^2 + a\nabla z = 0$ i ikh prilozheniya k zadacham meteorologii [Some classes of particular solutions of the equation $z_{xx}z_{yy} - z_{xy}^2 + a\nabla z = 0$ and their application to meteorological problems]. Vestn. Mosk. Univ. Ser. 1. Mat., Mech., 1984. No. 2. Pp. 56–58 (in Russian).
12. Rozendorn E.R. Poverkhnosti otritsatel'noy krivizny [Surfaces of negative curvature]. Results of science and technology. Series: Modern problems of mathematics. Fundamental directions, 1989. Vol. 48. Pp. 98–195.

13. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations, 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2012.
14. Goursa E. Kurs matematicheskogo analiza [Course of Mathematical Analysis. Vol. 3, Part 1]. Moscow, Gostekhizdat Publ.: Russia, 1933. 1764 p.
15. Ovsiannikov L.V. Gruppovoy analiz differentsial'nykh uravneniy [Group Analysis of Differential Equations]. Moscow, Nauka Publ., 1978. 399 p.
16. Khabirov S.V. Neizentropicheskiye odnomernyye dvizheniya gaza, postroyennyye s pomoshch'yu kontaktnoy gruppy neodnorodnogo uravneniya Monzha – Ampèra [Nonisotropic one-dimensional gas motions constructed by means of the contact group of the nonhomogeneous Monge – Ampère equation]. Math. Sbornik, 1990. Vol. 181. No. 12. Pp. 1607–1622 (in Russian).
17. Fushchich W.I., Shtelen W.M., Serov N.I. Simmetriynyj analiz i tochnye resheniya nelineynykh uravneniy matematicheskoy fiziki. [Symmetry Analysis and Exact Solutions of Equations of Nonlinear Mathematical Physics]. Kiev, Naukova dumka Publ., 1989.
18. Ibragimov N.H. (ed.) CRC Handbook of Lie Group Analysis of Differential Equations, Vol. 1, Symmetries, Exact Solutions and Conservation Laws. Boca Raton: CRC Press, 1994.
19. Polyanin A.D. Handbook of Exact Solutions to Mathematical Equations. Boca Raton: CRC Press, 2025.
20. Gutshabash E.S. Legendre transformation in the Born–Infeld model, Monge – Ampère equation and exact solutions. Journal of Mathematical Sciences, 2024. Vol. 284. Pp. 673–680. DOI: 10.1007/s10958-024-07378-5.
21. Feroze T., Umair M. Optimal system and exact solutions of Monge – Ampère equation. Communications in Mathematics and Applications, 2021. Vol. 12. № 4. Pp. 825–833. DOI: 10.26713/cma.v12i4.1516.
22. Aminov Yu., Arslan K., Bayram B., Bulca B., Murathan C., Öztürk G. On the solution of the Monge – Ampère equation $Z_{xx}Z_{yy} - Z_{xy}^2 = f(x, y)$ with quadratic right side. Zh. Mat. Fiz. Anal. Geom., 2011. Vol. 7. No. 3. Pp. 203–211.
23. Aminov Yu.A. O polinomial'nykh resheniyakh uravneniya Monzha–Ampèra [On polynomial solutions of the Monge – Ampère equation]. Math. Sbornik, 2014. Vol. 205. No. 11. Pp. 3–38 (in Russian). DOI: 10.4213/sm8356.
24. Arrigo D.J., Hill J.M. On a class of linearizable Monge – Ampère equations. J. Nonlinear Math. Phys., 1998. Vol. 5. No. 2. Pp. 115–119. DOI: 10.2991/jnmp.1998.5.2.1.
25. Bakelman I.Ya., Krasnosel'skii M.A. Netrivial'nyye resheniya zadachi Dirikhle dlya uravneniy s operatorami Monzha–Ampèra [Nontrivial solutions of the Dirichlet problem for equations with Monge – Ampère operators]. DAN SSSR, 1961. Vol. 137. No. 5. Pp. 1007–1010 (in Russian).
26. Fushchich W.I., Serov N.I. Simmetriya i nekotoryye tochnyye resheniya mnogomernogo uravneniya Monzha–Ampèra [Symmetry and some exact solutions of the multidimensional Monge – Ampère]. Dokl. Acad. Nauk USSR. 1983. Vol. 273. Pp. 543–546 (in Russian).
27. Leibov O.S. Reduction and exact solutions of the Monge – Ampère equation. Journal of Nonlinear Mathematical Physics, 1997. Vol. 4. No. 1–2. Pp. 146–148. DOI:10.2991/jnmp.1997.4.1-2.17.
28. Fedorchuk V.M., Fedorchuk V.I. On the symmetry reduction of the (1+3)-dimensional inhomogeneous Monge – Ampère equation to algebraic equations. Journal of Mathematical Sciences, 2024. Vol. 282 (5). Pp. 1–10. DOI: 10.1007/s10958-024-07208-8.
29. Rakhmelevich I.V. Mnogomernoye uravneniye Monzha – Ampèra so stepennymi nelineynostyami po pervym proizvodnym [Multidimensional Monge–Ampère equation with power nonlinearities in the first derivatives]. Vestn. Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics, 2020. No. 2. Pp. 86–98 (in Russian).
30. Kosov A.A., Semenov E.I. On exact solutions to multidimensional generalized Monge – Ampère equation. Differential Equations, 2024. Vol. 60. No. 10. Pp. 1404–1418.
31. Kosov A.A., Semenov E.I. Obobshchennoye uravneniye tipa Monzha – Ampèra i yego mnogomernyye tochnyye resheniya [Generalized equation of Monge – Ampère type and its multidimensional exact solutions]. Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mech. Comput. Sciences, 2025. Vol. 35. No. 2. Pp. 215–230 (in Russian).
32. Dubinov A.E., Kitayev I.N. New exact solutions of the equation of non-linear dynamics of a lattice of electronic vortices in plasma in the framework of electron magnetohydrodynamics. Magnetohydrodynamics, 2020. Vol. 56. No. 4. Pp. 369–375.
33. Rakhmelevich I.V. Nonautonomous evolution equation of Monge – Ampère type with two space variables. Russian Mathematics, 2023. Vol. 67. No. 2. Pp. 52–64.
34. Aksenov A.V., Polyanin A.D. Group analysis, reductions, and exact solutions of the Monge – Ampère equation in magnetic hydrodynamics. Differential Equations, 2024. Vol. 60. No. 6. Pp. 716–728.
35. Polyanin A.D., Aksenov A.V. Unsteady magnetohydrodynamics PDE of Monge – Ampère type: Symmetries, closed-form solutions, and reductions. Mathematics, 2024. Vol. 12. No. 13. 2127.
36. Polyanin A.D. Tochnyye resheniya i reduktsii nestatsionarnykh uravneniy matematicheskoy fiziki tipa Monzha – Ampèra [Exact solutions and reductions of non-stationary equations of mathematical physics of the Monge – Ampère type]. Vestnik NIYaU MIFI, 2023. Vol. 12. No. 5. Pp. 276–288 (in Russian).
37. Galaktionov V.A., Svirshchevskii S.R. Exact Solutions and Invariant Subspaces of Nonlinear Partial Differential Equations in Mechanics and Physics. Boca Raton, Chapman & Hall/CRC Press, 2007.
38. Aksenov A.V., Polyanin A.D. Symmetries, reductions and exact solutions of nonstationary Monge – Ampère type equations. Mathematics, 2025. Vol. 13. No. 3. 525. DOI: 10.3390/math13030525

- 39. *Zwillinger D.* Handbook of Differential Equations, 3rd ed. San Diego, Academic Press, 1998.
- 40. *Polyanin A.D.* Exact Methods for Nonlinear PDEs. Boca Raton–London: Chapman and Hall/CRC Press, 2025.
- 41. *Clarkson P.A., Fokas A.S., Ablowitz M.J.* Hodograph transformations of linearizable partial differential equations. SIAM J. Appl. Math., 1989. Vol. 49. No. 4. Pp. 1188–1209.
- 42. *Polyanin A.D., Zaitsev V.F.* Handbook of Ordinary Differential Equations: Exact Solutions, Methods, and Problems. Boca Raton, CRC Press, 2018.
- 43. *Polyanin A.D., Aksenov A.V.* Geophysical Monge-Ampère-type equation: Symmetries and exact solutions // Mathematics, 2025. Vol. 13. No 21. 3522.

УДК 517.95

Обратная задача определения коэффициента поглощения в вырождающемся параболическом уравнении дивергентного вида с одной пространственной переменной

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

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

Изучается нелинейная обратная задача определения неизвестного, зависящего от t , коэффициента поглощения в одномерном по пространственным переменным параболическом уравнении со слабо вырождающейся главной частью, которая задана в дивергентной форме. Дополнительное условие наблюдения задается в интегральной форме. Физически это означает, например, измерение температуры датчиком конечного размера, установленным во внутренней точке области. Решение понимается в обобщенном смысле, в частности, неизвестный коэффициент поглощения 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. Множество точек вырождения может быть и бесконечным, но должно иметь меру нуль. Доказаны теоремы существования и единственности решения. Существование решения доказано в малом по времени, теорема единственности носит глобальный характер. Для доказательства существования решения обратной задачи последняя сводится к изучению разрешимости некоторого операторного уравнения, и показывается, что при наложенных в работе условиях оператор является сжимающим.

Ключевые слова: коэффициентные обратные задачи, вырождающиеся параболические уравнения, интегральное наблюдение.

Введение

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

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

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

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

✉ В.Л. Камынин: vlkaminin2008@yandex.ru

О.В. Нагорнов: nagornov@yandex.ru

Поступила в редакцию: 26.09.2025

После доработки: 29.10.2025

Принята к публикации: 05.11.2025

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

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

Для случая равномерно параболических уравнений аналогичная обратная задача ранее исследовалась в работах [1]–[6] и др. Случай вырождающихся параболических уравнений с условием типа (5) рассматривался в [7]–[9] 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:

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

Всюду в работе будем предполагать, что рассматриваемые в ней 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, [10]).

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

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

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

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

$$c(t, x) \in L_\infty(Q), \quad |c(t, x)| \leq K_c, \quad (t, x) \in Q; \quad (C)$$

$$f(t, x) \in L_2(Q), \quad \|f\|_{L_2(Q)} \leq K_f; \quad (D)$$

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

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

$$\varphi(t) \in W_2^1(0, T), \quad |\varphi(t)| \geq \varphi_0 > 0, \quad \|\varphi'\|_{L_2(0, T)} \leq K_\varphi^*, \quad \varphi(0) = \int_0^l u_0(x) \omega(x) dx. \quad (G)$$

В условиях (A) – (G) $a_0, a_1, a_2, \varphi_0, K_\omega, K_\omega^* = \text{const} > 0$, $K_{b,a}, K_c, K_f, M_0, K_\varphi^* = \text{const} \geq 0$.

Определение 1. Обобщенным решением обратной задачи (1)–(4) будем называть пару функций $\{u(t, x), \gamma(t)\}$ таких, что $u(t, x) \in C(0, T; L_2(0, l)) \cap \overset{0}{W}_s^1(Q)$, $s > 1$, $\sqrt{\Lambda_0(x)} u_x \in L_2(Q)$, $\gamma(t) \in L_2(0, T)$, для

любой пробной функции $\Phi(t, x) \in C(0, T; L_2(0, l)) \cap \overset{0}{W}_s^1(Q)$, $\Phi_t \in L_2(Q)$, $\sqrt{\Lambda_0(x)}\Phi_x \in L_2(Q)$ и для любого $\tau \in (0, T]$ выполняется интегральное тождество

$$\begin{aligned} & \int_0^l u(\tau, x)\Phi(\tau, x)dx - \int_0^l u_0(x)\Phi(0, x)dx - \int_{Q_\tau} u(t, x)\Phi_t(t, x)dxdt + \\ & + \int_{Q_\tau} a(t, x)u_x(t, x)\Phi_x(t, x)dxdt + \int_{Q_\tau} [b(t, x)u_x(t, x) + c(t, x)u(t, x) + \gamma(t)u(t, x)]\Phi(t, x)dxdt = \\ & = \int_{Q_\tau} f(t, x)\Phi(t, x)dxdt, \end{aligned} \quad (6)$$

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

Замечание 1. Рассмотрим прямую задачу (1)–(3), считая, что коэффициент $\gamma(t) \in L_2(0, T)$ известен. Тогда в силу результатов [11] обобщенное решение $u(t, x)$ этой задачи (понимаемое в смысле определения 1) существует и единственно, причем

$$u(t, x) \in \overset{0}{W}_q^1(Q), \quad q^* = \frac{2q}{q+1}. \quad (7)$$

Однозначная разрешимость обратной задачи

Установим условия, при которых обратная задача (1)–(4) однозначно разрешима.

Введем обозначение $F(t) = \int_0^l f(t, x)\omega(x)dx$. Тогда в силу условий (D) и (F) $F(t) \in L_2(0, T)$.

Выведем операторное уравнение для нахождения неизвестного коэффициента $\gamma(t)$. Для этого в интегральном тождестве (6) положим $\Phi(t, x) = \chi(t)\omega(x)$, где $\chi(t) \in \overset{0}{W}_2^1(0, T)$. Тогда имеем

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

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

$$\varphi'(t) + \gamma(t)\varphi(t) + \int_0^l a(t, x)u_x \omega_x(x)dx + \int_0^l (b(t, x)u_x + c(t, x)u)\omega(x)dx = F(t). \quad (8)$$

Из уравнения (8) с учетом условия (G) получаем равенство

$$\gamma(t) = \frac{1}{\varphi(t)} \left[-\varphi'(t) + F(t) - \int_0^l a(t, x)u_x \omega_x(x)dx - \int_0^l (b(t, x)u_x + c(t, x)u)\omega(x)dx \right]. \quad (9)$$

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

$$\mathcal{A}(\gamma)(t) = \frac{1}{\varphi(t)} \left[-\varphi'(t) + F(t) - \int_0^l a(t, x) u_x \omega_x(x) dx - \int_0^l (b(t, x) u_x + c(t, x) u) \omega(x) dx \right]. \quad (10)$$

Тогда соотношение (9) переписывается в виде

$$\gamma = \mathcal{A}(\gamma). \quad (11)$$

Лемма 1. Пусть выполнены условия (A)–(G). Тогда операторное уравнение (11) эквивалентно обратной задаче (1)–(4) в следующем смысле. Если пара $\{u(t, x), \gamma(t)\}$ является решением обратной задачи, то функция $\gamma(t)$ – решение уравнения (11). Обратно, если $\hat{\gamma}(t) \in L_2(0, T)$ является решением уравнения (11), а $\hat{u}(t, x)$ – решение прямой задачи (1)–(3) с выбранной функцией $\hat{\gamma}(t)$ в правой части уравнения (1), то пара $\{\hat{u}(t, x), \hat{\gamma}(t)\}$ является обобщенным решением обратной задачи (1)–(4) с $s = q^*$, где q^* определена в (7).

Доказательство. Первое утверждение леммы доказано выше при выводе соотношения (11).

Докажем второе утверждение. Пусть $\hat{\gamma}(t) \in L_2(0, T)$ является решением уравнения (11), а $\hat{u}(t, x)$ – обобщенное решение прямой задачи (1)–(3) с данным коэффициентом $\hat{\gamma}(t)$ в уравнении (1). В силу замечания 1 такое решение $\hat{u}(t, x)$ существует и единственно, причем $\hat{u}(t, x) \in W_q^{1,0}(Q)$.

Положим $\hat{\varphi}(t) = \int_0^l \hat{u}(t, x) \omega(x) dx$.

Повторяя рассуждения, проведенные при выводе соотношения (8), приходим к равенству

$$\hat{\varphi}'(t) + \hat{\gamma}(t) \hat{\varphi}(t) + \int_0^l a(t, x) \hat{u}_x \omega_x(x) dx + \int_0^l (b(t, x) \hat{u}_x + c(t, x) \hat{u}) \omega(x) dx = F(t). \quad (12)$$

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

С другой стороны, поскольку $\hat{\gamma}(t)$ – решение уравнения (11), то из определения оператора $\mathcal{A}(\gamma)$ в (10) имеем

$$\varphi'(t) + \hat{\gamma}(t) \varphi(t) + \int_0^l a(t, x) \hat{u}_x \omega_x(x) dx + \int_0^l (b(t, x) \hat{u}_x + c(t, x) \hat{u}) \omega(x) dx = F(t). \quad (13)$$

Положим $\psi(t) = \varphi(t) - \hat{\varphi}(t) \in W_2^1(0, T)$. Вычитая (12) из (13) и учитывая условие согласования в (G), получаем, что $\psi(t)$ является на $[0, T]$ обобщенным решением задачи

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

В силу известной леммы Гронуолла (см., например, [10, с. 112]) имеем отсюда, что $\psi(t) \equiv 0$ на $[0, T]$, т.е. $\hat{\varphi}(t) = \varphi(t)$ на $[0, T]$ а следовательно, пара $\{\hat{u}(t, x), \hat{\gamma}(t)\}$ есть обобщенное решение обратной задачи (1)–(4). Лемма доказана.

Лемма 2. Пусть выполнены условия (А) – (G). Пусть $\tau_0 \in (0, T]$ удовлетворяет неравенствам

$$\left(K_c + \frac{1}{2}K_{b,a}\right)\tau_0 \leq \frac{1}{16}, \quad (14)$$

$$\frac{1}{\Phi_0} \left\{ K_\phi^* + K_\omega K_f + \left[a_2 a_0^{1/2} K_\omega^* + K_\omega K_{b,a}^{1/2} + 2K_c K_\omega \tau_0^{1/2} \right] \times \left[M_0^2 + 2K_f^2 \tau_0 \right]^{1/2} \right\} \leq \frac{1}{16\tau_0^{1/2}}. \quad (15)$$

Положим

$$R_0 = \frac{1}{16\tau_0^{1/2}}. \quad (16)$$

Тогда оператор $\mathcal{A}$, определенный формулой (10), является сжимающим оператором, переводящим шар B_{R_0} в пространстве $L_2(0, T)$ в себя.

Доказательство. В силу определения оператора $\mathcal{A}$ и условий (А) – (G) для любого $\tau \in (0, T]$ справедливо неравенство

$$\begin{aligned} \|\mathcal{A}(\gamma)\|_{L_2(0,\tau)} &\leq \frac{1}{\Phi_0} \left\{ \|\phi'\|_{L_2(0,\tau)} + \|F\|_{L_2(0,\tau)} + \left[\int_0^\tau \left(\int_0^l \frac{a(t,x)}{\Lambda_0(x)} \sqrt{\Lambda_0(x)} u_x \sqrt{\Lambda_0(x)} \omega_x dx \right)^2 dt \right]^{1/2} + \right. \\ &\quad \left. + \left[\int_0^\tau \left(\int_0^l \frac{b(t,x)}{\sqrt{\Lambda_0(x)}} \sqrt{\Lambda_0(x)} u_x \omega dx \right)^2 dt \right]^{1/2} + \left[\int_0^\tau \left(\int_0^l c(t,x) u \omega dx \right)^2 dt \right]^{1/2} \right\} \leq \\ &\leq \frac{1}{\Phi_0} \left\{ K_\phi^* + K_\omega K_f + \left[a_2 a_0^{1/2} K_\omega^* + K_\omega K_{b,a}^{1/2} \right] \times \left[\int_{Q_\tau} \Lambda_0(x) |u_x|^2 dx dt \right]^{1/2} + K_c K_\omega \tau^{1/2} \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|u(t, \cdot)\|_2 \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

Пусть τ_0 удовлетворяет неравенству (14), а R_0 соотношению (16). Тогда для этого R_0 выполняется неравенство (13) (при $R_0 = K_\gamma$) из работы [11], а следовательно, в силу неравенства (12) из работы [11]

$$\sup_{0 \leq t \leq \tau_0} \|u(t, \cdot)\|_2^2 \leq 4M_0^2 + 8K_f^2 \tau_0, \quad (18)$$

$$\|\sqrt{\Lambda_0} u_x\|_{L_2(Q_{\tau_0})}^2 \leq M_0^2 + 2K_f^2 \tau_0. \quad (19)$$

Подставляя (18) и (19) в (17), получаем

$$\begin{aligned} \|\mathcal{A}(\gamma)\|_{L_2(0,\tau_0)} &\leq \frac{1}{\Phi_0} \left\{ K_\phi^* + K_\omega K_f + \left(a_2 a_0^{1/2} K_\omega^* + K_\omega K_{b,a}^{1/2} \right) \times \left(M_0^2 + 2K_f^2 \tau_0 \right)^{1/2} + K_c K_\omega \tau_0^{1/2} \left(4M_0^2 + 8K_f^2 \tau_0 \right)^{1/2} \right\} = \\ &= \frac{1}{\Phi_0} \left\{ K_\phi^* + K_\omega K_f + \left(a_2 a_0^{1/2} K_\omega^* + K_\omega K_{b,a}^{1/2} + 2K_c K_\omega \tau_0^{1/2} \right) \times \left(M_0^2 + 2K_f^2 \tau_0 \right)^{1/2} \right\}, \end{aligned}$$

откуда в силу неравенства (15) для любого $\gamma \in B_{R_0}$

$$\|\mathcal{A}(\gamma)\|_{L_2(0,\tau_0)} \leq R_0.$$

Таким образом, оператор $\mathcal{A}$ переводит шар B_{R_0} в себя. Докажем, что этот оператор является сжимающим в шаре B_{R_0} .

Пусть $u^{(1)}(t, x)$ и $u^{(2)}(t, x)$ – соответствующие решения прямой задачи (1)–(3). Положим $v(t, x) = u^{(1)}(t, x) - u^{(2)}(t, x)$, $\theta(t) = \gamma^{(1)}(t) - \gamma^{(2)}(t)$. Тогда пара $\{v(t, x), \theta(t)\}$ удовлетворяет соотношению

$$v_t - (a_{ij}(t, x)v_x)_x + b(t, x)v_x + c(t, x)v + \gamma^{(1)}(t)v = -\theta(t)u^{(2)}(t, x), \quad (t, x) \in Q, \quad (20)$$

и краевым условиям

$$v(0, x) = 0, \quad x \in [0, l]; \quad v(t, 0) = v(t, l) = 0, \quad t \in [0, T], \quad (21)$$

в смысле определения 1.

Тогда в силу определения оператора $\mathcal{A}$ в (10) и условий (A) – (G) имеем, что для любого $\tau \in (0, T]$

$$\begin{aligned} \|\mathcal{A}(\gamma^{(1)}) - \mathcal{A}(\gamma^{(2)})\|_{L_2(0,\tau)} &\leq \frac{1}{\varphi_0} \left\{ \left[\int_0^T \left(\int_0^l \frac{a(t, x)}{\Lambda_0(x)} \sqrt{\Lambda_0(x)} v_x \sqrt{\Lambda_0(x)} \omega_x dx \right)^2 dt \right]^{1/2} + \right. \\ &+ \left[\int_0^T \left(\int_0^l \frac{b(t, x)}{\sqrt{\Lambda_0(x)}} \sqrt{\Lambda_0(x)} v_x \omega dx \right)^2 dt \right]^{1/2} + \left[\int_0^T \left(\int_0^l c(t, x) v \omega dx \right)^2 dt \right]^{1/2} \Big\} \leq \\ &\leq \frac{1}{\varphi_0} \left\{ [a_2 a_0^{1/2} K_\omega^* + K_\omega K_{b,a}^{1/2}] \cdot \|\sqrt{\Lambda_0} v_x\|_{L_2(Q_\tau)} + K_c K_\omega \tau^{1/2} \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|v(t, \cdot)\|_2 \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

Пусть $\tau = \tau_0$ удовлетворяет условиям (14) и (15). Поскольку функция $v(t, x)$ удовлетворяет соотношениям (20) и (21), то в силу оценки (12) из работы [11], примененной к функции $v(t, x)$, имеем

$$\sup_{0 \leq t \leq \tau_0} \|v(t, \cdot)\|_2^2 \leq 8\tau_0 \sup_{0 \leq t \leq \tau_0} \|u^{(2)}(t, \cdot)\|_2^2 \cdot \|\theta\|_{L_2(0,\tau_0)}^2 \leq 8\tau_0 (4M_0^2 + 8K_f^2 \tau_0) \|\theta\|_{L_2(0,\tau_0)}^2 \quad (23)$$

и

$$\|\sqrt{\Lambda_0} u_x\|_{L_2(Q_{\tau_0})}^2 \leq 2\tau_0 \sup_{0 \leq t \leq \tau_0} \|u^{(2)}(t, \cdot)\|_2^2 \cdot \|\theta\|_{L_2(0,\tau_0)}^2 \leq 2\tau_0 (4M_0^2 + 8K_f^2 \tau_0) \|\theta\|_{L_2(0,\tau_0)}^2. \quad (24)$$

В оценках (23) и (24) использованы оценки (18) и (19).

Подставляя (23) и (24) в (22), получаем

$$\|\mathcal{A}(\gamma^{(1)}) - \mathcal{A}(\gamma^{(2)})\|_{L_2(0,\tau_0)} \leq \frac{2\sqrt{2}}{\varphi_0} \tau_0^{1/2} [a_2 a_0^{1/2} K_\omega^* + K_\omega K_{b,a}^{1/2} + 2K_c K_\omega \tau_0^{1/2}] \cdot (M_0^2 + 2K_f^2 \tau_0)^{1/2} \|\theta\|_{L_2(0,\tau_0)},$$

откуда из условия (15) следует, что

$$\|\mathcal{A}(\gamma^{(1)}) - \mathcal{A}(\gamma^{(2)})\|_{L_2(0, \tau_0)} \leq \frac{\sqrt{2}}{8} \|\gamma^{(1)} - \gamma^{(2)}\|_{L_2(0, \tau_0)},$$

что и означает сжимаемость оператора $\mathcal{A}$ в шаре B_{R_0} . Лемма 2 доказана.

Теорема 1. Пусть выполнены условия (A)–(G). Пусть $\tau_0 \in (0, T]$ удовлетворяет неравенствам (14) и (15), а R_0 определено равенством (16). Тогда обратная задача (1)–(4) имеет обобщенное решение $\{u(t, x), \gamma(t)\}$ в прямоугольнике Q_{τ_0} в смысле определения 1 с $s = q^*$, где q^* определено в (8), причем для него справедлива оценка

$$\|\gamma\|_{L_2(0, \tau_0)} \leq R_0. \quad (25)$$

Более того, обобщенное решение обратной задачи (1)–(4), для которого выполнена оценка (26), является единственным.

Доказательство. В силу леммы 2 оператор $\mathcal{A}$ является сжимающим, переводящим шар B_{R_0} в себя. Поэтому уравнение (11) однозначно разрешимо в B_{R_0} и его решение $\gamma(t)$ удовлетворяет оценке (25). В силу леммы 1 тогда существует единственное обобщенное решение $\{u(t, x), \gamma(t)\}$ обратной задачи (1)–(4) в прямоугольнике Q_{τ_0} с $s = q^*$. Теорема 1 доказана.

Замечание 2. В теореме 1 установлена единственность обобщенного решения обратной задачи (1)–(4), для которого $\gamma(t)$ удовлетворяет оценке (25). На самом деле единственность решения обратной задачи (1)–(4) справедлива без этого условия и во всем прямоугольнике Q .

Теорема 2. Пусть выполнены условия (A)–(G). Тогда обобщенное решение обратной задачи (1)–(4) является единственным во всем прямоугольнике Q .

Доказательство. Пусть обратная задача (1)–(4) имеет в Q два обобщенных решения $\{u^{(1)}(t, x), \gamma^{(1)}(t)\}$ и $\{u^{(2)}(t, x), \gamma^{(2)}(t)\}$. Положим $v(t, x) = u^{(1)}(t, x) - u^{(2)}(t, x)$, $\theta(t) = \gamma^{(1)}(t) - \gamma^{(2)}(t)$. Тогда пара $\{v(t, x), \theta(t)\}$ является обобщенным решением обратной задачи для уравнения (20) с краевыми условиями (21) и с дополнительным условием

$$\int_0^l v(t, x) \omega(x) dx = 0, \quad t \in [0, T]. \quad (26)$$

Данная обратная задача является обратной задачей по определению неизвестной функции $p(t) \equiv \theta(t) \in L_2(0, T)$, рассмотренной в [11]. Для этой обратной задачи выполнены все условия теоремы 3 из [11]. Согласно данной теореме задача (20), (21), (26) имеет единственное нулевое решение в Q .

Таким образом, $u^{(1)}(t, x) = u^{(2)}(t, x)$, $\gamma^{(1)}(t) = \gamma^{(2)}(t)$ и теорема 2 доказана.

Заключение

В работе доказаны теоремы существования и единственности обобщенного решения обратной задачи определения неизвестного коэффициента поглощения в вырождающемся параболическом уравнении с дивергентной главной частью. Ранее близкие результаты при аналогичном типе вырождения были получены для обратной задачи определения неизвестной правой части в вырождающемся дивергентном параболическом уравнении.

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. Прилепко А.И., Орловский Д.Г. Об определении параметра эволюционного уравнения и обратных задачах математической физики I // Дифференциальные уравнения, 1985. Т. 21. № 1. С. 119–129.
2. Прилепко А.И., Орловский Д.Г. Об определении параметра эволюционного уравнения и обратных задачах математической физики II // Дифференциальные уравнения, 1985. Т. 21. № 4. С. 694–700.
3. 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.
4. 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.
5. Prilepko A.I., Orlovsky D.G., Vasin I.A. Methods for solving inverse problems in mathematical physics. New York: Marcel Dekker, 2000. 709 p.
6. Бухарова Т.И., Камынин В.Л. Обратная задача определения коэффициента поглощения в многомерном уравнении теплопроводности с неограниченными младшими коэффициентами // Журнал вычислит. матем. и матем. Физики, 2015. Т. 55. № 7. С. 75–87.
7. Kamynin V.L. Inverse problem of determining the absorption coefficient in a degenerate parabolic equation in the class of L_2 functions // Journal of math. Sciences, 2020. V. 250. № 2. С. 322–336.
8. Камынин В. Л. Обратная задача определения коэффициента поглощения в вырождающемся параболическом уравнении в классе L_∞ // Журнал вычислит. матем. и матем. физики, 2021. Т. 61. № 3. С. 413–427.
9. Kamynin V. L. Inverse problems of finding the lower term in a multidimensional degenerate parabolic equation // Journal of math. Sciences, 2023. V. 274. № 4. С. 493–510.
10. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уралцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М.: Наука, 1967, 736 с.
11. Камынин В.Л., Нагорнов О.В. Обратная задача определения функции источника в вырождающемся параболическом уравнении с дивергентной главной частью на плоскости // Вестник НИЯУ МИФИ, 2025. Т. 14. № 5. С. 414–423.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 6, pp. 516–524

Inverse problem of determining the absorption coefficient in a degenerate parabolic equation of divergent type with one spatial variable

V. L. Kamynin[✉], O. V. Nagornov[✉]

National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, 115409, Russia

[✉] vlkamynin2008@yandex.ru

[✉] nagornov@yandex.ru

Received September 26, 2025; revised October 29, 2025; accepted November 05, 2025

We study the nonlinear inverse problem of determining the unknown time-dependent absorption coefficient 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. Physically, this means, for example, measuring temperature with a finite-size sensor installed at an interior point of

the domain. The solution is understood in a generalized sense; in particular, the unknown absorption coefficient is sought in the space $L_2(0, T)$. The equation's coefficients can depend on both the time and space variables. Degeneracy of the equation is also allowed with respect to both time and space variables. The set of points of degeneracy may be infinite, but must have measure zero. The existence and uniqueness theorems for the solution are proved. The existence of the solution is proven for small T , while the uniqueness theorem is global in nature. Proving the existence of a solution to the inverse problem the latter is reduced to studying the solvability of a certain operator equation, and it is shown that under the conditions imposed in the paper, the operator is contractive.

Keywords: coefficient inverse problems, degenerate parabolic equations, integral observation.

References

1. *Prilepko A.I., Orlovsky D.G.* Ob opredelenii parametra evolyucionnogo uravneniya i obtatnyh zadachah matematicheskoi fiziki I. [On determination of a parameter in the evolution equation and inverse problems of mathematical physics I]. *Differencial'nye uravneniya*, 1985. Vol. 21. No. 1. Pp. 119–129 (in Russian).
2. *Prilepko A.I., Orlovsky D.G.* Ob opredelenii parametra evolyucionnogo uravneniya i obtatnyh zadachah matematicheskoi fiziki II. [On determination of a parameter in the evolution equation and inverse problems of mathematical physics II]. *Differencial'nye uravneniya*, 1985. Vol. 21. No. 4. pp. 694–700 (in Russian).
3. *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.
4. *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.
5. *Prilepko A.I., Orlovsky D.G., Vasin I.A.* Methods for solving inverse problems in mathematical physics. New York, Marcel Dekker, 2000. 709 p.
6. *Bukharova T.I., Kamynin V.L.* Obratnaya zadacha opredeleniya koeficienta poglosheniya v mnogomernom uravnenii teploprovodnosti s neogranichennymi mladshimi coefficientami. [Inverse problem of determining the absorption coefficient in the multidimensional heat equation with unlimited minor coefficients]. *Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki*, 2015. Vol. 55. No. 7. Pp. 75–87 (in Russian).
7. *Kamynin V.L.* Inverse problem of determining the absorption coefficient in a degenerate parabolic equation in the class of L_2 functions. *Journal of math. sciences*, 2020. Vol. 250. No 2. Pp. 322–336.
8. *Kamynin V.L.* Obratnaya zadacha opredeleniya koeficienta poglosheniya v vyrozhdayu-shemsya parabolicheskom uravnenii v klasse L_∞ . [Inverse problem of determining the absorption coefficient in a degenerate parabolic equation in the class L_∞]. *Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki*, 2021. Vol. 61. No. 3 Pp. 413–427 (in Russian).
9. *Kamynin V.L.* Inverse problems of finding the lower term in a multidimensional degenerate parabolic equation. *Journal of math. Sciences*, 2023. Vol. 274. No. 4. Pp. 493–510.
10. *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).
11. *Kamynin V.L., Nagornov O.V.* Obratnaya zadacha opredeleniya funktsii istochnika v vyrozhdayushemsya parabolicheskom uravnenii s divergentnoi glavnoi chast'yu na ploskosti. [Inverse problem of determining the source term in a degenerate parabolic equation with a divergent principal part on a plane]. *Vestnik NIYaU MIFI*, 2025. Vol. 14. No. 5. Pp. 414–423 (in Russian).

УДК 621.317.76, 534.134

Компьютерная модель системы амортизации перевозимого квантового водородного стандарта частоты и анализ отклика на ударное воздействие

© 2025 г. С. А. Боим¹, В. И. Васильев²

¹ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 15409, Россия

² ФГУП «ВНИИФТРИ», Менделеево, Московская обл., 141570, Россия

Водородный стандарт в настоящее время обладает самой высокой стабильностью и спектральной частотой сигнала. Перевозимые водородные стандарты частоты используются для сверхточного сличения удаленных друг от друга стандартов времени и частоты в тех случаях, когда использование оптоволоконной или радиосвязи, например системы ГЛОНАСС, недоступно. Перевозимые водородные стандарты частоты могут иметь погрешности в передаче шкалы времени и сетки частот, вызванные внешними воздействиями, например вибрациями, ударами, перепадами температур, магнитными полями. В работе рассматривались несколько вариантов ударных, т.е. кратковременных воздействий. Для защиты используются системы демпфирования и амортизации, но публикации по их эффективности на данный момент практически отсутствуют. В статье представлено создание компьютерной модели амортизационной платформы для перевозимого водородного стандарта частоты. Проведено сравнение вариантов модели системы амортизации с демпфирующими элементами из резины, силикона и полиуретана. Найдены собственные частоты колебаний для систем с демпфирующими элементами из различных материалов и рассмотрен отклик этих систем на ударное воздействие. Получены графики перемещений и ускорений, испытываемых перевозимым водородным стандартом частоты. Рассмотрена реакция системы при качке, при различных значениях коэффициента демпфирования и коэффициента жесткости демпфирующих элементов. Дана зависимость смещений системы при различном числе и расположении пружин. Моделированием доказано, что добавление демпфирующих блоков сверху и снизу в амортизационную платформу для перевозимого водородного стандарта частоты улучшит устойчивость системы к ударному воздействию.

Ключевые слова: водородный стандарт частоты и времени, амортизационная платформа, компьютерное моделирование.

Введение

Для работы высокотехнологичных научных, навигационных систем необходим источник стабильного и точного сигнала, в качестве которого выступает стандарт (или эталон) времени и частоты. На наиболее высокотехнологичных объектах могут быть собственные эталоны, но их стабильность и точность ограничена, им, в соответствии с регламентом, необходима регулярная поверка. Сравнение с Государственным эталоном времени и частоты по радиоканалу или с помощью оптоволоконной линии не всегда возможно, поскольку радиосвязь сильно зашумлена и сигнал, полученный по ней, требует усреднения на больших временах, а оптоволоконно проведено, на сегодняшний день, не везде [1]. Поэтому для сличения разнесенных в пространстве эталонов используются перевозимые стандарты частоты. Сегодня перевозимый водородный стандарт частоты и времени (ВСЧ) является наиболее востребованным для решения вышеописанной технической задачи благодаря своей высокой стабильности [2–7].

✉ С.А. Боим: boim.sergey@yandex.ru

Поступила в редакцию: 15.05.2025

После доработки: 08.10.2025

Принята к публикации: 21.10.2025

EDN NMRSYN

Но перевозимые стандарты частоты чувствительны к внешним возмущениям: перепадам температуры, изменению магнитного поля по пути следования и к механическим воздействиям. К механическим воздействиям чувствительна как физическая часть водородного стандарта, так радиотехнические узлы, например система автоподстройки частоты.

Традиционно для защиты перевозимых водородных стандартов частоты от механических воздействий создаются различные системы амортизации [3], но их эффективность до сих пор исследуется, и статей по данной теме практически нет. Таким образом, работа в данной области является актуальной.

В данном исследовании проводилось моделирование амортизационной платформы, изучались отклики модели на ударное воздействие и проводилась оптимизация системы амортизации.

Модель амортизационной платформы в программе COMSOL

Компьютерная модель амортизационной платформы разработана в программе COMSOL Multiphysics, являющейся пакетом для компьютерного моделирования и численной симуляции физических процессов. Программа имеет интуитивно понятный интерфейс, и достаточно точные результаты моделирования.

Для уменьшения объема вычислений по оптимизации амортизационной платформы в качестве водородного стандарта частоты использовалась модель абсолютно жесткого параллелепипеда с габаритами и массой аналогичными реальному прибору. Создание модели с реальной геометрией пружин связано с дополнительными трудностями. Количество степеней свободы подобной системы варьируется около 10^6 . Изображение подобной системы приведено на рис. 1,а. Для используемой модели вместо реальных пружин использовались амортизирующие цилиндры. Геометрия модели приведена на рис. 1,б. В качестве материала всей конструкции была выбрана стандартная сталь. Важно отметить, что задаются общие жесткость и коэффициент демпфирования для всех мест закрепления, а не для каждого места закрепления в отдельности. Это позволяет сохранять суммарную жесткость постоянной при изменении числа пружин, и избавляет нас от необходимости пересчитывать жесткость каждой отдельной пружины при изменении их числа.

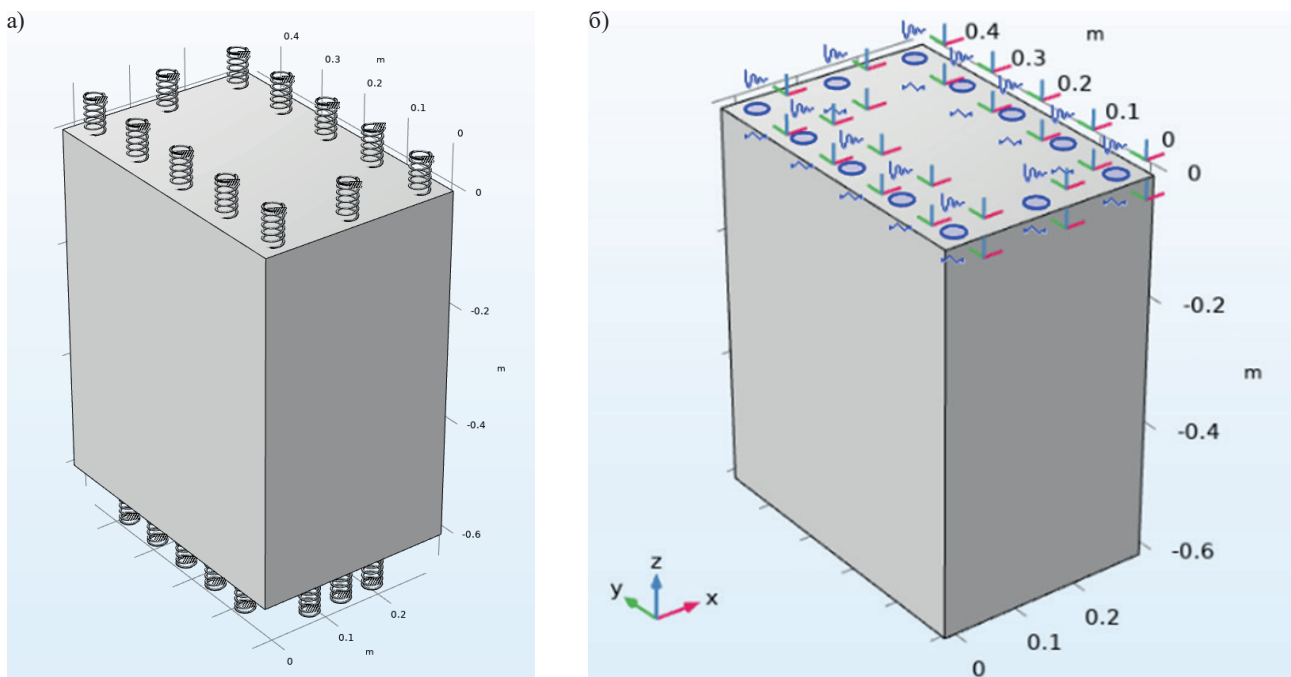


Рис. 1. Изображение компьютерной модели амортизационной платформы: а) – с пружинами, повторяющими геометрию настоящих; б) – с местами упругого закрепления вместо пружин (в нижней части также есть места закрепления пружин)

Пружины, в соответствии со своей геометрией, имеют анизотропные коэффициент жесткости и коэффициент демпфирования. Наша модель позволяет задать различные значения для жесткости и коэффициента демпфирования величин по всем трем осям, где важную роль играют продольная жесткость пружины – C , средний диаметр пружины – D , h_0 – высота пружины в свободном состоянии, расчетный статический прогиб пружины под нагрузкой – s_1 , диаметр прутка пружины – d , расчетная высота пружины в нагруженном состоянии – h_p , рассчитываемая по формуле: $h_p = h_0 - s_1 - d$. В данном случае поперечный коэффициент жесткости можно рассчитать по формуле¹:

$$C_q = \frac{2.62C}{0.05 \left(1 + 0.77 \left(\frac{h_p}{D} \right)^2 \right)}. \quad (1)$$

После создания трехмерной модели и задания всех ее физических свойств были проведены исследования характеристик и реакций модели.

Результаты

Исследование системы с пружинами. Первым проводилось исследование отклика системы на полусинусоидальный импульс. Были построены графики смещения блока ВСЧ в зависимости от суммарной жесткости пружин (рис. 2) и от коэффициента демпфирования (рис. 3).

Рассматривались смещения системы при наклонах (симулирование качки). В качестве наклонов использовалось изменение задания вектора ускорения свободного падения (и соответственно, импульса). Добавлялась компонента вектора по оси X и уменьшалась компонента по оси Z (вертикальной), чтобы сохранить модуль вектора постоянным. Результаты для наклонов в 0 (нет наклона), 30, 60 и 90 градусов приведены на рис. 4. Смещение продолжалось рассматриваться в направлении оси Z .

Было проведено исследование колебаний системы при различном числе пружин. На рис. 5 представлены графики колебаний для системы с 8 и 28 пружинами в логарифмическом масштабе. Блок считался уже не абсолютно жестким, а имел конечную жесткость, в 20 раз превышающую жесткость пружин.

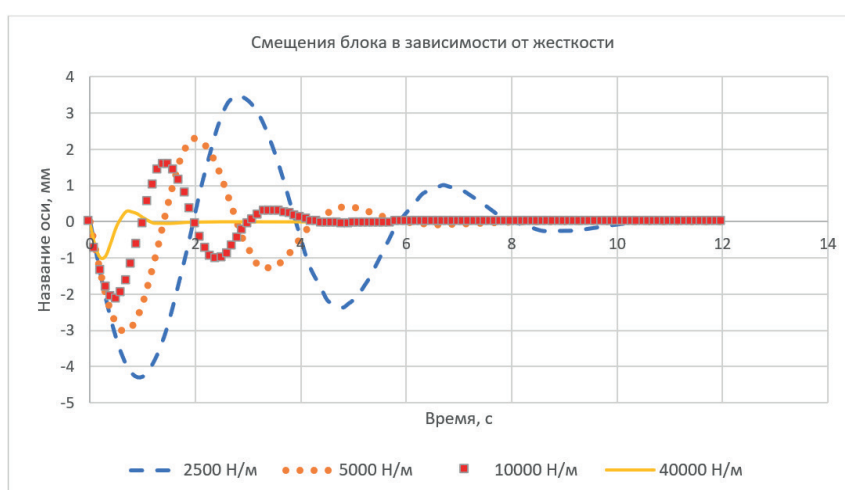


Рис. 2. Графики зависимости смещения блока от жесткости пружин

¹ В соответствии с ГОСТ Р 58397–2020. Пружины и комплекты пружинные рессорного подвешивания железнодорожного подвижного состава. Методы расчета на прочность при действии продольных и комбинированных нагрузок. М.: Стандартинформ, 2020. 13 с.

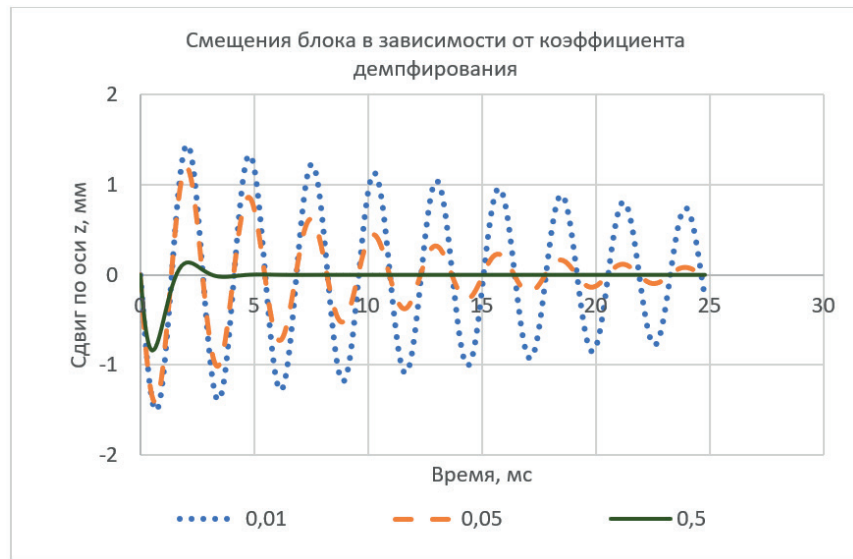


Рис. 3. Графики зависимости смещения блока от коэффициента демпфирования

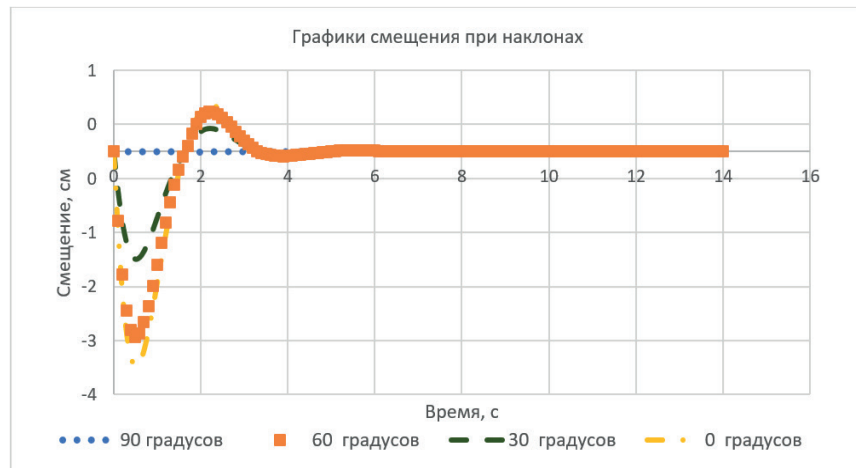


Рис. 4. Графики зависимости смещения блока от угла наклона

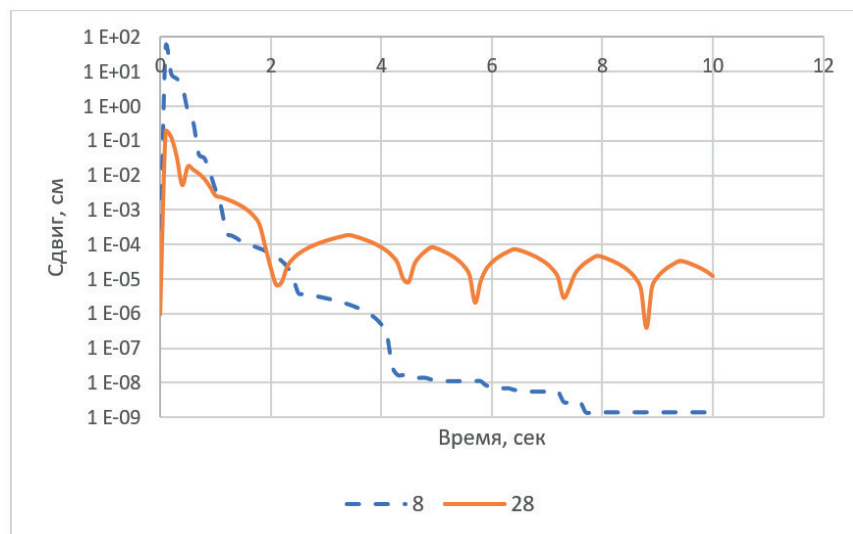


Рис. 5. Смещения блока для случая с 8 и 28 пружинами, масштаб логарифмический

Модификация системы. Пружины обладают относительно низким коэффициентом демпфирования. Таким образом, для защиты от внешних механических воздействий использование исключительно пружин может быть недостаточно. На практике к пружинам добавляются блоки из демпфирующих материалов. Они были добавлены в модель (рис. 6). Блоки на рисунке выделены синим цветом. Грани блоков жестко прикреплены к блоку перевозимого водородного стандарта частоты, а их противоположные грани жестко закреплены в пространстве. Материалы для блоков брались из стандартной библиотеки материалов COMSOL. При необходимости любой параметр материалов можно изменить вручную, задав таким образом любой необходимый материал, даже если его нет в библиотеке. Характеристики полиуретана² можно найти в работах [8, 9]. Использовались значения модуля Юнга 21 МПа, соотношения Пуассона 0.496.

Пружины все также присутствуют в модели как места упругого закрепления. Добавление блоков заметно влияет на собственные частоты колебаний системы. В табл. 1 приведены собственные частоты вертикальных колебаний модели для различных материалов, из которых изготавливались блоки. Изображение крайнего положения при вертикальных колебаниях системы с демпфирующими блоками приведено на рис. 7. Стоит отметить, что COMSOL изображает деформации и смещения увеличенными, чтобы мы могли их увидеть. В действительности ни одна точка на рисунке не сдвинута больше чем на доли миллиметра относительно положения равновесия, обозначенного прозрачным контуром. При необходимости COMSOL позволяет создать анимацию колебаний.

Анализ отклика системы с пружинами на вибрации и первичные экспериментальные исследования такой системы проведены в работе [10]. В представленной статье исследовались модификации амортизационной системы с добавлением демпфирующих блоков из различных материалов. В табл. 1 приведены собственные частоты колебаний таких систем. В дальнейшем значения этих собственных частот могут быть использованы для исследования откликов системы на вибрационное воздействие.

Нами рассматривался отклик таких систем на ударное воздействие для различных материалов демпфирующего элемента. Графики смещений приведены на рис. 8 в логарифмическом масштабе. Ло-

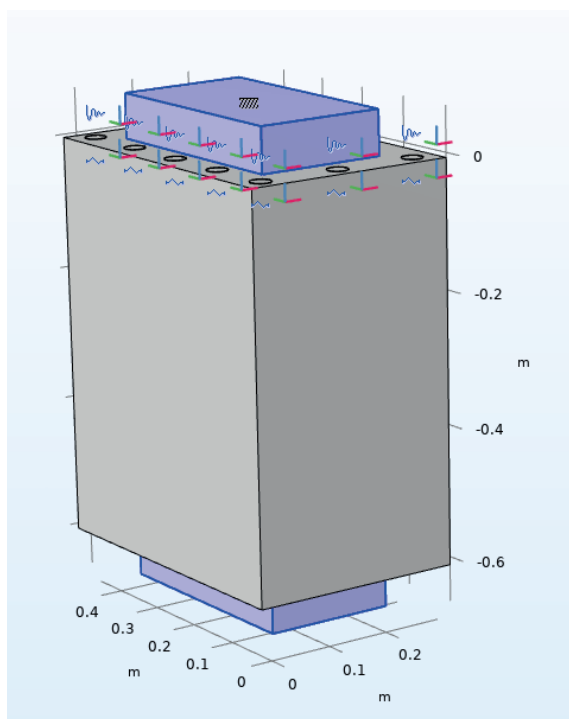


Рис. 6. Изображение модели системы с добавленными демпфирующими блоками

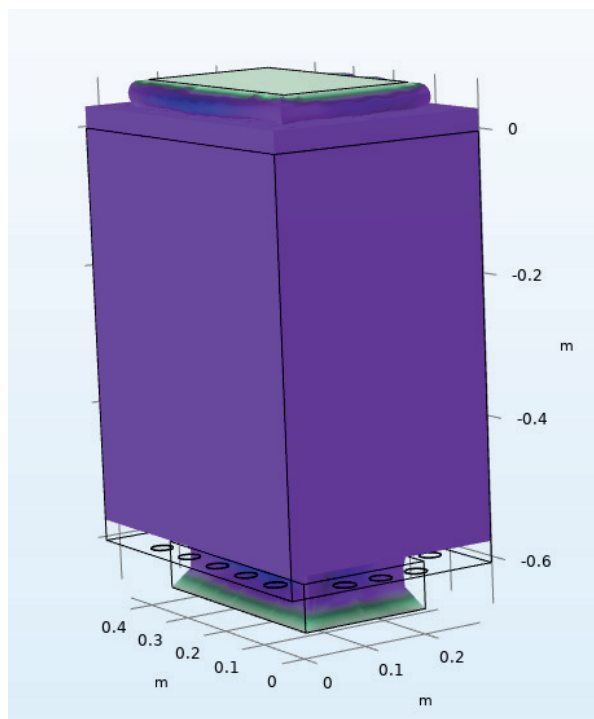


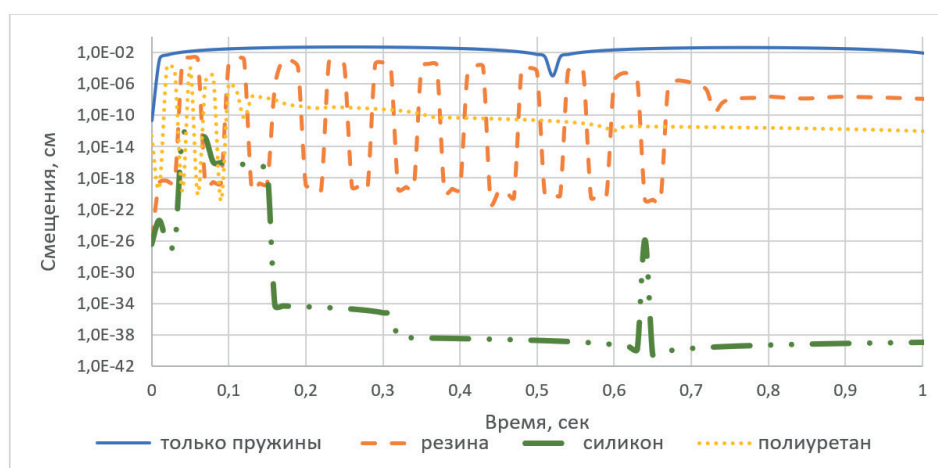
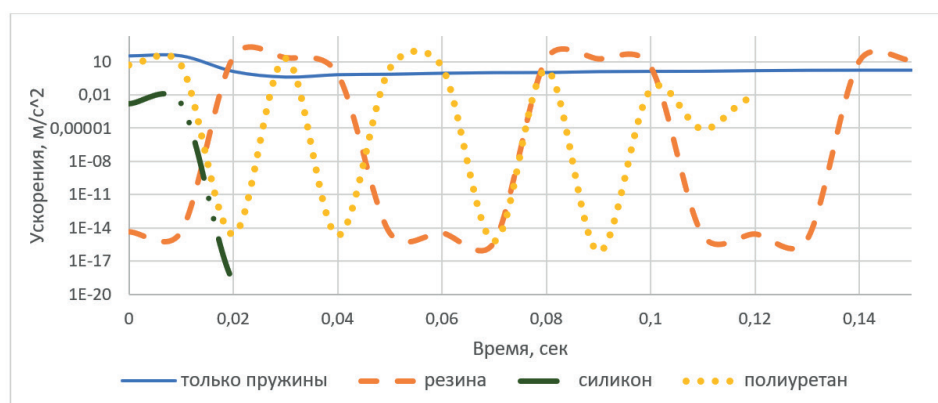
Рис. 7. Крайнее положение при вертикальных колебаниях системы с демпфирующими блоками

² ПолиПромДеталь – свойства полиуретана [Электронный ресурс]. URL: <https://polipromdetal.ru/svoystva-poliuretana/> / 2014 (дата обращения: 18.04.2025).

Таблица 1. Собственные частоты первой моды вертикальных колебаний для систем с демпфирующими блоками из различных материалов

Материал демпфирующих блоков	Собственная частота вертикальных колебаний, Гц
Система без демпфирующих блоков (только с пружинами)	1.3
Резина	16.5
Полиуретан	64.5
Силикон	3577.4

гарифмический масштаб был выбран, поскольку амплитуды колебаний в разных случаях по своей величине отличаются на несколько порядков. Графики ускорений корпуса ВСЧ приведены на рис. 9, также в логарифмическом масштабе. Обрывы графиков для силикона и полиуретана обусловлены тем, что нулевые и отрицательные значения не отображаются в логарифмическом масштабе.

**Рис. 8.** Графики смещений системы с демпфирующими блоками из различных материалов**Рис. 9.** Графики ускорений системы с демпфирующими блоками из различных материалов

Обсуждение. Эффективность системы амортизации определяется соотношением величин испытываемых ВСЧ ускорений при физических воздействиях. Реализованная математическая модель позволяет исследовать эффективность конструкции для разных вариантов построения системы амортизации перевозимого водородного стандарта частоты.

На рис. 2–3 приведены графики смещения корпуса ВСЧ при различных значениях коэффициента жесткости и демпфирования. Анализ графиков показывает, что чем больше жесткость системы, тем меньше амплитуда и период колебаний. С другой стороны, больший коэффициент демпфирования

обеспечивает более быстрое уменьшение колебаний. Эти результаты показывают, что компьютерная модель позволяет получить достоверные результаты [10].

На рис. 4 приведены смещения системы по оси Z при изменении направления вектора импульса, что является аналогом качки на воде. По графикам видно, что при увеличении угла смещение уменьшается, а в перпендикулярном направлении вектора ускорения свободного падения и оси рассмотрения смещений – смещение практически отсутствует.

Исследовалось поведение системы с различным числом пружин. На рис. 5 приведены смещения систем с 8 и 28 пружинами. Исследование показало, что большее число пружин более выгодно. В дальнейшем этот вопрос может быть изучен более подробно.

На рис. 8–9 приведены смещения и ускорения, которые испытывает блок ВСЧ при ударном воздействии полусинусоидальным импульсом. По графикам на рис. 8 видно, что смещения, которые будет испытывать ВСЧ, в случае использования в амортизационной платформе демпфирующих элементов будут меньше, чем при отсутствии этих элементов. Но если посмотреть на график ускорений, то очевидно, что ускорения, испытываемые корпусом ВСЧ при ударном воздействии для систем с резиновыми и полиуретановыми демпфирующими элементами, иногда принимают большие значения, чем для системы без демпфирующих элементов с пружинами. Объясняется это тем, что при применении демпфирующих элементов из разных материалов в ряде случаев можно увеличить суммарную жесткость системы амортизации. Система с большей жесткостью при ударе старается максимально быстро вернуться в положение равновесия, что создает дополнительное ускорение на коротких временах, что является нежелательным для ВСЧ. В соответствии с этим силикон показал наилучший результат среди рассмотренных материалов. Ускорения и смещения, которые испытывает ВСЧ при такой амортизации, меньше в 3–4 раза. Более мягкие силиконовые материалы легко деформируются и поглощают больше вибраций, чем твердые, их коэффициент демпфирования может принимать значения 0.1–0.3, что в 2 раза больше, чем у резины.

Заключение

Современные методы компьютерного моделирования позволяют решать задачи по оптимизации систем амортизации для различных целей. В работе приведено описание создания модели для перевозимого водородного стандарта частоты, но метод является универсальным и позволяет исследовать системы амортизации для любых целей.

Проведено исследование модели амортизационной платформы и предложены варианты модернизации с помощью добавления амортизационных блоков из различных материалов. Сделано сравнение эффективности различных материалов при защите от ударных воздействий.

Смещения, которые будет испытывать корпус ВСЧ, в амортизационной платформе, использующей демпфирующие блоки из любых рассмотренных материалов, будут меньше. Ускорения в данном случае также в среднем будут меньше, чем для системы просто с пружинами. Наименьшие ускорения система испытывала при использовании силикона. Ускорения и смещения, которые испытывает корпус ВСЧ при предложенной системе амортизации, меньше в 3–4 раза.

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

С.А. Боим – разработка математической модели и проведение на ее основе серии численных расчетов, первичная обработка результатов моделирования и сравнение с экспериментальными исследованиями, выявление закономерностей, обсуждение результатов, подбор литературных источников, подготовка текста и оформление статьи.

В.И. Васильев – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования, анализ полученных данных, обсуждение результатов, подбор литературных источников, редактирование текста статьи, подготовка заключения.

Список литературы

1. Жуков А.Н., Зотов С.М., Чурилов Н.С. Технология проведения оперативного дистанционного контроля точностных характеристик стандартов частоты и времени, входящих в составы беззапросных измерительных систем, по сигналам открытого доступа ГЛОНАСС // Альманах современной метрологии, 2022, № 1 (29). С. 63–70.
2. Смирнов Ф.Р., Жариков А.И. Эталон-переносчик нового поколения для высокоточного сравнения шкал времени // Альманах современной метрологии, 2018. № 15. С. 17–30.
3. Сысоев В.П., Самохвалов Ю.С., Васильев В.И. и др. Малогабаритный активный водородный стандарт частоты // Альманах современной метрологии, 2022. № 3 (32). С. 8–17.
4. Нагирный В.П., Нестеров Н.И., Овчинников С.Н. и др. Разработка перевозимых квантовых часов водородных нового поколения // Альманах современной метрологии, 2020. № 1 (21). С. 116–125.
5. Воронцов В.Г., Беляев А.А., Демидов Н.А., Поляков В.А., Сахаров Б.А. Перевозимые квантовые часы нового поколения на основе активного водородного стандарта частоты и времени // Доклады 9-го Международного симпозиума «Метрология времени и пространства», 2018. Менделеево: ФГУП «ВНИИФТРИ», 2019. С. 21–28.
6. Васильев В.И., Бобков Н.М. Мобильные часы высокой точности на основе пассивного водородного стандарта частоты и времени Ч1-76А // Доклады IX Всероссийской научно-технической конференции «Метрология в радиоэлектронике». Менделеево: ФГУП «ВНИИФТРИ», 2014. С. 260–263.
7. Dai J., Liu T., Cai Y., Chen Z., Li Q. Review of the development of the hydrogen maser technique and a brief introduction to its space applications. // *Frontiers in Physics*, 2022. V. 10. Art. id. 995361. DOI: 10.3389/fphy.2022.995361.
8. Яковлев С.Н. Расчет полиуретановых деталей, работающих на сжатие при статической нагрузке // Научно-технические ведомости СПбГПУ, 2014. Вып.1 (190). С. 137–142.
9. Громова Е.Г. Разработка и исследование технологии ротационной вырубki листовых деталей летательных аппаратов давлением полиуретана: автореф. Дис... канд. техн. наук. Самара, 2008. 8 с.
10. Боим С.А., Васильев В.И. Эффективность амортизационной платформы мобильного водородного стандарта частоты // XI Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии – ЛаПлаз-2025»: Сб. науч. трудов. М.: НИЯУ МИФИ, 2025. С. 333.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 6, pp. 525–533

Computer model of the shock absorption system of the transportable quantum hydrogen frequency standard and analysis of the response to impact

S. A. Boim^{1,✉}, V. I. Vasiliev²

¹ National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, 15409, Russia

² VNIIFTRI, Mendeleevo, Moscow Region, Russia

✉ boim.sergey@yandex.ru

Received May 15, 2025; revised October 8, 2025; accepted October 21, 2025

The hydrogen standard currently boasts the highest signal stability and spectral frequency. Transportable hydrogen frequency standards are used for ultra-precise comparisons of remote time and frequency standards in cases where fiber optics or radio communications, such as the GLONASS system, are unavailable. Transportable hydrogen frequency standards may exhibit errors in transmitting the time scale and frequency grid due to external influences, such as vibration, impact, temperature changes, and magnetic fields. Several impact, i.e., short-term impact scenarios, were considered in the study. Damping and shock absorption systems are used for protection, but publications on their effectiveness are currently virtually nonexistent. This article presents the creation of a computer model of a shock-

absorbing platform for transporting a hydrogen frequency standard. A comparison of shock-absorbing system models with damping elements made of rubber, silicone, and polyurethane is provided. Natural vibration frequencies were determined for systems with damping elements made of various materials, and their response to impact was examined. Graphs of displacements and accelerations experienced by the transported hydrogen frequency standard were obtained. The system's response to rocking was examined for various damping coefficients and damping element stiffness coefficients. The dependence of system displacements for different numbers and arrangements of springs was considered. Simulations demonstrated that adding damping blocks at the top and bottom of the shock-absorbing platform for the transported hydrogen frequency standard will improve the system's resistance to impact.

Keywords: hydrogen frequency and time standard, shock-absorbing platform, computer modeling.

References

1. Zhukov A.N., Zotov S.M., Churilov N.S. Tekhnologiya provedeniya operativnogo distancionnogo kontrolya tochnostnyh harakteristik standartov chastoty i vremeni, vkhodyashchih v sostavy bezzaprosnyh izmeritel'nyh sistem, po signalam otkrytogo dostupa GLONASS [Technology for conducting operational remote monitoring of the accuracy characteristics of frequency and time standards included in the composition of non-query measuring systems, using GLONASS open access signals]. *Al'manah sovremennoj metrologii*, 2022. No. 1 (29). Pp. 63–70 (in Russian).
2. Smirnov F.R., Zharikov A.I. Etalon-perenoschik novogo pokoleniya dlya vysokotochnogo sravneniya shkal vremeni [A new generation standard for high-precision comparison of time scales]. *Al'manah sovremennoj metrologii*, 2018. No. 15. Pp. 17–30 (in Russian).
3. Sysoev V.P., Samohvalov YU.S., Vasil'ev V.I. Malogabaritnyj aktivnyj vodorodnyj standart chastoty [Small-sized active hydrogen frequency standard]. *Al'manah sovremennoj metrologii*, 2022. No. 3(32). Pp. 8–17 (in Russian).
4. Nagirnyj V.P., Nesterov N.I., Ovchinnikov S.N. Razrabotka perevozimyh kvantovykh chasov vodorodnykh novogo pokoleniya [Development of a new generation of transportable hydrogen quantum clocks]. *Al'manah sovremennoj metrologii*, 2020. No. 1 (21). Pp. 116–125 (in Russian).
5. Voroncov V.G., Belyaev A.A., Demidov N.A., Polyakov V.A., Saharov B.A. Perevozimye kvantovye chasy novogo pokoleniya na osnove aktivnogo vodorodnogo standarta chastoty i vremeni [Next-generation transportable quantum clocks based on an active hydrogen frequency and time standard]. *Doklady 9-go Mezhhdunarodnogo simpoziuma «Metrologiya vremeni i prostranstva»*, 2018 [Proceedings of the 9th International Symposium «Metrology of Time and Space»]. Mendeleevo, FGUP «VNIIFTRI» Publ., 2019. Pp. 21–28 (in Russian).
6. Vasil'ev V.I., Bobkov N.M. Mobil'nye chasy vysokoj tochnosti na osnove passivnogo vodorodnogo standarta chastoty i vremeni CH1-76A [High-precision mobile clock based on the passive hydrogen frequency and time standard CH1-76A]. *Doklady IX Vserossijskoj nauchno-tekhnicheskoy konferencii «Metrologiya v radioelektronike»* [Reports of the IX All-Russian scientific and technical conference «Metrology in radio electronics»]. Mendeleevo: FGUP «VNIIFTRI», 2014. Pp. 260–263 (in Russian).
7. Dai J., Liu T., Cai Y., Chen Z., Li Q. Review of the development of the hydrogen maser technique and a brief introduction to its space applications. *Frontiers in Physics*, 2022. Vol. 10. Art. id. 995361. DOI: 10.3389/fphy.2022.995361.
8. Yakovlev S.N. Raschet poliuretanovykh detalej, rabotayushchih na szhatie pri staticheskoj nagruzke [Calculation of polyurethane parts operating in compression under static load]. *Nauchno- tekhnicheskie vedomosti SPbGPU. Iss. 1 (190)*. Pp. 137–142 (in Russian).
9. Gromova E.G. Razrabotka i issledovanie tekhnologii rotacionnoj vyrubki listovykh detalej letatel'nykh apparatov davleniem poliuretana: avtoref. Dis... kand. tekhn. nauk. [Development and study of technology for rotary cutting of sheet parts of aircraft using polyurethane pressure: author's note. Dis... cand. tech. sciences]. Samara, 2008. 8 p.
10. Boim S.A., Vasiliev V.I. Effektivnost' amortizacionnoj platformy mobil'nogo vodorodnogo standarta chastoty [Efficiency of the shock-absorbing platform of a mobile hydrogen frequency standard]. *XI Mezhhdunarodnaya konferenciya «Lazernye, plazmennye issledovaniya i tekhnologii – LaPlaz-2025»*: Sb. nauch. trudov. [XI International Conference «Laser, Plasma Research and Technologies – LaPlaz-2025»: Collection of scientific papers]. Moscow, NIYaU MIFI Publ., 2025. Pp. 333 (in Russian).

УДК 54.027 546.112

Методы квантовой молекулярной динамики для моделирования свойств веществ в экстремальной области

© 2025 г. А. С. Смаль, Ю. А. Богданова, А. А. Егоров

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

Рассмотрены теоретические основы методов квантовой молекулярной динамики и теории функционала плотности (DFT), реализованные в программном пакете Quantum ESPRESSO. Основное внимание уделено применению этих методов для атомистического моделирования свойств веществ в экстремальных условиях. Проведены расчеты энергии диссоциации изотопов водорода (H_2 , D_2 , T_2), показавшие хорошее согласие со справочными данными. Также выполнено моделирование процесса адсорбции водорода на поверхности алюминия и рассчитана энергия адсорбции, значение которой свидетельствует о термодинамической устойчивости образующейся системы. Верификация методики проведена на примере адсорбции воды на поверхности гидрида лития, что подтвердило ее точность. Полученные результаты имеют практическое значение для водородной энергетики, катализа и разработки новых материалов. Работа выполнена с использованием вычислительных инструментов, включая VESTA, Avogadro и BURAI, применение этих инструментов обеспечило достоверность результатов моделирования, наглядность представления данных и эффективность всего вычислительного цикла.

Ключевые слова: квантовая молекулярная динамика, теория функционала плотности (DFT), Quantum ESPRESSO, энергия диссоциации, изотопы водорода, адсорбция водорода, алюминий, поверхностные явления, энергия связи.

Введение

Исследование свойств веществ представляет собой важную научную задачу, имеющую практическое значение для развития ключевых областей современной науки и технологий, включая материаловедение, энергетику, катализ и нанотехнологии. Получение точных данных о физико-химических характеристиках материалов позволяет разрабатывать новые функциональные материалы с заданными свойствами, оптимизировать существующие технологические процессы и создавать инновационные устройства.

Среди современных методов исследования особое место занимают методы вычислительных экспериментов [1], которые являются незаменимым инструментом в изучении веществ на атомарном и молекулярном уровнях. В данной работе применяются методы компьютерного моделирования, в частности теория функционала плотности (DFT) [2], реализованная в программном пакете Quantum ESPRESSO¹. Данный метод позволяет с высокой точностью исследовать электронную структуру веществ, процессы адсорбции и поведение материалов в экстремальных условиях, преодолевая ограничения классических методов молекулярной динамики.

¹ Quantum ESPRESSO. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.quantum-espresso.org> (дата обращения 20.06.2025).

✉ А.С. Смаль: ASSmal@mephi.ru

Поступила в редакцию: 03.09.2025

После доработки: 07.10.2025

Принята к публикации: 21.10.2025

EDN PGHXDX

Квантовая молекулярная динамика

В основе описания динамики частиц лежит уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (1)$$

где Ψ – многоэлектронная волновая функция. Для стационарных состояний основная задача квантовой механики сводится к решению стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H} \Psi = E \Psi, \quad (2)$$

где $\hat{H}$ – гамильтониан системы; E – полная энергия электронов и ядер; $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n)$ – волновая функция частиц (электронов и ядер).

Предполагая ядра неподвижными (метод Борна – Оппенгеймера) [3], можно записать оператор Гамильтона как

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|r_i - R_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}, \quad (3)$$

где $\hat{U}$ описывает электрон-электронное взаимодействие; оператор $\hat{T}$ – кинетическую энергию электронов, а оператор $\hat{V}$ – потенциальную энергию взаимодействия электронов с ядрами.

Основное отличие задачи одного тела от многочастичной системы состоит в том, что в последней появляется дополнительное слагаемое $\hat{U}$, отвечающее за взаимное влияние электронов друг на друга. Этот член существенно усложняет расчеты, так как требует учета обменно-корреляционных эффектов и делает невозможным точное аналитическое решение без применения приближенных методов.

Теория функционала плотности

Для решения многоэлектронного уравнения Шредингера существует множество методов, основанных на представлении волновой функции в виде определителя Слейтера [4]. Наиболее простым из них является метод Хартри – Фока [2, 5]. Однако все эти подходы требуют высокие вычислительные мощности, что существенно ограничивает их применение и накладывает большие ограничения на размер исследуемых систем.

Метод теории функционала плотности (density functional theory – DFT) [2] основан на принципиально ином подходе, позволяющем преодолеть эти ограничения. Вместо работы с многочастичной волновой функцией метод DFT сводит задачу многих тел с электрон-электронным взаимодействием к эффективной одночастичной задаче.

Математическое обоснование DFT базируется на двух фундаментальных теоремах, доказанных Хоэнбергом и Коном [5, 6, 7]. Эти теоремы устанавливают взаимосвязь между электронной плотностью $n(\mathbf{r})$ и свойствами основного состояния многоэлектронной системы.

Первая теорема доказывает, что свойства основного состояния многоэлектронной системы определяются только электронной плотностью, зависящей от трех координат. Данная теорема сводит задачу об описании многоэлектронной системы из N электронов с $3N$ пространственными координатами к описанию функционала электронной плотности с тремя координатами. Более того теорема устанавливает, что полная энергия системы E может быть выражена как функционал от плотности

$$E[n(\mathbf{r})] = \Psi | \hat{H} | \Psi = F[n(\mathbf{r})] + \int v_{en}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (4)$$

Вторая теорема представляет собой вариационный принцип квантовой механики, сформулированный для функционала плотности, и утверждает, что минимум энергии системы, записанной как функционал плотности $F[n(\mathbf{r})]$, равен энергии основного состояния.

Функционал энергии может быть записан как эффективный функционал плотности частиц в одночастичной системе

$$F[n(\mathbf{r})] = \hat{T}[n(\mathbf{r})] + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + \varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})], \quad (5)$$

где электронная плотность $n(\mathbf{r})$ определяется выражением:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\phi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (6)$$

Первый член правой части в уравнении (5) является кинетической энергией одночастичного состояния:

$$\hat{T}[n(\mathbf{r})] = \sum_i \phi_i \left| -\frac{\nabla_r^2}{2} \right| \phi_i. \quad (7)$$

Второй член уравнения (5) представляет собой электростатическое кулоновское отталкивание между электронами с коэффициентом $1/2$ из-за двойного счета, а $\varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})]$ – обменно-корреляционный функционал, который содержит все остальные вклады в энергию многих тел электронов.

Подставляя уравнение (5) в уравнение (4), получаем значение полной энергии:

$$E[n(\mathbf{r})] = \hat{T}[n(\mathbf{r})] + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + \varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})] + \int v_{en}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (8)$$

которую, согласно второй теореме, необходимо минимизировать для получения энергии основного состояния. На изменение электронной плотности накладывается условие сохранения общего числа электронов:

$$\int \delta n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0. \quad (9)$$

С использованием множителя Лагранжа ϵ_i и ограничением в уравнении (9) получаем уравнение Кона – Шэма в виде:

$$\left\{ -\frac{\nabla_r^2}{2} + v_{eff}[n(\mathbf{r})] \right\} \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}), \quad (10)$$

где значение для эффективного потенциала $v_{eff}[n(\mathbf{r})]$ задается как

$$v_{eff}[n(\mathbf{r})] = v_{en}(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{\delta \varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})}. \quad (11)$$

Здесь первый член в правой части уравнения $v_{en}(\mathbf{r})$ – внешний потенциал, обусловленный ионами, второй член – потенциал Хартри v_H , последнее слагаемое является вариационной функциональной производной обменно-корреляционного взаимодействия $\varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})]$.

Последний член уравнения (11) определяется как обменно-корреляционный потенциал:

$$v_{xc}[n(\mathbf{r})] = \frac{\delta \varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})}. \quad (12)$$

Основная проблема, связанная с методом DFT, заключается в том, что точные аналитические выражения для функционалов обменной и корреляционной энергии (12) известны только для частного случая газа свободных электронов. Тем не менее существуют приближения, позволяющие рассчитать ряд физических величин с достаточной точностью.

Предполагая, что с помощью приближений известно $\varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})]$, уравнение Кона – Шэма (10) можно решить методом самосогласованного поля (SCF) [7] в соответствии со следующими этапами:

- 1 – выбор начального приближения для электронной плотности $n(\mathbf{r})$;
- 2 – расчет потенциалов с использованием значения электронной плотности;
- 3 – решение уравнение Кона – Шэма, определение собственных функций и собственных значений одночастичного гамильтониана;
- 4 – расчет новой электронной плотности по волновым функциям;
- 5 – выполнение итераций 1–4 до желаемой точности.

На рис. 1 приведена наглядная блок-схема решения уравнения Кона – Шэма.

Такой подход реализован во многих современных вычислительных пакетах, включая Quantum ESPRESSO². Для ускорения расчетов в этих программах используются специальные приемы: базис плоских волн, позволяющий эффективно вычислять производные, и псевдопотенциалы, упрощающие описание электронов вблизи ядер. Также применяются методы параллельных вычислений для работы с большими системами.

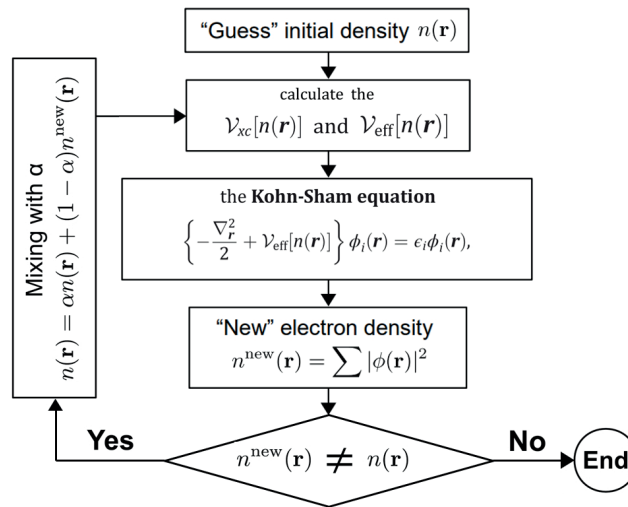


Рис. 1. Блок-схема метода самосогласованного поля для решения уравнения Кона – Шэма

² Quantum ESPRESSO. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.quantum-espresso.org> (дата обращения 20.06.2025).

Энергия диссоциации изотопов водорода

Молекулы водорода H_2 , дейтерия D_2 и трития T_2 представляют собой простые двухатомные системы, что позволяет верифицировать квантово-химический подход для решения поставленных задач. Хотя электронная структура этих молекул идентична, поскольку изотопы имеют одинаковый заряд ядра, различие в массах ядер приводит к существенным изменениям в их колебательно-вращательных спектрах. Это, в свою очередь, влияет на энергию диссоциации молекул.

В данном исследовании расчеты были выполнены в программном пакете Quantum ESPRESSO с использованием функционала PBE [7] в рамках теории функционала плотности. Для определения равновесной конфигурации системы и энергии связи проводилось варьирование межатомных расстояний.

На рис. 2 представлена зависимость энергии молекул водорода H_2 , дейтерия D_2 и трития T_2 от межатомного расстояния. Минимумы на результирующей представленной зависимости соответствуют равновесным длинам связей и энергиям диссоциации. На оси абсцисс графика отложено межатомное расстояние, а на оси ординат – энергия, полученная из расчетов. Энергия приведена в единицах ридберг (1 Ry $\approx$ 13.6 эВ), а расстояние в ангстремах (Å).

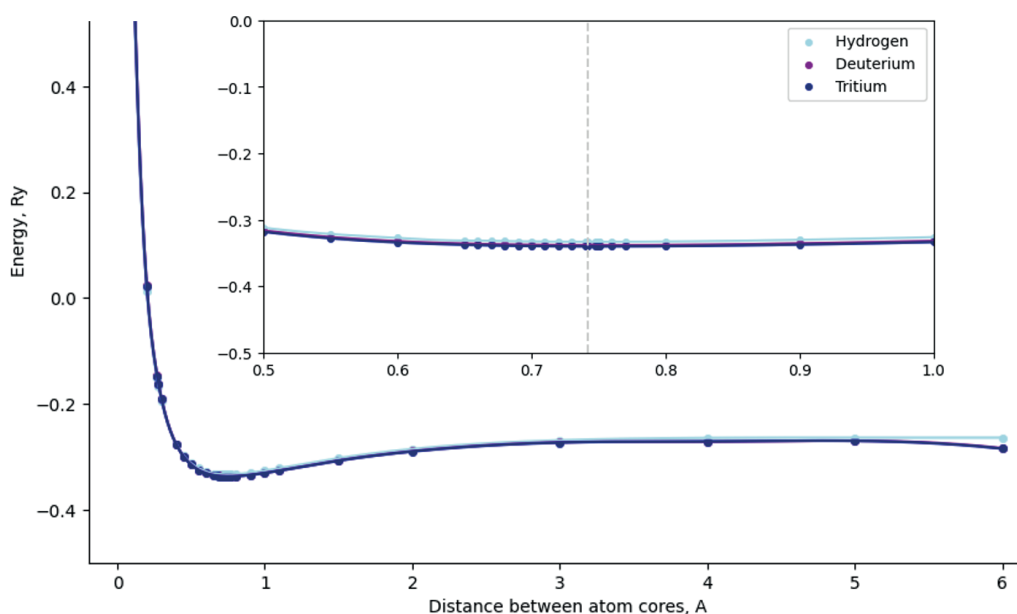


Рис. 2. График зависимости энергии атомов молекул водорода H_2 , дейтерия D_2 и трития T_2 от расстояния между ядрами

В табл. 1 приведены полученные численные результаты и сравнение их со справочными данными [8, 9].

Результаты табл. 1 демонстрируют, что длина связи в молекулах водорода H_2 , дейтерия D_2 и трития T_2 остается примерно одинаковой из-за их сходной химической структуры, а энергия связи отличается. Чем больше абсолютное значение энергии связи, тем прочнее связь и стабильнее конфигурация.

В табл. 2 представлена статистика отклонений максимального среднего значений полученных результатов со справочными данными [8, 9].

Из табл. 2 видно, что результаты моделирования в данной работе согласуются со справочными данными в пределах 3.1 %.

Поверхностные явления. Адсорбция

После рассмотрения химических свойств водорода и его изотопов перейдем к анализу процессов поверхностной адсорбции на металлах, в частности на поверхности алюминия.

Таблица 1. Численные результаты расчетов энергии и длины связи водорода и его изотопов

Молекула	Quantum ESPRESSO		[8]		[9]	
	Длина связи, Å	Энергия, эВ	Длина связи, Å / δ, %	Энергия, эВ / δ, %	Длина связи, Å / δ, %	Энергия, эВ / δ, %
H ₂	0.7452	4.335	0.7416 0.49	4.477 3.2	0.74158 0.48	4.477 3.1
D ₂	0.7465	4.682	0.7416 0.66	4.555 2.8	0.74165 0.65	4.556 2.9
T ₂	0.7473	4.731	0.7416 0.78	4.588 3.1	0.7417 0.75	4.591 3.0

Таблица 2. Статистика отклонений рассчитанных значений энергии и длины связи в сравнении с данными [8, 9]

Источник справочных данных	δ, % (длина связи)	δ, % (энергия связи)
среднее значение модуля отклонения, %		
[8]	0.64	3.2
[9]	0.63	3.0
максимальное значение модуля отклонения, %		
[8]	0.78	3.2
[9]	0.75	3.1

Данное направление исследований имеет высокую значимость для современной науки и технологий [10], поскольку понимание механизмов взаимодействия позволяет разрабатывать новые материалы с улучшенными характеристиками, включая коррозионную стойкость и механическую прочность. Полученные результаты могут найти применение в создании эффективных систем хранения и транспортировки водорода, а также в разработке катализаторов для водородной энергетики.

В настоящей работе моделирование адсорбции водорода на поверхности алюминия проводилось с использованием методов квантовой молекулярной динамики и теории функционала плотности. Для расчетов применялись следующие программные средства: Quantum ESPRESSO для DFT расчетов, VESTA³ и Avogadro⁴ для визуализации и построения кристаллических структур, BURAI⁵ – графический интерфейс для Quantum ESPRESSO, упрощающий подготовку входных данных и анализ результатов.

Верификация методики. Для проверки корректности вычислительной методики проведена ее верификация на примере адсорбции воды H₂O на поверхности гидрида лития LiH. Данная система выбрана в качестве тестовой, поскольку для нее имеется набор экспериментальных и теоретических данных [11].

Начальное расстояние между атомом кислорода молекулы воды и поверхностью LiH было установлено равным 2.15 Å. После оптимизации геометрии с использованием функционала PBE структура молекулы воды сохранилась близкой к равновесной (рис. 3).

Энергия адсорбции определялась как разность энергии между взаимодействующей системой (молекулой воды на поверхности гидрида лития) и невзаимодействующими структурами (отдельно водой и поверхностью гидрида лития):

$$E_{ads}^{DFT} = E_{H_2O-LiH(periodic)}^{DFT} - E_{H_2O(isolated)}^{DFT} - E_{LiH(periodic)}^{DFT}. \quad (13)$$

Энергетические характеристики системы рассчитывались с использованием пакета Quantum ESPRESSO в рамках теории функционала плотности. Для удобства подготовки входных параметров,

³ VESTA. [Электронный ресурс]. URL: <https://jp-minerals.org/vesta/en/download.html> (дата обращения 20.06.2025).

⁴ Avogadro. [Электронный ресурс]. URL: <https://avogadro.cc/docs> (дата обращения 20.06.2025).

⁵ BURAI. [Электронный ресурс]. URL: <https://nisihara.wixsite.com/burai> (дата обращения 20.06.2025).

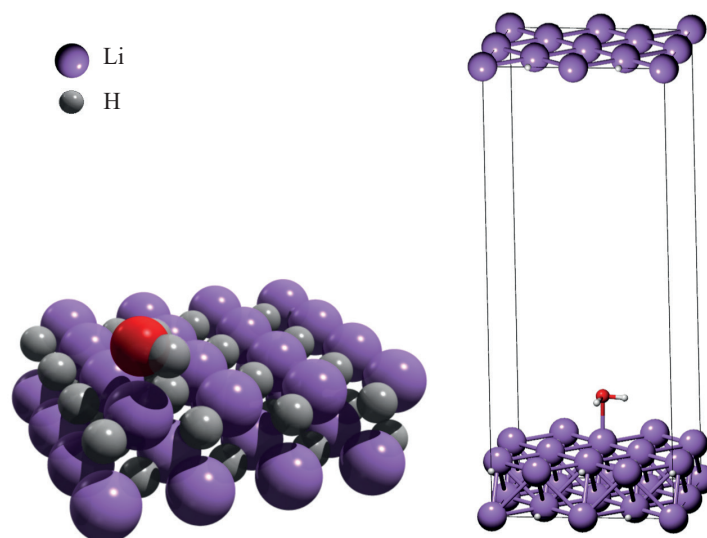


Рис. 3. Геометрия адсорбции воды на двухслойной пластине LiH

Таблица 3. Результаты расчета энергии

Система	Энергия, эВ
$E_{\text{H}_2\text{O}-\text{LiH}(\text{periodic})}^{\text{DFT}}$	–4137.667
$E_{\text{LiH}(\text{periodic})}^{\text{DFT}}$	–3538.29
$E_{\text{H}_2\text{O}(\text{isolated})}^{\text{DFT}}$	–599.15
$E_{\text{ads}}^{\text{DFT}}$	–0.223

запуска расчетов и обработки данных применялся графический интерфейс BURAI. Полученные значения энергии взаимодействия для исследуемых систем представлены в табл. 3.

Значение энергии адсорбции, полученное в результате моделирования в данной работе, согласуется со значением $E_{\text{ads}}^{\text{DFT}} = -0.219$ эВ [11] в пределах 2 %. Таким образом, полученные результаты позволяют считать методику верифицированной и готовой для применения в анализе других структур.

Расчет энергии адсорбции водорода на поверхности алюминия. Расчет энергии адсорбции молекулярного водорода на поверхности алюминия (рис. 4) был выполнен в рамках теории функционала плотности с использованием программного пакета Quantum ESPRESSO. Моделирование проводилось на поверхности алюминия с гранцентрированной кубической (FCC) решеткой, для чего была создана периодическая суперъячейка размером $3 \times 3 \times 3$, содержащая 126 атомов алюминия. Чтобы исключить нежелательное взаимодействие между периодическими изображениями системы вдоль направления, перпендикулярного поверхности (z -ось), был добавлен вакуумный зазор высотой 10.5 Å. Молекулы водорода размещались на расстоянии 1 Å от поверхности алюминия в наиболее энергетически выгодных позициях, соответствующих потенциальным сайтам адсорбции. Перед расчетом энергии адсорбции была проведена полная релаксация геометрии системы, включая оптимизацию позиций атомов и параметров решетки.

Энергия адсорбции определялась как разность энергии между взаимодействующей системой (молекулами водорода на поверхности алюминия) и невзаимодействующими структурами (отдельно водородом и поверхностью алюминия). Формула для расчета энергии адсорбции имела вид:

$$E_{\text{ads}}^{\text{DFT}} = E_{\text{H}_2-\text{Al}(\text{periodic})}^{\text{DFT}} - E_{\text{Al}(\text{isolated})}^{\text{DFT}} - E_{\text{H}_2(\text{periodic})}^{\text{DFT}}. \quad (14)$$

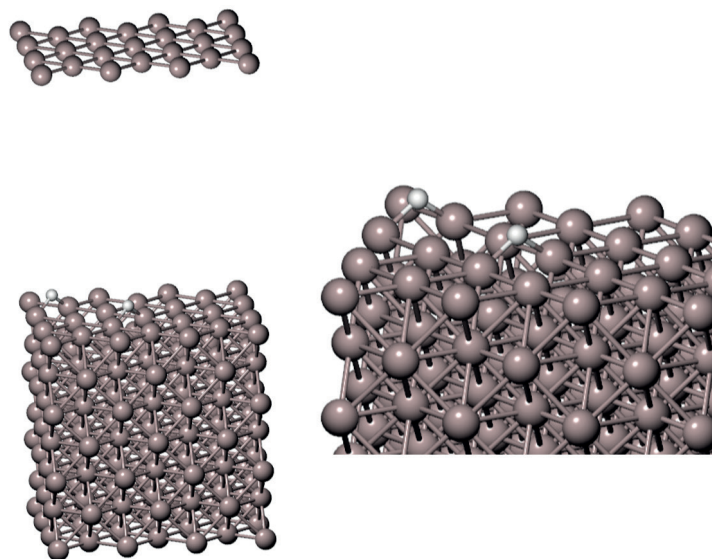


Рис. 4. Визуализация модели взаимодействия поверхности алюминия Al с молекулами водорода в программном пакете BURAI

В табл. 4 представлены результаты расчета энергии взаимодействия молекулы водорода с поверхностью алюминия.

Таблица 4. Результаты расчета энергии

Система	Энергия, эВ
$E_{\text{H}_2-\text{Al}(\text{periodic})}^{\text{DFT}}$	–8652.331
$E_{\text{Al}(\text{isolated})}^{\text{DFT}}$	–8619.669
$E_{\text{H}_2(\text{periodic})}^{\text{DFT}}$	–31.481
$E_{\text{ads}}^{\text{DFT}}$	0.919

Результаты расчетов показали, что энергия адсорбции водорода на поверхности алюминия составляет 0.919 эВ, что свидетельствует о термодинамической выгодности процесса и устойчивости образующейся системы. Для поверхности алюминия различные исследования предсказывают значения энергии адсорбции в диапазоне 0.8–1.2 эВ в зависимости от покрытия поверхности и наличия дефектов.

Заключение

В данной статье представлены результаты исследования свойств веществ с использованием методов квантовой молекулярной динамики и теории функционала плотности. Основное внимание уделено расчету энергии диссоциации изотопов водорода (H_2 , D_2 , T_2) и энергии адсорбции водорода на поверхности алюминия. Применение программного пакета Quantum ESPRESSO позволило получить точные данные, которые хорошо согласуются с экспериментальными и теоретическими результатами.

Практическая значимость исследования заключается в возможности использования алюминиевых материалов для водородной энергетики и катализа, а также в разработке новых функциональных материалов с улучшенными свойствами. В дальнейшем предложенная методика может быть применена для изучения более сложных систем и оптимизации их характеристик.

Таким образом, работа демонстрирует эффективность методов квантовой молекулярной динамики для моделирования свойств веществ, открывая новые перспективы для научных и технологических приложений, в том числе для исследования механических свойств конструкционных материалов.

Финансирование

Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект 8 «Физика изотопов водорода», направление 8.1 «Исследования в области взаимодействия изотопов водорода с твердым телом»).

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

А.С. Смаль – разработка методик расчета; проведение численных расчетов; обработка результатов; участие в проведении исследования и обсуждении результатов; подготовка текста статьи.

Ю.А. Богданова – формулировка идеи и целей исследования; постановка задачи; выбор методов исследования; участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

А.А. Егоров – обзор литературных источников; разработка методик расчета; обработка результатов; участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

Список литературы

1. Богданова Ю.А., Маклашова И.В., Трофимова А.Д., Егоров А.А. Моделирование свойств переноса изотопов гелия и водорода методами термодинамики и молекулярной динамики // Вестник НИЯУ МИФИ, 2024. V. 13. № 1. С. 40–51. DOI : 10.26583/vestnik.2024.285.
2. Koch W., Holthausen M.C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. 2nd ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2002. 293 p. DOI: 10.1002/3527600043.
3. Born M., Oppenheimer R. Zur Quantentheorie der Molekeln // Annalen der Physik, 1927. V. 84. P. 457–484. DOI: 10.1002/andp.19273892002.
4. Pavarini E., Koch E., Schollwöck U. Emergent Phenomena in Correlated Matter: Lecture Notes of the Autumn School Correlated Electrons 2013. Forschungszentrum Jülich, 2013. 527 p. ISBN 978-3-89336-884-6.
5. Parr R.G., Yang W. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford: Oxford University Press, 1994. 352 p.
6. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Physical Review, 1965. V. 140. № 4A. P. A1133–A1138.
7. Hung N.T., Nugraha A.R.T., Saito R. Quantum ESPRESSO Course for Solid-State Physics. New York: Jenny Stanford Publishing, 2022. 372 p. DOI: 10.1201/9781003290964.
8. Справочник химика / под ред. Никольского Б.П. М.–Л.: ГНТИ Химической литературы, 1962. Т. 1. 1072 с.
9. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание. М.: Наука, 1981. 352 с.
10. Peng Z., Shuangxi W., Jian Zh., Chaohui H., Ping Z. First-principles study of H₂ adsorption and dissociation on Zr (0001) // Journal of Nuclear Materials, 2011. V. 418. Iss. 1–3. P. 159–164. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2011.06.029.
11. Tsatsoulis. T., Hummel. F., Usvyat. D., Schütz. M., Booth. G.H., Binnie. S.S., Gillan. M.J., Alfè. D., Michaelides. A., Grüneis. A. A comparison between quantum chemistry and quantum Monte Carlo techniques for the adsorption of water on the (001) LiH surface // Journal of Chemical Physics, 2017. V. 146 (20). Art. id. 204108. DOI: 10.1063/1.4984048.

Methods of quantum molecular dynamics for modeling the properties of substances in the extreme range

A. S. Smal[✉], Yu. A. Bogdanova, A. A. Egorov

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

[✉] ASSmal@mephi.ru

Received September 3, 2025; revised October 7, 2025; accepted October 21, 2025

The theoretical foundations of quantum molecular dynamics and density functional theory (DFT) methods implemented in the Quantum ESPRESSO software package are considered. The main attention is paid to the application of these methods for the atomistic modeling of the properties of substances under extreme conditions. The dissociation energy of hydrogen isotopes (H_2 , D_2 , T_2) was calculated, which showed good agreement with the reference data. The hydrogen adsorption process on the aluminum surface was also modeled and the adsorption energy was calculated, the value of which indicates the thermodynamic stability of the resulting system. The verification of the technique was carried out using the example of water adsorption on the surface of lithium hydride, which confirmed its accuracy. The results obtained are of practical importance for hydrogen energy, catalysis, and the development of new materials. The work was performed using computational tools, including VESTA, Avogadro and BURAI, the use of these tools ensured the reliability of the simulation results.

Keywords: quantum molecular dynamics, density functional theory (DFT), Quantum ESPRESSO, dissociation energy, hydrogen isotopes, hydrogen adsorption, aluminum, surface phenomena, binding energy.

References

1. Bogdanova Yu.A., Maklashova I.V., Trofimova A.D., Egorov A.A. Modelirovanie svoystv perenosa izotopov geliya i vodoroda metodami termodinamiki i molekulyarnoy dinamiki [Modeling of the properties of helium and hydrogen isotope transfer by thermodynamic and molecular dynamics methods]. Vestnik NIYaU MIFI, 2024. Vol. 13. No. 1. P. 40–51 (in Russian). DOI : 10.26583/vestnik.2024.285.
2. Koch W., Holthausen M.C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. 2nd ed. Weinheim, Wiley-VCH, 2002. 293 p. DOI: 10.1002/3527600043.
3. Born M., Oppenheimer R. Zur Quantentheorie der Molekeln. Annalen der Physik, 1927. Vol. 84. Pp. 457–484. DOI: 10.1002/andp.19273892002.
4. Pavarini E., Koch E., Schollwöck U. Emergent Phenomena in Correlated Matter: Lecture Notes of the Autumn School Correlated Electrons 2013. Forschungszentrum Jülich, 2013. 527 p.
5. Parr R.G., Yang W. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford, Oxford University Press, 1994. 352 p.
6. Kohn W., Sham L.J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. Physical Review, 1965. Vol.140. no. 4A. Pp. A1133–A1138.
7. Hung N.T., Nugraha A.R.T., Saito R. Quantum ESPRESSO Course for Solid-State Physics. New York, Jenny Stanford Publishing, 2022. 372 p. DOI: 10.1201/9781003290964.
8. Spravochnik himika / pod red. Nikol'skogo B.P. [Chemist's Handbook ed. by Nikolsky B.P.]. Moscow–Leningrad, GNTI Khimicheskoi literatury Publ., 1962. Vol. 1. 1072 p.
9. Gurvich L.V., Veits I.V., Medvedev V.A. et al. Termodinamicheskie svoystva individual'nyh veshchestv: Spravochnoe izdanie [Thermodynamic properties of individual substances: Reference publication]. Moscow, Nauka Publ. 352 p.
10. Peng Z., Shuangxi W., Jian Zh., Chaohui H., Ping Z. First-principles study of H_2 adsorption and dissociation on Zr (0001). Journal of Nuclear Materials, 2011. Vol. 418. Iss. 1–3. Pp.159–164. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2011.06.029
11. Tsatsoulis T., Hummel F., Usvyat D., Schütz M., Booth G.H., Binnie S.S., Gillan M.J., Alfè. D., Michaelides. A., & Grüneis. A. A comparison between quantum chemistry and quantum Monte Carlo techniques for the adsorption of water on the (001) LiH surface. Journal of Chemical Physics, 2017. Vol. 146 (20). Art. id. 204108. DOI: 10.1063/1.4984048.

УДК 004.62

Схемы интерполяции оптимальных значений параметров вентиляционного потока в зависимости от значений показателей пациента при искусственной вентиляции легких

© 2025 г. С. Г. Климанов¹, А. В. Крянев^{1,2}, А. А. Котляров³, Д. С. Смирнов¹, И. В. Сопенко³,
В. А. Трикозова¹, Д. Д. Царева¹

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

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, 141980, Россия

³ Обнинский институт атомной энергетики – филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»», г. Обнинск, Калужская область, 249039, Россия

В статье на основе базы исходных данных успешного лечения пациентов предлагаются две схемы интерполяции оптимальных значений параметров вентиляционного потока при искусственной вентиляции легких (ИВЛ) рассматриваемого пациента. На математическом уровне выбор оптимальных значений параметров вентиляционного потока в зависимости от значений показателей текущего состояния пациента является задачей многомерного нелинейного регрессионного анализа. Первая схема основана на применении математического аппарата искусственных нейронных сетей. Вторая схема основана на применении математического аппарата метрического анализа, созданного на кафедре прикладной математики МИФИ и в настоящее время используемого при математической обработке данных и решения задач оптимизации в различных прикладных областях. Реализация обеих схем позволяет использовать накопленные данные по успешному лечению пациентов на аппаратах ИВЛ аналогичных заболеваний легких для рассматриваемого конкретного пациента. Обе схемы позволяют в процессе лечения пациента адаптировать оптимальные значения параметров вентиляционного потока к текущим показаниям пациента, подключенного к аппарату ИВЛ. В дальнейшем планируется совместное объединенное использование этих двух схем интерполяции для получения более точного и надежного конечного результата решения вышеуказанной задачи оптимальной интерполяции.

Ключевые слова: искусственная вентиляция легких, показания пациентов, интерполяция, оптимальные значения параметров вентиляционного потока.

Введение

Искусственная вентиляция легких (ИВЛ) – жизненно важная медицинская технология, используемая при различных патологических состояниях, сопровождающихся дыхательной недостаточностью. Эффективность ИВЛ напрямую зависит от правильного выбора параметров вентиляции, которые должны соответствовать индивидуальным особенностям пациента и характеру его заболевания [1].

Традиционные подходы к настройке параметров ИВЛ основаны на стандартизированных протоколах, которые не всегда учитывают индивидуальные особенности пациентов. Это может приводить к развитию таких осложнений, как баротравма, волютравма, ателектравма и биотравма [2]. Кроме того, существует проблема очень большого числа заболеваний, при которых требуется использование

✉ А. В. Крянев: AVKryanov@mephi.ru

Поступила в редакцию: 29.09.2025

После доработки: 27.10.2025

Принята к публикации: 05.11.2025

EDN PQVMTB

ИВЛ, и для каждого диагноза оптимальная программа управления режимами ИВЛ может существенно различаться [3].

Искусственные нейронные сети в последние годы находят широкое применение в медицине. Так нейронные сети активно применяются для анализа медицинских изображений с целью диагностики различных заболеваний [4], помогают разрабатывать индивидуальные планы лечения, учитывая особенности каждого пациента [5] и решения таких различных задач обработки медицинской информации [6], как заполнение и ведение медицинской документации, анализ генетических данных и прогнозирование эпидемиологических вспышек.

С развитием цифровой медицины и накоплением больших массивов клинических данных появилась возможность разработки более совершенных методов персонализации параметров ИВЛ. В данной статье предлагаются схема интерполяции оптимальных значений параметров вентиляционного потока на основе искусственных нейронных сетей и вторая схема, основанная на разрабатываемом в МИФИ математическом аппарате метрического анализа [7–11], позволяющая адаптировать параметры вентиляции к индивидуальным потребностям конкретного пациента.

Анализ применения нейросетевых технологий в научной литературе

Примеры нейросетевой интерполяции в медицинских публикациях. В работе [12] предложен метод интерполяции медицинских изображений с использованием рекуррентных нейронных сетей с нечеткой логикой второго типа (RT2FNN). Данный подход демонстрирует превосходство над традиционными методами интерполяции. Метод успешно применяется для преобразования 2D-изображений в 3D-реконструкции в различных областях медицинской визуализации: МРТ головного мозга, КТ брюшной полости и нанотомографии.

В исследовании [13] предложена архитектура искусственной нейронной сети для решения задачи построения интерполяционных формул для удвоения размера изображений. Обученная модель получает в качестве аргумента матрицу размера 4×4 , а результатом работы является интерполяционная формула, представленная в виде весового вектора для четырех точек. Сравнительный анализ показал, что предложенный подход имеет лучшее качество интерполяции по сравнению с методами New Edge-Directed Interpolation и Directional Cubic Convolution Interpolation.

В работе [14] нейронная сеть, разработанная для интерполяции видеокадров, применяется для улучшения томографических изображений across different length scales. Метод демонстрирует эффективность в различных областях:

- исследование морфологии напечатанных сетей графеновых нанолитов;
- магнитно-резонансная томография головного мозга человека;
- рентгеновская компьютерная томография брюшной полости.

Данный подход позволяет достичь изотропного разрешения вокселей и сохранить информационное содержание при сокращении времени acquisition.

Анализ существующих подходов и методов в области машинного обучения к управлению аппаратами искусственной вентиляции легких. В статье [15] рассматривается нейронная сеть с прямым распространением сигнала (FFNN) для подбора эффективных параметров управления аппаратом ИВЛ, для больных с хронической обструктивной болезнью легких и пневмонией. В качестве исходных данных использовались данные мониторинга аппаратов ИВЛ с неназванного госпиталя в Тайване. FFNN классифицировала пациентов по трем состояниям и подбирала контрольные параметры вентилятора (дыхательный объем, частота дыхания, соотношение вдох/выдох) на основе диагностированного состояния. Для проверки работоспособности модели авторами был разработан имитатор в среде Simulink.

В работе [16] рассматривались пациенты с острыми респираторными расстройствами, требующими механической вентиляции в отделении интенсивной терапии. Исследование представляет алгоритм VentAI, который с помощью обучения с подкреплением динамически оптимизирует параметры ИВЛ для критически больных пациентов, используя показатели смертности в качестве оптимизационной метрики. Использовался алгоритм обучения с подкреплением (Reinforcement Learning, RL) на основе Q-learning с применением k-means кластеризации для выявления групп состояний пациентов и марковский процесс принятия решений (MDP) с состоянием, действием, наградой и переходом состояний.

Данные для обучения и валидации модели были взяты из базы Medical Information Mart for Intensive Care III (MIMIC-III), а также датасета eICU Collaborative Research Database v2.0.

В статье [17] описано применение искусственного легкого для получения синтетических данных на основе манипуляций с параметрами сопротивления и эластичности легкого. Исследователи тестировали девять различных комбинаций состояний этих параметров для создания датасета. Используется рекуррентная нейронная сеть (RNN) типа Long Short-Term Memory (LSTM). LSTM выбрана для работы с временными рядами, так как она способна учитывать долгосрочные зависимости в последовательностях данных, что критично для моделирования дыхательных циклов. Нейросеть использовалась для предсказания давления в дыхательном контуре и обучалась на минимизацию абсолютного среднего отклонения (MAE) от данных, полученных на искусственном легком.

В работе [18] рассматривались критически больные пациенты в отделении интенсивной терапии с дыхательной недостаточностью, требующие искусственной вентиляции легких. Основное внимание уделяется асинхрониям – нарушениям синхронизации между дыхательными усилиями пациента и работой аппарата ИВЛ. Используется модифицированная U-Net архитектура, адаптированная для обработки одномерных сигналов (временных рядов), для сегментации временных меток начала и конца вдоха пациента.

Математическая постановка задачи интерполяции

Формализация задачи многомерной интерполяции. Задача интерполяции оптимальных значений параметров вентиляционного потока при ИВЛ формализуется как проблема многомерной нелинейной регрессии. Математически это может быть представлено как восстановление неизвестной функции $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ по конечному набору наблюдений:

$$\vec{y} = f(\vec{x}) + \epsilon,$$

где $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ – вектор показателей пациента; $\vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T \in \mathbb{R}^m$ – вектор оптимальных параметров ИВЛ; ϵ – случайная ошибка измерения.

Формализация параметров пациента

Входной вектор $\vec{x}$ включает группы параметров.

1. Антропометрические данные:

$$\text{должная масса тела } m_{\text{долж}} = \frac{50 + 0.91 \times (h - 152.4)}{0.1}, \text{ где } h - \text{рост, см;}$$

$$\text{избыточная масса тела } m_{\text{изб}} = m_{\text{факт}} - m_{\text{долж}}.$$

2. Показатели дыхательной системы:

$$\text{должная торакопульмональная растяжимость } C_{\text{долж}} = 0.1 \times m_{\text{долж}};$$

$$\text{должное сопротивление дыхательных путей } R_{\text{долж}} = 0.03 \times m_{\text{долж}}.$$

3. Газообменные параметры:

отношение парциального давления кислорода в артериальной крови к фракции кислорода во вдыхаемой смеси – $\text{PaO}_2/\text{FiO}_2$;

парциальное давление углекислого газа в артериальной крови – PaCO_2 ;

водородный показатель артериальной крови – pH;

насыщение гемоглобина кислородом – SpO_2 .

Выходные параметры ИВЛ. Выходной вектор $\vec{y}$ содержит оптимизируемые параметры вентиляции:

$$\vec{y} = (V_t, f, PEEP, \text{FiO}_2, T_i, \text{Flow})_{\text{норм}},$$

где V_t – дыхательный объем, мл; f – частота дыхания, вдохов/мин; $PEEP$ – положительное давление в конце выдоха, см. вод. ст.; FiO_2 – фракция кислорода во вдыхаемой смеси, %; T_i – время вдоха, с; $Flow$ – скорость потока газа на вдохе, л/мин.

Далее рассматриваются нейросетевые подходы к интерполяции параметров ИВЛ.

Архитектура нейронной сети для интерполяции. Для решения задачи интерполяции параметров ИВЛ предлагается использовать многослойный перцептрон (MLP) иначе называемый сетью прямого распространения (FFNN) с L скрытыми слоями. Архитектура сети описывается следующими уравнениями:

$$\begin{aligned}\bar{z}^{(0)} &= \bar{x}, \\ \bar{a}^{(l)} &= W^{(l)}\bar{z}^{(l-1)} + \bar{b}^{(l)}, \quad l=1, \dots, L, \\ \bar{z}^{(l)} &= \sigma(\bar{a}^{(l)}), \quad l=1, \dots, L, \\ \bar{y} &= W^{(L+1)}\bar{z}^{(L)} + \bar{b}^{(L+1)},\end{aligned}\tag{1}$$

где $W^{(l)}$ – матрица весового слоя; $\bar{b}^{(l)}$ l – вектор смещений l -го слоя; σ – функция активации (ReLU, th и др.).

Функция потерь и регуляризация. Для обучения нейронной сети используется функционал качества, включающий функцию потерь и регуляризационные слагаемые:

$$J(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(\bar{y}_i, f(\bar{x}_i; \theta)) + \lambda R(\theta),\tag{2}$$

где $L(\bar{y}, \hat{\bar{y}})$ – функция потерь (среднеквадратичная ошибка); $L(\bar{y}, \hat{\bar{y}}) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (y_j - \hat{y}_j)$; $R(\theta)$ – регуляризатор; λ – коэффициент регуляризации.

Методы оптимизации и борьбы с переобучением. Для обучения нейронной сети применяется адаптивный моментный метод (Adam), который сочетает преимущества алгоритмов RMSProp и Momentum:

$$\begin{aligned}m_t &= \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t, \\ v_t &= \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2, \\ \hat{m}_t &= \frac{m_t}{1 - \beta_1^t}, \\ \hat{v}_t &= \frac{v_t}{1 - \beta_2^t}, \\ \theta_{t+1} &= \theta_t - \alpha \frac{\hat{m}_t}{\sqrt{\hat{v}_t} + \epsilon},\end{aligned}\tag{3}$$

где g_t – градиент функции потерь на шаге t ; β_1, β_2 – параметры экспоненциального затухания; α – скорость обучения; ϵ – малая константа для обеспечения численной устойчивости.

Для борьбы с переобучением используются следующие методы:

1. Регуляризация методом исключения. На этапе обучения каждый нейрон исключается с вероятностью p .
2. Пакетная нормализация: нормализация активаций внутри мини-батча.
3. Ранняя остановка: прекращение обучения при ухудшении качества на валидационной выборке
4. Интеграция с системами мониторинга. Разработка систем реального времени для адаптации

параметров ИВЛ на основе непрерывного анализа данных мониторинга. Это позволит динамически менять параметры вентиляции в соответствии с изменяющимся состоянием пациента.

5. Обучение с подкреплением. Использование методов глубокого обучения с подкреплением для непрерывного улучшения алгоритмов без необходимости переобучения на новых данных. Это особенно важно в условиях меняющейся патологии пациентов.

6. Мультимодальные модели. Разработка моделей, интегрирующих данные визуализации (КТ, МРТ) с клиническими и лабораторными параметрами для более точной настройки ИВЛ. Это позволит учитывать больше факторов при определении оптимальных параметров вентиляции.

7. Байесовские нейронные сети. Внедрение байесовских подходов для оценки неопределенности предсказаний:

$$p(\theta|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D}|\theta)p(\theta)}{p(\mathcal{D})},$$

где $p(\theta|\mathcal{D})$ – апостериорное распределение параметров; $p(\mathcal{D}|\theta)$ – функция правдоподобия; $p(\theta)$ – априорное распределение параметров; $p(\mathcal{D})$ – evidence.

8. Трансферное обучение. Использование методов трансферного обучения для адаптации моделей, обученных на больших наборах данных, для конкретных медицинских учреждений:

$$\theta_{target} = \arg \min_{\theta} \left[L_{target}(\theta) + \lambda \cdot \|\theta - \theta_{source}\|_2^2 \right]. \quad (5)$$

Для оптимальной интерполяции значений параметров вентиляционного потока в зависимости от текущих показателей состояния пациента можно использовать метод, основанный на метрическом анализе и разработанный в МИФИ для восстановления значений функции одной или многих переменных [7].

Для функциональной зависимости $Y = F(X_1, \dots, X_m) = F(\vec{X})$, где функция $F(\vec{X})$ неизвестна, должно быть восстановлено значение этой функции либо в одной точке $\vec{X}^*$, либо в наборе заданных точек на основе известных значений функции $\vec{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^T$ в фиксированных точках $\vec{X}_k = (X_{k1}, \dots, X_{km})^T$.

Оптимальное значение Y^* в точке $\vec{X}^*$ определяется равенством

$$Y^* = \frac{(W^{-1}\vec{Y}, \vec{1})}{(W^{-1}\vec{1}, \vec{1})}. \quad (6)$$

Матрица метрической неопределенности W определяется формулой

$$W = \begin{pmatrix} \rho^2(\vec{X}_1, \vec{X}^*)\vec{\omega} & (\vec{X}_1, \vec{X}_2)\vec{\omega} & \dots & (\vec{X}_1, \vec{X}_n)\vec{\omega} \\ (\vec{X}_2, \vec{X}_1)\vec{\omega} & \rho^2(\vec{X}_2, \vec{X}^*)\vec{\omega} & \dots & (\vec{X}_2, \vec{X}_n)\vec{\omega} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (\vec{X}_n, \vec{X}_2)\vec{\omega} & (\vec{X}_n, \vec{X}_2)\vec{\omega} & \dots & \rho^2(\vec{X}_n, \vec{X}^*)\vec{\omega} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где

$$\rho^2(\vec{X}_1, \vec{X}^*)\vec{\omega} = \sum_{k=1}^m \omega_k (X_{ik} - X_k^*)^2, \quad (8)$$

$$(\bar{X}_i, \bar{X}_j) \bar{\omega} = \sum_{k=1}^m \omega_k (X_{ik} - X_k^*) \cdot (X_{jk} - X_k^*), \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (9)$$

Оптимальные значения весов ω_k , $k = 1, \dots, m$ вычисляются на этапе обучения с использованием таблицы полученных ранее значений параметров вентиляционного потока.

Метод, основанный на метрическом анализе, позволяет в режиме on line обучать или переобучать систему выбора оптимальных значений вентиляционного потока в динамическом режиме подключения пациента к аппарату искусственной вентиляции легких.

Заключение

Представленный математический аппарат позволяет формализовать задачу интерполяции оптимальных параметров ИВЛ как проблему многомерной нелинейной регрессии. Использование искусственных нейронных сетей и схем метрического анализа обеспечивает возможность наиболее точной аппроксимации сложных нелинейных зависимостей между показателями текущего состояния конкретного пациента и оптимальными значениями параметров вентиляционного потока.

Нейросетевые подходы демонстрируют высокую эффективность в различных областях медицины, включая обработку медицинских изображений, диагностику заболеваний и персонализацию лечения. Дальнейшее развитие метода связано с внедрением байесовских подходов для оценки uncertainty, методов трансферного обучения для учета различных диагнозов и разработкой эффективных алгоритмов оптимизации для работы с высокоразмерными данными.

Внедрение таких систем в клиническую практику требует решения ряда проблем, связанных с накоплением и стандартизацией данных, валидацией алгоритмов и интеграцией с существующими медицинскими системами. Однако потенциал применения нейросетевых методов и методов метрического анализа для персонализации оптимальных значений параметров ИВЛ велик и может привести к значительному повышению эффективности лечения пациентов с дыхательной недостаточностью.

Финансирование

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 25-21-20143, <https://rscf.ru/project/25-21-20143/>.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

С.Г. Климанов – постановка задачи, выбор методов исследования, разработка математической модели, подготовка текста статьи, участие в проведении исследования и обсуждении результатов, подготовка текста статьи.

А.В. Крянев – постановка задачи, выбор методов исследования, разработка математической модели, подготовка текста статьи, участие в проведении исследования и обсуждении результатов, подготовка текста статьи.

А.А. Котляров – постановка задачи, выбор методов исследования, постановка эксперимента, участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

Д.С. Смирнов – участие в подготовке литературного обзора, разработка математической модели, подготовка текста статьи.

И.В. Сопенко – участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

В.А. Трикозова – участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

Д.Д. Царева – участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

Список литературы

1. Чурсин В.В. Искусственная вентиляция легких: Учебно-методическое пособие. Алматы, 2008. 55 с. ISBN 9965-874-64-6.
2. Кузьков В.В., Суборов Е.В., Фот Е.В., Родионова Л.Н., Соколова М.М., Лебединский К.М., Киров М.Ю. Послеоперационные дыхательные осложнения и ОРДС легче предупредить, чем лечить // Анестезиология и реаниматология, 2016. № 61(6). С. 461–468.
3. Патент RU2003121722A. Способ проведения длительной искусственной вентиляции легких. Google Patents, 2019. <https://patents.google.com/patent/RU2003121722A/ru>.
4. Li M., Jiang Y., Zhang Y., Zhu H. Medical image analysis using deep learning algorithms // *Frontiers in Public Health*, 2023. V. 11. 1273253. DOI: 10.3389/fpubh.2023.1273253.
5. Zhang L., Zhu E., Shi J., Wu X., Cao S., Huang S., Ai Z., Su J. Individualized treatment recommendations for patients with locally advanced head and neck squamous cell carcinoma utilizing deep learning // *Front. Med.*, 2025. V. 11. 1478842. DOI: 10.3389/fmed.2024.1478842.
6. Perkins S.W., Muste J.C., Alam T., Singh R.P. Improving Clinical Documentation with Artificial Intelligence: A Systematic Review // *Perspectives in health information management*, 2024. V. 21(2). Ld. PMID: PMC11605373.
7. Крянев А.В., Лукин Г.В., Удумын Д.К. Метрический анализ и обработка данных. М.: Физматлит, 2012. 308 с.
8. Kryanev A.V., Udumyan D.K. Metric analysis, properties and applications as a tool for interpolation // *International Journal of Mathematical Analysis*, 2014. V. 8 (45). P. 2221–2228. DOI: 10.12988/ijma.2014.48252.
9. Kryanev A.V., Udumyan D. K. Metric Analysis, Properties and Applications as a Tool for Forecasting // *International Journal of Mathematical Analysis*, 2014. V. 8. № 60. P. 2971–2978. DOI: 10.12988/ijma.2014.411341.
10. Ivanov V.V. Kryanev A.V., Udumyan D.K., Lukin G.V. Metric Analysis Approach for Interpolation and Forecasting of Time Processes // *Applied Mathematical Sciences*, 2014. V. 8. № 22. P. 1053–1060. DOI: 10.12988/ams.2014.312727.
11. Климанов С.Г., Котляров А.А., Крянев А.В., др. Сравнение методов выявления аномальных выбросов в исходных данных и их применение при обработке данных искусственной вентиляции легких // *Вестник НИЯУ МИФИ*, 2025. Т. 14(1). С. 37–49. DOI: 10.26583/vestnik.2025.1.4.
12. Tavoosi J., Zhang Ch., Mohammadzadeh A., Mobayen S., Mosavi A.H. Medical Image Interpolation Using Recurrent Type-2 Fuzzy Neural Networks // *Frontiers in Neuroinformatics*, 2021. V. 15. 667375. DOI: 10.3389/fninf.2021.667375.
13. Ваганов С.Е. Адаптивный нейросетевой метод построения интерполяционной формулы для удвоения размера изображения // *Компьютерная оптика*, 2019. Т. 43. № 4. С. 627–631. DOI: 10.18287/2412-6179-2019-43-4-627-631.
14. Gambini L., Gabbett C., Doolan L., Jones L., et al. Video frame interpolation neural network for 3D tomography across different length scales // *Nature Communications*, 2024. V. 15 (1). 7962. DOI: 10.1038/s41467-024-52260-2.
15. Hariharan S., Karnan H., Maheswari D.U. Automated mechanical ventilator design and analysis using neural network // *Scientific Reports*, 2025. V. 15. 3212. DOI: 10.1038/s41598-025-87946-0.
16. Peine A., Hallawa A., Bickenbach J., et al. Development and validation of a reinforcement learning algorithm to dynamically optimize mechanical ventilation in critical care // *NPJ Digital Medicine*, 2021. V. 4 (1). DOI: 10.1038/s41746-021-00388-6.
17. Diao S. Changsong W., Junyu W., Yizhou Li. Ventilator pressure prediction using recurrent neural network. DOI: 10.48550/arXiv.2410.06552.
18. Bakkes T., Diepen A. van, Bie A.De., Montenij L. Automated detection and classification of patient – ventilator asynchrony by means of machine learning and simulated data // *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 2023. V. 230 (6). 107333. DOI: 10.1016/j.cmpb.2022.107333.

Two schemes for interpolation of optimal values of ventilation flow parameters depending on the values of patient indicators during artificial ventilation of the lungs

S. G. Klimanov¹, A. V. Kryanev^{1,2,✉}, A. A. Kotlyarov³, D. S. Smirnov¹, I. V. Sopenko³, V. A. Trikozova¹, D. D. Tsareva¹

¹ National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow, 115409, Russia

² Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 141980, Russia

³ Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering, Obninsk, Kaluga region, 249039, Russia

✉ AVKryanev@mephi.ru

Received September 29, 2025; revised October 27, 2025; accepted November 05, 2025

This article, based on a database of initial data on successful patient treatment, proposes two schemes for interpolating optimal ventilation flow parameter values during artificial lung ventilation (ALV) for a given patient. At the mathematical level, selecting optimal ventilation flow parameter values based on the patient's current condition is a task of multivariate nonlinear regression analysis. The first scheme is based on the mathematical apparatus of artificial neural networks. The second scheme is based on the mathematical apparatus of metric analysis, developed at the Department of Applied Mathematics at MEPhI and currently used in mathematical data processing and optimization problems in various applied fields. The implementation of both schemes allows for the use of accumulated data on the successful treatment of patients with similar lung diseases on ventilators for the specific patient in question. Both schemes allow for the adaptation of optimal ventilation flow parameter values to the patient's current condition during treatment. In the future, it is planned to jointly use these two interpolation schemes to obtain a more accurate and reliable final result for solving the above-mentioned optimal interpolation problem.

Keywords: artificial ventilation of the lungs, patient indications, interpolation, optimal values of ventilation flow parameters.

References

1. Chursin V.V. *Iskusstvennaya ventilyaciya lyogkih: Uchebno-metodicheskoe posobie*. [Artificial ventilation of the lungs: Textbook and methodological manual]. Almaty, 2008. 55 p. ISBN 9965-874-64-6.
2. Kuzkov V.V., Suborov E.V., Fot E.V., Rodionova L.N., Sokolova M.M., Lebedinskij K.M., Kirov M.Yu. *Posle-operacionnye dyhatel'nye oslozhneniya i ORDS legche predupredit', chem lechit'* [Post-operative respiratory complications and ARDS are easier to prevent than to treat]. *Anesteziologiya i reanimatologiya*, 2016. No. 61(6). Pp. 461–468 (in Russian).
3. Patent RU2003121722A. *Sposob provedeniya dlitel'noj iskusstvennoj ventilyacii legkih* [Method for Performing Long-Term Artificial Lung Ventilation]. Google Patents. 2019. <https://patents.google.com/patent/RU2003121722A/ru>.
4. Li M., Jiang Y., Zhang Y., Zhu H. Medical image analysis using deep learning algorithms. *Frontiers in Public Health*, 2023. Vol. 11. 1273253. DOI: 10.3389/fpubh.2023.1273253.
5. Zhang L., Zhu E., Shi J., Wu X., Cao S., Huang S., Ai Z., Su J. Individualized treatment recommendations for patients with locally advanced head and neck squamous cell carcinoma utilizing deep learning. *Front. Med.*, 2025. Vol. 11. 1478842. DOI: 10.3389/fmed.2024.1478842.
6. Perkins S.W., Muste J.C., Alam T., Singh R.P. Improving Clinical Documentation with Artificial Intelligence: A Systematic Review. *Perspectives in health information management*, 2024. Vol. 21(2). Ld. PMID: PMC11605373.
7. Kryanev A.V., Lukin G.V., Udumyan D.K. *Metricheskij analiz i obrabotka dannyh* [Metric analysis and data processing] Moscow, Fizmatlit Publ., 2012. 308 p.

8. *Kryanev A.V., Udumyan D.K.* Metric analysis, properties and applications as a tool for interpolation. *International Journal of Mathematical Analysis*, 2014. Vol. 8 (45). Pp. 2221–2228. DOI: 10.12988/ijma.2014.48252.
9. *Kryanev A.V., Udumyan D.K.* Metric Analysis, Properties and Applications as a Tool for Forecasting. *International Journal of Mathematical Analysis*, 2014. Vol. 8. No. 60. Pp. 2971–2978. DOI: 10.12988/ijma.2014.411341.
10. *Ivanov V.V., Kryanev A.V., Udumyan D.K., Lukin G.V.* Metric Analysis Approach for Interpolation and Forecasting of Time Processes. *Applied Mathematical Sciences*, 2014. Vol. 8. No. 22. Pp. 1053–1060. DOI: 10.12988/ams.2014.312727.
11. *Klimanov S.G., Kotlyarov A.A., Kryanev A.V., et al.* Sravnenie metodov vyyavleniya anomal'nyh vybrosov v iskhodnyh dannyh i ih primeneniye pri obrabotke dannyh iskusstvennoj ventilyacii legkih [Comparison of methods for identifying abnormal outliers in source data and their application in processing artificial lung ventilation data]. *Vestnik NIYaU MIFI*, 2025. Vol. 14(1). Pp. 37–49 (in Russian). DOI: 10.26583/vestnik.2025.1.4.
12. *Tavoosi J., Zhang Ch., Mohammadzadeh A., Mobayen S., Mosavi A.H.* Medical Image Interpolation Using Recurrent Type-2 Fuzzy Neural Networks. *Frontiers in Neuroinformatics*, 2021. Vol. 15. 667375. DOI: 10.3389/fninf.2021.667375.
13. *Vaganov S.E.* Adaptivnyj nejrosetevoy metod postroeniya interpolacionnoj formuly dlya udvoeniya razmera izobrazheniya [An adaptive neural network method for constructing an interpolation formula for doubling the image size]. *Komp'yuternaya optika*, 2019. Vol. 43. No. 4. Pp. 627–631. DOI: 10.18287/2412-6179-2019-43-4-627-631.
14. *Gambini L., Gabbett C., Doolan L., Jones L., et al.* Video frame interpolation neural network for 3D tomography across different length scales. *Nature Communications*, 2024. Vol. 15(1). 7962. DOI: 10.1038/s41467-024-52260-2.
15. *Hariharan S., Karnan H., Maheswari D.U.* Automated mechanical ventilator design and analysis using neural network. *Scientific Reports*, 2025. Vol. 15. 3212. DOI: 10.1038/s41598-025-87946-0.
16. *Peine A., Hallawa A., Bickenbach J., et al.* Development and validation of a reinforcement learning algorithm to dynamically optimize mechanical ventilation in critical care. *NPJ Digital Medicine*, 2021. Vol. 4 (1). DOI: 10.1038/s41746-021-00388-6.
17. *Diao S., Changsong W., Junyu W., Yizhou Li.* Ventilator pressure prediction using recurrent neural network. DOI: 10.48550/arXiv.2410.06552.
18. *Bakkes T., Diepen A. van, Bie A.De., Montenij L.* Automated detection and classification of patient – ventilator asynchrony by means of machine learning and simulated data. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 2023. Vol. 230 (6). 107333. DOI: 10.1016/j.cmpb.2022.107333.

УДК 539.25, 537.533.35

Высокодозная имплантация ионов гелия малой энергией

© 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»,
Москва, 123182, Россия

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

³ Государственный университет управления, Москва, 109542, Россия

Рассматривается вопрос высокодозной имплантации ионов гелия малой энергии (24 кэВ). В этом случае средний проецируемый пробег находится на глубине 20–30 нм от поверхности образца. Имплантация ионов гелия в кремний весьма привлекательна для создания захороненных пористых слоев в кремнии при последующем высокотемпературном отжиге. Естественным способом увеличения пористости захороненного слоя является увеличение дозы имплантации. Однако этому препятствуют радиационные повреждения поверхностного кремния (блистеринг и флехинг), приводящие к невозможности создания в последнем электронных приборов. Поскольку при уменьшении энергии имплантации имплантационный профиль внедренных ионов гелия приближается к поверхности подложки, то возрастает доля вакансий и слабосвязанных приповерхностных атомов, влияющих на протекание диффузионных процессов и значительно изменяются прочностные характеристики поверхностного слоя, включающего в себя пористый слой. Появляется возможность имплантировать значительно большие дозы ионов гелия без механических нарушений поверхностного кремния. В работе представлены результаты исследования захороненного пористого слоя после имплантации дозы $1.75 \cdot 10^{17} \text{ He}^+/\text{см}^2$ при энергии 24 кэВ и последующего высокотемпературного отжига при температуре 1150 °С в течение 30 мин. Огромные поры диаметром 120–170 нм возникают в области первоначального концентрационного максимума. Пористость этого слоя достигает 50 %.

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

Введение

Использование имплантации ионов гелия и последующего высокотемпературного отжига является очень привлекательным методом создания пористых слоев в монокристаллическом кремнии. Однако имплантации больших доз ионов гелия препятствуют радиационные повреждения поверхностного кремния – блистеринг (вспучивание) и флехинг (отшелушивание) [1].

Следует предположить, что максимальная доза имплантации, при которой не наблюдаются механические повреждения поверхностного кремния (критическая доза имплантации) зависит от многих факторов, включающих условия имплантации (температура имплантации, плотность ионного тока и т.д.). Однако, по-видимому, основным фактором, влияющим на величину критической дозы имплантации, является энергия ионов. Именно она определяет удаление концентрационного профиля внедренных ионов гелия от поверхности. При приближении к поверхности значительно возрастает

✉ А. В. Беклемишева: annabekl@ya.ru

Поступила в редакцию: 02.09.2025

После доработки: 22.09.2025

Принята к публикации: 07.10.2025

EDN RXPWRH

доля вакансий и приповерхностных слабосвязанных атомов, изменяется протекание диффузионных процессов, значительно изменяются прочностные характеристики материала. Вследствие этого при малых энергиях появляется возможность имплантировать значительно большие дозы ионов гелия и тем самым синтезировать захороненные слои высокой пористости. По данным работы [2] для энергии 20 кэВ критическая доза имплантации приближается к величине $4 \cdot 10^{17} \text{ He}^+/\text{см}^2$. В противовес этому при имплантации энергией 33 кэВ авторы наблюдали блистеринг для значительно меньшей дозы – $2 \cdot 10^{17} \text{ He}^+/\text{см}^2$. [3] Поэтому для увеличения внедренной дозы ионов гелия для энергий имплантации 40–50 кэВ и выше необходима разработка специальных методов [4]. Данная статья посвящена возможности формирования пористого слоя в кремнии в процессе высокотемпературного отжига, имплантированного большой дозой ионов гелия монокристаллического кремния при относительно малой энергии, когда внедренные ионы располагаются в непосредственной близости от поверхности кремниевой пластины.

Оборудование и методика эксперимента

Облучение кремниевой пластины (100) ионами гелия было проведено на установке ИЛУ-100. Вследствие нагрева пучком температура имплантации была около 150 °С. Энергия имплантации 24 кэВ, внедренная доза $1.75 \cdot 10^{17} \text{ He}^+/\text{см}^2$. Образец отжигался при температуре 1150 °С в воздушной среде в течение 30 мин. Подготовка поперечных срезов для исследований методом просвечивающей микроскопии (ПЭМ) осуществлялась с помощью фокусированного ионного пучка в растровом электронно-ионном микроскопе HeliosNanoLab™600i. Полученные поперечные срезы были ориентированы параллельно плоскостям {110} Si. Исследование поперечных срезов было проведено на микроскопе Osiris.

Экспериментальные результаты

Механизмы формирования в кремнии газовых пузырьков при имплантации ионов гелия и их трансформации в поры (пустоты) при последующем отжиге подробно изложены в предыдущих наших работах [1, 4, 5]. Однако увеличение пористости захороненного слоя упирается, как уже упоминалось ранее, в проблему механических повреждений поверхностного кремниевого слоя при превышении определенной величины внедренной дозы. Как один из способов решения этой проблемы нами был предложен метод исследовательских докритических имплантаций и отжигов. Для энергии 50 кэВ величина критической дозы имплантации по нашим результатам находится около $1.2 \cdot 10^{17} \text{ He}^+/\text{см}^2$. Уменьшение энергии имплантации значительно увеличивают это значение. На рис. 1 представлен поперечный срез образца, имплантированного энергией 24 кэВ, с внедренной дозой $1.75 \cdot 10^{17} \text{ He}^+/\text{см}^2$ после отжига 1150 °С/30 мин на воздухе. В образце наблюдаются крупные поры, имеющие практически сферическую форму диаметром ~ 120–170 нм от границы окисного слоя. Если принять во внимание толщину окисного слоя, то расположение пор совпадает с первоначальным концентрационным максимумом внедренных ионов гелия. Пористость этого слоя достигает 50 %. Следует отметить полное отсутствие пор ниже 170 нм от границы окисного слоя. В области между крупными порами и окисным слоем сохраняется небольшое количество мелких пор диаметром ~ 25 нм. В работе [2] при имплантации ионов гелия энергией 20 кэВ дозой $2.5 \cdot 10^{17} \text{ He}^+/\text{см}^2$ было выявлено наличие аморфной области и было предложено, что образование больших газовых пузырьков связано с процессом рекристаллизации аморфной области – в то время в менее поврежденных областях происходит миграция и коалесценция газовых пузырьков.

Поскольку авторы использовали низкотемпературный отжиг 650 °С, то они говорят о перераспределении газовых пузырьков. Выход гелия из газовых пузырьков наблюдается при температурах выше 800 °С [6]. В работе [7] авторы наблюдали смещение гелиевых пузырьков при прохождении фронта рекристаллизации аморфной области. В [8] показано, что при рекристаллизации сильно поврежденного кремния движущаяся граница раздела между поврежденным и неповрежденным кремнием «выталкивает» гелий, вакансии и гелиевые пузырьки.

Возвращаясь к нашим результатам, можно утверждать, что при дозе имплантации $1.75 \cdot 10^{17} \text{ He}^+/\text{см}^2$ также возникает сильно дефектная и аморфная область, расположенная ниже среднего проецируемого пробега ионов. Во время отжига при температурах 550–650 °С происходит рекристаллизация поврежденной и аморфной области, и фронт рекристаллизации выталкивает гелий, вакансии и гелиевые

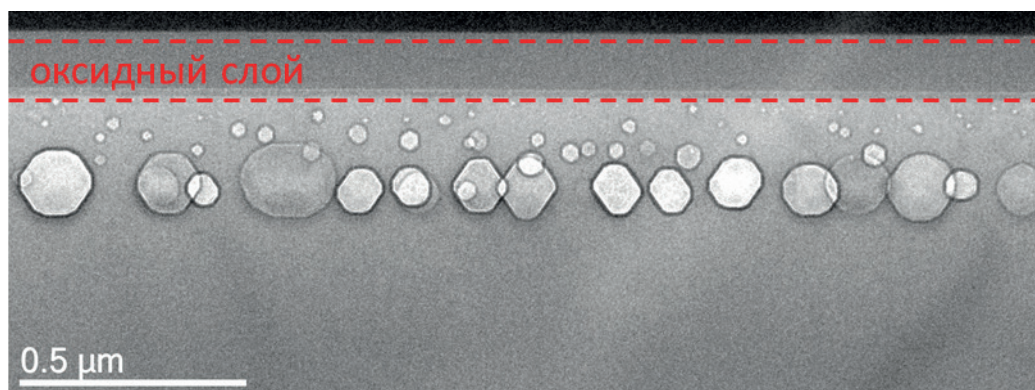


Рис. 1. Поперечный срез образца, исследованного методом ПЭМ, после высокотемпературного отжига 1150 °C за 30 мин, энергия имплантации 24 кэВ, внедренная доза $1.75 \cdot 10^{17}$ He⁺/см²

пузырьки из глубины кристалла в зону первоначального концентрационного максимума, при более высоких температурах процессы миграции и коалесценции, а также выход гелия из газовых пузырьков приводят к наблюдаемой нами картине распределения пор (пустот) в кремнии.

Выводы

Таким образом, имплантация ионов гелия при малых энергиях позволяет значительно увеличить внедренную дозу ионов, и тем самым после высокотемпературного отжига получить захоронения пористых слоев чрезвычайно высокой пористости (50 % и выше). Подавляющее большинство пустот располагается на одной глубине вблизи среднего проецируемого пробега. Для дозы $1.75 \cdot 10^{17}$ He⁺/см² и температуре отжига 1150 °C средний диаметр пор составляет 120 нм. Увеличение дозы имплантации приведет к еще большему диаметру пор и их частичной коалесценции. Однако даже при такой относительно высокой температуре отжига 1150 °C сохраняется значительное количество пор диаметром около 25 нм, расположенных в приповерхностном слое. Их исчезновение следует ожидать при более высоких температурах отжига. Если рассматривать трансформации пористого слоя в захороненный окисный слой, используя «внутреннее окисление» при высоких температурах [9], малые энергии имплантации не позволяют получить рабочий поверхностный кремниевый слой толщиной 100 нм и выше.

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. 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.
2. Siegele R., Weatherly G.C., Haugen H.K. Visible photoluminescence from helium-ion implanted carbon in silicon // Applied Physics Letters, 1995. V. 78 (10). С. 6185–6188. DOI: 10.1063/1.115275.
3. Чесноков Ю.М., Александров П.А., Белова Н.Е. Исследование микроструктуры слоев кремния-на-сапфире после имплантации He^+ и последующей термообработки // Кристаллография, 2017. Т. 62. № 4. С. 613–617.
4. Александров П.А., Демаков К.Д., Шемардов С.Г., Белова Н.Е. Применение ионной имплантации для модификации эпитаксиальных систем кремний-на-сапфире, их структура и свойства // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2017. Т. 8. С. 5–16.
5. С.Г. Шемардов, В.Н. Беклемишев, П.А. Александров и др. Полиэнергетическая имплантация ионов гелия в кремний // Вестник Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», 2025. Т. 14. № 5. С. 452–456.
6. Rudenko T.E., Nazarov A.N., Lysenko V.S. The advancement of silicon-on-insulator (SOI) devices and their basic properties // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics, 2020. V. 23. № 3. P. 227–252.
7. 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(3). P. 360–363.
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. Art. number 094905. DOI: 10.1063/1.3009383.
9. Donnelly S.E., Vishnyakov V.M., Carter G. et al. The use of cavities for gettering in silicon microelectronic devices // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 2003. V. 206(7). P. 422–426.
10. 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.
11. 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.
12. 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.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 6, pp. 553–557

High-dose implantation of low-energy helium ions

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), 9 Institutsky Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia

³ State University of Management, Moscow, 109542, Russia

✉ annabekl@ya.ru

Received September 02, 2025; revised September 22, 2025; accepted October 07, 2025

The issue of high-dose implantation of low-energy helium ions (24 keV) is being considered. In this case, the average projected range is at a depth of 20–30 nm from the sample surface. Implantation of helium ions into silicon is very attractive for creating buried porous layers in silicon during subsequent high-temperature annealing. A natural way to increase the porosity of the buried layer is to increase

the implantation dose. However, this is hindered by radiation damage to the surface silicon (blistering and flecking), which makes it impossible to create electronic devices in the latter. As the implantation energy decreases, the implantation profile of embedded helium ions approaches the surface of the substrate, the proportion of vacancies and loosely bound near-surface atoms increases, affecting the course of diffusion processes, and the strength characteristics of the surface layer, including the porous layer, significantly change. It becomes possible to implant significantly higher doses of helium ions without mechanical damage to the surface silicon. The paper presents the results of a study of a buried porous layer after implantation of a dose of $1.75 \cdot 10^{17}$ He⁺/cm² at an energy of 24 keV and subsequent high-temperature annealing at a temperature of 1150 °C for 30 minutes. Huge pores with a diameter of 120–170 nm appear in the area of the initial concentration maximum. The porosity of this layer reaches 50 %.

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

References

1. 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).
2. Siegele R., Weatherly G.C., Haugen H.K. Visible photoluminescence from helium-ion implanted carbon in silicon. *Applied Physics Letters*, 1995. Vol. 78(10). Pp. 6185–6188. DOI: 10.1063/1.115275.
3. Chesnokov Yu.M., Aleksandrov P.A., Belova N.E. Issledovanie mikrostruktury sloev kremniya-na-sapfire posle implantacii He⁺ i posleduyushchej termooobrabotki [Study of the microstructure of silicon-on-sapphire layers after He⁺ implantation and subsequent heat treatment]. *Crystallography*, 2017. Vol. 62 (4). Pp. 613–617 (in Russian).
4. Aleksandrov P.A., Demakov K.D., Shemarov S.G., Belova N.E. Primenenie ionnoj implantacii dlya modifikacii epitaksial'nyh sistem kremnij-na-sapfire, ih struktura i svoystva [Application of ion implantation for modification of epitaxial silicon-on-sapphire systems, their structure and properties]. *Poverhnost'. Rentgenovskie, sinhrotronnye i nejtronnye issledovaniya*, 2017. Vol. 8. Pp. 5–16 (in Russian).
5. Shemardov S.G., Beklemishev V.N., Aleksandrov P.A., et al. [Polyenergetic implantation of helium ions into silicon]. *Vestnik NIYaU MIFI*, 2025. Vol. 14. No. 5. Pp. 452–456 (in Russian).
6. Rudenko T.E., Nazarov A.N., Lysenko V.S. The advancement of silicon-on-insulator (SOI) devices and their basic properties. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 2020. Vol. 23. № 3. Pp. 227–252.
7. 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(3). Pp. 360–363.
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. Art. number 094905. DOI: 10.1063/1.3009383.
9. Donnelly S.E., Vishnyakov V.M., Carter G. et al. The use of cavities for gettering in silicon microelectronic devices. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 2003. Vol. 206(7). Pp. 422–426.
10. 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.
11. 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.
12. 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.