

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ
ПОВОЛЖСКИЙ РЕГИОН

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

№ 2 (62)

2022

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

- Мальков И. Н., Мачулис В. В.* Неподвижные точки и предельные циклы обобщенной полиномиальной дифференциальной системы Куклеса..... 3
- Марченков С. С.* О сложности целочисленных полиномиальных возвратных последовательностей..... 17
- Мельников Б. Ф., Терентьева Ю. Ю.* О графовой модели для задач рефлектометрии и некоторых алгоритмах их решения. Часть I. Постановка задачи и подходы к алгоритмизации 28

ФИЗИКА

- Gadomsky O. N., Ushakov N. M., Katnov V. E., Musich D. O., Gebeydullov M. M., Adam A. H.* Subwavelength optical microscopy of nanostructured objects on the surface of an optical metamaterial with a zero refractive index 40
- Лю Н. Н., Пятаков А. П., Пятаев Н. А., Сухоруков Г. Б., Тишин А. М.* Трилемма магнитной гипертермии «поле – частота – размер» на примере наночастиц ZnMn феррита 54
- Журавлев В. М., Морозов В. М.* Нелинейные функциональные подстановки и преобразования для нелинейных диффузионных и волновых уравнений.... 81
- Морозов В. М.* Модель радиационно-стимулированного роста когерентных структур в кристаллической среде с быстрой релаксацией и медленной диффузией 99

**UNIVERSITY PROCEEDINGS
VOLGA REGION
PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

№ 2 (62)

2022

CONTENT

MATHEMATICS

- Mal'kov I.N., Machulis V.V.* Singular points and limit cycles
of the generalized Kukles polynomial differential system.....3
- Marchenkov S.S.* On the complexity of integer polynomial recursive sequences..... 17
- Mel'nikov B.F., Terent'eva Yu.Yu.* On a graph model
for reflectometry issues and some algorithms for their solution.
Part 1. Issue statement and approaches to algorithmics.....28

PHYSICS

- Gadomsky O.N., Ushakov N.M., Katnov V.E., Musich D.O., Gebeydullov M.M.,
Adam A.H.* Subwavelength optical microscopy of nanostructured objects
on the surface of an optical metamaterial with a zero refractive index.....40
- Liu N.N., Pyatakov A.P., Pyataev N.A., Sukhorukov G.B., Tishin A.M.*
Trilemma of magnetic hyperthermia “field – frequency – size”
by the example of ZnMn ferrite nanoparticles.....54
- Zhuravlev V.M., Morozov V.M.* Nonlinear functional substitutions
and transformations for nonlinear diffusion and wave equations 81
- Morozov V.M.* Model of radiation-stimulated growth of coherent structures
in a crystalline medium with fast relaxation and slow diffusion99

МАТЕМАТИКА

MATHEMATICS

УДК 517.938
doi:10.21685/2072-3040-2022-2-1

Неподвижные точки и предельные циклы обобщенной полиномиальной дифференциальной системы Куклеса

И. Н. Мальков¹, В. В. Мачулис²

^{1,2}Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

¹i.n.malkov@yandex.ru, ²marelik@runbox.com

Аннотация. *Актуальность и цели.* Нахождение числа предельных циклов Пуанкаре полиномиальных динамических систем относится к 16-й проблеме Гильберта, которая не решена в общем виде. Целью работы являются обобщение ранее полученных результатов для полиномиальной системы Куклеса и получение новых оценок числа предельных циклов системы Куклеса 10-го порядка. *Материалы и методы.* Применяются методы качественной теории динамических систем и теории усреднения. *Результаты.* Исследованы неподвижные точки обобщенной полиномиальной дифференциальной системы Куклеса четной степени и представлена классификация фазовых портретов на диске Пуанкаре. Также с учетом теории усреднения написан программный код, ускоряющий поиск ответа на вопрос о количестве предельных циклов исследуемой системы. Впервые для системы Куклеса 10-го порядка приведен метод исследования числа предельных циклов в зависимости от степени усреднения. *Выводы.* Классификация глобальных фазовых портретов на диске Пуанкаре дает ответ на вопрос о возможных траекториях обобщенной полиномиальной системы Куклеса четной степени. В дальнейшем планируется получить аналитическую зависимость количества предельных циклов от порядка системы и степени ее усреднения.

Ключевые слова: предельный цикл, система Куклеса, метод усреднения, фазовый портрет, неподвижная точка, возмущенная система

Для цитирования: Мальков И. Н., Мачулис В. В. Неподвижные точки и предельные циклы обобщенной полиномиальной дифференциальной системы Куклеса // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2022. № 2. С. 3–16. doi:10.21685/2072-3040-2022-2-1

Singular points and limit cycles of the generalized Kukles polynomial differential system

I.N. Mal'kov¹, V.V. Machulis²

^{1,2}Tyumen State University, Tyumen, Russia

¹i.n.malkov@yandex.ru, ²marelik@runbox.com

Abstract. *Background.* Searching of numbers of Poincare limit cycles of polynomial dynamic systems belongs to second part of the 16th Gilbert problem, which is not solved in general. The purpose of this work is generalization of earlier results for the generalized Kukles system and new estimation of numbers of limit cycles the Kukles system 10 degree

is got. *Materials and methods.* The methods of qualitative theory of dynamic systems and averaging theory were applied. *Results.* Singular points were researched of the generalized Kukles polynomial differential system and classification of phase portrait in the Poincare disc was showed. In addition, the program, which accelerated researching of numbers of limit cycles, was written using average theory. For the first time numbers of limit cycles for the Kukles system 10 degree depending on average degree are got. *Conclusions.* The classification of global phase portrait in the Poincare disc finishes a question about probable trajectory the generalized polynomial Kukles system. There is a potential for the future researching to get accurate assessment of numbers of limit cycles in respect to degree of the system without using of the program. In the future we are going to get analytic dependence numbers of limit cycles on system and average degrees.

Keywords: limit cycle, Kukles system, average theory, phase portrait, singular point, perturbed system

For citation: Mal'kov I.N., Machulis V.V. Singular points and limit cycles of the generalized Kukles polynomial differential system. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2022;(2):3–16. (In Russ.). doi:10.21685/2072-3040-2022-2-1

Введение

В работе рассматривается однородная дифференциальная система Куклеса:

$$\dot{x} = -y, \quad \dot{y} = x + Q_n(x, y), \quad (1)$$

где $Q_n(x, y)$ – однородный действительный полином степени n , $n \geq 2$ – четное, $x = x(t)$, $y = y(t)$.

Система (1) степени $n = 2, 3, \dots, 8$ рассматривалась в работах [1–12]. В работе [1] предполагается, что система (1) имеет неподвижную точку типа «центр» в начале координат, если она симметрична относительно одной из осей координат. В работах [2, 3] это доказано для $n = 2, 3, 4, 5$, а позднее и для всех n при дополнительных допущениях [4, 5].

В работе [6] рассмотрены фазовые портреты квадратичной системы, в статье [7] – кубической. Классификацию фазовых портретов для $n = 4$ предложили в [8]. Случаи $n = 5, 6$ рассмотрены в [6, 10]. Система (1) седьмой степени изучалась в статье [11]. Система Куклеса восьмого порядка исследована в работе [12].

В данной работе исследовались неподвижные точки. Приведена классификация глобальных фазовых портретов обобщенной дифференциальной полиномиальной системы Куклеса четной степени.

Также представлено исследование числа предельных циклов в зависимости от порядка исходной динамической системы и степени ее усреднения. Впервые получена оценка количества предельных циклов системы 10-й степени. Написан программный код, с помощью которого проверены расчеты и сопоставлены результаты с известными источниками.

1. Материалы и методы

Для полного и глубокого понимания предмета исследования будет полезно кратко изложить дополнительный материал о методах, использованных в работе.

1.1. Компактификация Пуанкаре

Часто для изучения предельных циклов необходимо знать поведение траекторий при удалении их в бесконечность. В этих целях для полиномиальных дифференциальных систем используется так называемая компактификация Пуанкаре (или отображение на сферу Пуанкаре [13]).

Рассмотрим систему

$$\dot{x} = P(x, y), \quad \dot{y} = Q(x, y), \quad (2)$$

где $P(x, y), Q(x, y)$ – многочлены от $x = x(t)$ и $y = y(t)$.

Определим сферу Пуанкаре как $\mathbb{S}^2 = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 + z^2 = 1\}$.

Экватор $\mathbb{S}^1 = \{(x, y, z) \in \mathbb{S}^2 : z = 0\}$ описывает бесконечные точки из \mathbb{R}^2 .

Необходимо выполнить исследования сферы Пуанкаре в окрестности карт $U_i = \{Y \in \mathbb{S}^2 : y_i > 0\}$ с диффеоморфизмом $F_i : U_i \rightarrow \mathbb{R}^2, i = 1, 2$.

Преобразование $x = 1/z, y = u/z$ позволяет изучить особые точки, лежащие на экваторе сферы Пуанкаре, за исключением тех точек, которые соответствуют «концам» оси y (карта (U_1, F_1)).

Для исследования концов оси y нужно положить $x = v/z, y = 1/z$. В этом случае плоскость (z, v) будет располагаться параллельно оси x (карта (U_2, F_2)).

Особые точки (на экваторе) ищутся при $z = 0$.

1.2. Теория усреднения

Подробное изложение теории усреднения приведено в работе [14].

Рассматривается система вида

$$x'(t) = k \sum_{i=0}^k \varepsilon^i F_i(t, x) + \varepsilon^{k+1} R(t, x, \varepsilon), \quad (3)$$

где $F_i : \mathbb{R} \times D \rightarrow \mathbb{R}^n, i = 1, 2, \dots, k$, и $R : \mathbb{R} \times D \times (-\varepsilon_0, \varepsilon_0) \rightarrow \mathbb{R}^n$ – непрерывные функции, T -периодические по первой переменной в случае открытого подмножества $D \subset \mathbb{R}^n$.

Для усреднения уравнения необходимо ввести обозначения. Пусть $x = (x_1, \dots, x_n) \in D$ и пусть $y_j = (y_{j1}, \dots, y_{jn}) \in \mathbb{R}^n$ при $j = 1, \dots, l$. Обозначим

через $\frac{\partial^L}{\partial x^L} F_m(s, x)$ симметричную L -мультилинейную карту, применяемую

к производной L векторов из \mathbb{R}^n , которую обозначим как $\odot_{j=1}^l y_j^{b_j} \in \mathbb{R}^{nL}$,

$L = b_1 + b_2 + \dots + b_l$ и $y_j^{b_j} = (y_j, \dots, y_j) \in \mathbb{R}^{nb_j}$. Определение L -мультилинейной карты:

$$\frac{\partial^L}{\partial x^L} F_m(s, x) \odot_{j=1}^l y_j^{b_j} =$$

$$\sum_{i_1, \dots, i_L=1}^n \frac{\partial^L F_j(s, x)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_L}} y_{1i_1} \dots y_{1i_{b_1}} y_{2i_{b_1+1}} \dots y_{2i_{b_1+b_2}} y_{li_{b_1+\dots+b_{l-1}+1}} \dots y_{li_{b_1+\dots+b_l}} \cdot \quad (4)$$

Определим $f_i : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ при $i = 1, \dots, k$ как

$$f_i(z) = y_i(T, z) / i!, \quad (5)$$

где $y_i \in \mathbb{R} \times D \rightarrow \mathbb{R}^n$ при $i = 1, 2, \dots, k-1$, определенные рекуррентно следующими интегральными уравнениями:

$$y_i(t, z) = i! \int_0^t \left(F_i(s, z) + \sum_{l=1}^i \sum_{S_l} \frac{1}{b_1! b_2! 2! b_2! \dots b_l! l! b_l} \frac{\partial^L}{\partial z^L} F_{i-l}(s, z) \odot_{j=1}^l y_j(s, z)^{b_j} \right) ds, \quad (6)$$

где (b_1, b_2, \dots, b_l) – неотрицательные корни уравнения

$$b_1 + 2b_2 + \dots + lb_l = l; \quad (7)$$

$L = b_1 + \dots + b_l$, S_l – множество всех неотрицательных наборов (b_1, b_2, \dots, b_l) .

Теорема 1. Пусть $F_0 \equiv 0$. Также для функций дифференциальной системы (3) предполагаем следующие условия:

(i) $F_i(t, *) \in C^{k-i}$ для всех $t \in \mathbb{R}$ при $i = 1, 2, \dots, k$ и R и F_k удовлетворяют условию Липшица по x .

(ii) Предположим, что $f_i \equiv 0$ при $i = 1, 2, \dots, r-1$ и $f_r \not\equiv 0$ при $r \in \{1, 2, \dots, k\}$ (здесь по определению $f_0(z) \equiv 0$). Более того, предположим, что для $a \in D$ при $f_r(a) = 0$ существует окрестность $V \subset D$ такая, что $f_r(z) \neq 0$ для всех $z \in \bar{V} \setminus \{a\}$, и что показатель Броувера $d_B(f_r(z), V, a) \neq 0$.

Тогда для достаточно малого $|\varepsilon|$ существует T -периодическое решение $x(*, \varepsilon)$ системы (3) такое, что $x(0, \varepsilon) \rightarrow a$, где $\varepsilon \rightarrow 0$.

2. Постановка задачи и результаты

Пусть дана дифференциальная обобщенная полиномиальная система Куллеса порядка n :

$$\dot{x} = -y, \quad \dot{y} = x + ax^n + bx^{n/2}y^{n/2} + cy^n, \quad (8)$$

где $x = x(t), y = y(t)$, $x, y \in \mathbb{R}; a, b, c \in \mathbb{R}$ и $a^2 + b^2 + c^2 \neq 0, n \geq 2$ – четное.

В системе (8) найдены конечные и бесконечные неподвижные точки и исследован характер их устойчивости. В результате анализа представлена классификация глобальных фазовых портретов на диске Пуанкаре системы (8), что сформулировано в виде теоремы 2.

Теорема 2. Множество всех глобальных фазовых портретов на диске Пуанкаре дифференциальной системы (8) топологически эквивалентно фазовым портретам, изображенным на рис. 1.

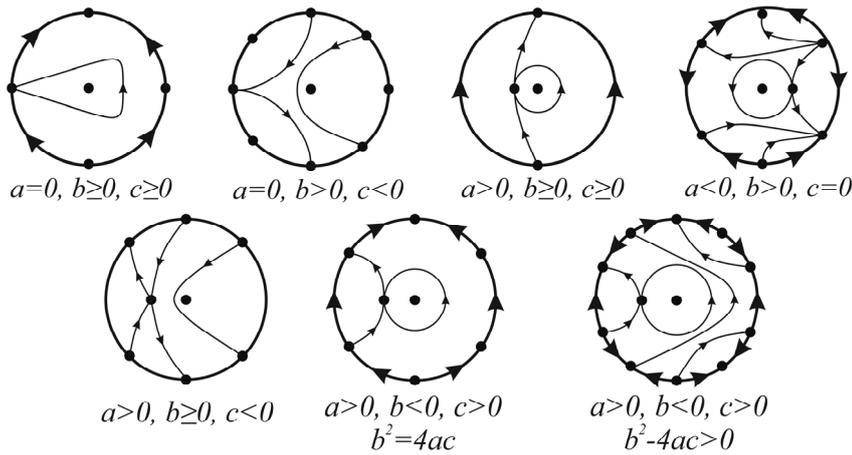


Рис. 1. Глобальные фазовые портреты на диске Пуанкаре системы (8)

Обоснование классификации глобальных фазовых портретов представлено в разд. 3.

Далее мы возмущаем систему (8) в классе полиномов степени n :

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -y + \sum_{s=1}^n \varepsilon^s \sum_{0 \leq i+j \leq n} \alpha_{ij}^{(s)} x^i y^j, \\ \dot{y} &= x + ax^n + bx^{n/2} y^{n/2} + cy^n + \sum_{s=1}^n \varepsilon^s \sum_{0 \leq i+j \leq n} \beta_{ij}^{(s)} x^i y^j, \end{aligned} \quad (9)$$

где s – порядок усреднения; $\varepsilon \ll 1$ – малый параметр возмущения.

С помощью теории усреднения исследуется количество предельных циклов возмущенной системы (9) (систем порядка $n = 4, 5, \dots, 10$).

3. Изучение фазовых портретов

В этом разделе приводится доказательство теоремы 2.

Замечание 1. Система (8) инвариантна относительно замены $(t, x, y) \rightarrow (t, -x, -y)$.

Из замечания 1 следует, что система (8) симметрична относительно оси абсцисс.

Замечание 2. Система (8) инвариантна относительно замены $(x, y, t, a, b, c) \rightarrow (-x, y, -t, -a, -b, -t)$.

Тогда нам достаточно изучить фазовые портреты системы (8), когда:

- 1) $a = 0, b \geq 0$ и $c \geq 0$;
- 2) $a = 0, b > 0$ и $c < 0$;
- 3) $a > 0, b \geq 0$ и $c \geq 0$;
- 4) $a < 0, b > 0$ и $c = 0$;
- 5) $a > 0, b \geq 0$ и $c < 0$;
- 6) $a > 0, b^2 - 4ac = 0$ и $b < 0$;
- 7) $a > 0, b^2 - 4ac > 0, b < 0$ и $c > 0$.

Первым шагом к изучению фазовых портретов является определение конечных и бесконечных неподвижных точек.

Конечные неподвижные точки

Очевидно, когда $a \neq 0$, имеется две неподвижные точки $(0; 0)$ и $(\sqrt[n-1]{-1/a}; 0)$ с собственными значениями $\pm i$ и $\pm \sqrt[n-1]{-1/a}$ соответственно. Сле-

довательно, мы имеем дело с центром в начале координат и седлом в точке $(\sqrt[n-1]{-1/a}; 0)$. При $a = 0$ остается одна неподвижная точка $(0; 0)$ типа центр.

Бесконечные неподвижные точки

Для исследования поведения интегральных кривых на бесконечности будем использовать отображение на сферу Пуанкаре. Сформулируем теорему о бесконечных неподвижных точках и их природе на диске Пуанкаре.

Теорема 3. На карте (U_1, F_1) система (8) имеет:

а) начало координат как линейная нулевая неподвижная точка, ее локальный фазовый портрет состоит из четырех гиперболических секторов, если $a = 0, b \geq 0$ и $c \geq 0$;

б) три бесконечные неподвижные точки: начало координат и два седло-узла в точках $(\pm \sqrt[n/2]{-b/c}, 0)$, если $a = 0, b > 0, c < 0$;

с) нет неподвижных точек, если $a > 0, b \geq 0, c \geq 0$;

д) два бесконечных седло-узла $(\pm \sqrt[n/2]{-a/b}, 0)$, если $a < 0, b > 0, c = 0$;

е) два бесконечных седло-узла $\pm \left(\sqrt[n/2]{\frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2c}}, 0 \right)$, если $a > 0,$

$b \geq 0, c < 0$;

ф) две бесконечных линейно нулевых точки $(\pm \sqrt[n/2]{-b/2c}, 0)$ такие, что их локальные портреты состоят из двух гиперболических и двух параболических секторов, если $a > 0, c > 0, b^2 = 4ac$ и $b < 0$;

г) четыре бесконечных седло-узла

$$\left(\sqrt[n/2]{\frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2c}}, 0 \right), \left(\sqrt[n/2]{\frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{-2c}}, 0 \right),$$

если $a > 0, b^2 - 4ac > 0, b < 0$ и $c > 0$.

Начало координат на карте (U_2, F_2) :

h) устойчивый узел при $c > 0$ и неустойчивый узел при $c < 0$;

i) линейный ноль. Неподвижная точка такая, что ее локальный портрет состоит из четырех параболических секторов, если $c = 0$.

Доказательство. Дифференциальная система (8) на карте U_1 задается системой

$$\dot{u} = a + bu^{n/2} + cu^n + v^{n-1} + u^2v^{n-1}, \dot{v} = uv^n; \tag{10}$$

а) $a = 0, b \geq 0, c \geq 0$, тогда система примет вид

$$\dot{u} = bu^{n/2} + cu^n + v^{n-1} + u^2v^{n-1}, \dot{v} = uv^n. \tag{11}$$

В этом случае единственная неподвижная линейно нулевая точка $(0; 0)$.

Чтобы изучить поведение траекторий в окрестности неподвижной точки, необходимо выполнить замену $(u, v) \rightarrow (u, w), w = v/u$ и ремасштабирование $u^{n/2-1}dt = ds$. Имеем систему:

$$\dot{u} = bu + cu^{n/2+1} + u^{n/2}w^{n-1} + u^{n/2+2}w^{n-1},$$

$$\dot{w} = -bw - cu^{n/2}w - u^{n/2-1}w^n. \quad (12)$$

Система (12) имеет единственную точку равновесия (0;0) с характеристическими числами $\lambda_{1,2} = \pm b$. Возвращаясь к исходной системе, можно заключить, что локальный фазовый портрет имеет четыре гиперболических сектора.

Если $a = 0$, $b = 0$, $c > 0$, то система (10) примет вид

$$\dot{u} = cu^{n/2+1} + u^{n/2}w^{n-1} + u^{n/2+2}w^{n-1}, \quad \dot{w} = -cu^{n/2}w - u^{n/2-1}w^n. \quad (13)$$

Система (13) имеет линейно нулевую точку в начале координат. Делая замену $(u, w) \rightarrow (u, z)$, $z = w/u$ и ремасштабирование $u^{n-1}ds = d\tau$, получаем систему:

$$\dot{u} = cu + z^{n-1}u^{n-1} + z^{n-1}u^{n+1}, \quad \dot{z} = -2cz - 2z^n u^{n-2} - z^n u^n. \quad (14)$$

Система (14) имеет одно седло в центре координат с характеристическими числами $\lambda_1 = c$ и $\lambda_2 = -2c$. Возвращаясь к заменам, можно заключить, что локальный фазовый портрет в окрестности начала координат образован четырьмя гиперболическими секторами.

Если $a = 0$, $b > 0$, $c = 0$, то из системы (10) мы имеем следующую систему при замене переменных $u^{n/2-1}ds = d\tau$:

$$\dot{u} = bu + u^{n/2}w^{n-1} + u^{n/2+2}w^{n-1}, \quad \dot{w} = -bw - u^{n/2-1}w^n. \quad (15)$$

Система (15) имеет одно седло в начале координат с собственными значениями $\lambda_{1,2} = \pm b$. Возвращаясь к замене переменных, получаем, что окрестность начала координат состоит из четырех гиперболических секторов.

Таким образом, пункт (а) доказан.

б) $a = 0$, $b > 0$, $c < 0$. В этом случае система (10) имеет три неподвижные точки: (0;0) – такой же характер, как в пункте (а), $(\pm \sqrt[n/2]{-b/c}; 0)$ – бесконечные полугиперболические неподвижные точки с характеристическими числами $\lambda_1 = \mp \frac{n b^2}{2 c} (-c/b)^{2/n}$ и $\lambda_2 = 0$. Возвращаясь к замене переменных, заключаем, что окрестность неподвижной точки имеет характер седло-узла в силу теоремы 2 [15, с. 87]. *Таким образом, пункт (б) доказан.*

с) $a > 0$, $b \geq 0$, $c \geq 0$. Система (10) не имеет неподвижных точек.

д) $a < 0$, $b > 0$, $c = 0$. Система (10) примет вид

$$\dot{u} = a + bu^{n/2} + v^{n-1} + u^2v^{n-1}, \quad \dot{v} = uv^n. \quad (16)$$

Эта система имеет две неподвижные точки $(\pm \sqrt[n/2]{-a/b}; 0)$ с характери-

стическими числами $\lambda_1 = \mp \frac{n b^2}{2 c} (-a/b)^{2/n}$ и $\lambda_2 = 0$. Применяем замену

$u = z \pm \sqrt[n/2]{-a/b}$ к системе (16). В силу теоремы 2 [15, с. 87] эти точки – седло-узел. *Таким образом, пункт (д) доказан.*

е) $a > 0, b \geq 0, c < 0$. Система (10) при $v = 0$ имеет две неподвижные точки $\left(\pm n/2 \sqrt{\left(-b - \sqrt{b^2 - 4ac} \right) / 2c}; 0 \right)$ с собственными значениями:

$$\lambda_1 = \frac{b}{2} \left(\pm \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2c} \right)^{1-2/n} + cn \left(\pm \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2c} \right)^{2-2/n} \quad \text{и} \quad \lambda_2 = 0.$$

В силу теоремы 2 [15, с. 87] эти точки – седло-узлы.
 Таким образом, пункт (е) доказан.

ф) $a > 0, b^2 = 4ac, b < 0, c > 0$. Мы получаем следующую систему:

$$\dot{u} = \left(2a + bu^{n/2} \right)^2 / 4a + \left(1 + u^2 \right) v^{n-1}, \quad \dot{v} = uv^n. \quad (17)$$

Эта система имеет две неподвижные точки $\left(\pm n/2 \sqrt{-2a/b}; 0 \right)$, которые являются линейно нулевыми. В силу симметричности системы (17) достаточно рассмотреть одну из точек, например $\left(n/2 \sqrt{-2a/b}; 0 \right)$. Выполним две замены: $u = z - n/2 \sqrt{-2a/b}$ и $(z, v) \rightarrow (z, w), w = v/z$. Получим систему:

$$\begin{aligned} \dot{z} = & \frac{a}{z} + \frac{b \left(z + n/2 \sqrt{-2a/b} \right)^{n/2}}{z} + \frac{b^2}{4az} \left(z + n/2 \sqrt{-2a/b} \right)^n + w^{n-1} z^{n-2} + \\ & + w^{n-1} z^n + 2^{n/2} \sqrt{-2a/b} w^{n-1} z^{n-1} + 2^{n/4} \sqrt{-2a/b} w^{n-1} z^{n-2}, \\ \dot{w} = & -\frac{aw}{z^2} - \frac{bw \left(z + n/2 \sqrt{-2a/b} \right)^{n/2}}{z^2} - \frac{b^2}{4az^2} w \left(z + n/2 \sqrt{-2a/b} \right)^n - \\ & - w^n z^{n-3} - w^n z^{n-2} n/2 \sqrt{-2a/b} - w^n z^{n-3} n/4 \sqrt{-2a/b}. \end{aligned} \quad (18)$$

При $z = 0$ система (18) имеет одно седло в начале координат с собственными значениями $\pm \left(a(-2a/b)^{-4/n} \left(C_n^2 - 2C_{n/2}^2 \right) \right)$, C_n^k – количество сочетаний. Делая обратную замену, получаем, что фазовый портрет в окрестности точки $n/2 \sqrt{-2a/b}$ образован двумя гиперболическими и двумя параболическими секторами.

Таким образом, пункт (ф) доказан.

а) $a > 0, b^2 - 4ac > 0, b < 0, c > 0$. В этом случае система (10) имеет четыре неподвижные точки $\left(\pm n/2 \sqrt{\left(-b + \sqrt{b^2 - 4ac} \right) / 2c}; 0 \right)$ с собственными значениями:

$$\lambda_1 = n 2^{2/n-4} \left(b^2 - 4ac \right)^{2/n} \left(\left(-b + \sqrt{b^2 - 4ac} \right) / c \right)^{1-2/n} \quad \text{и} \quad \lambda_2 = 0;$$

$\left(\pm n/2 \sqrt{\left(-b - \sqrt{b^2 - 4ac} \right) / 2c}; 0 \right)$ с собственными значениями,

$$\lambda_1 = -n2^{2/n-4} (b^2 - 4ac)^{2/n} \left(\left(-b + \sqrt{b^2 - 4ac} \right) / c \right)^{1-2/n} \text{ и } \lambda_2 = 0.$$

По теореме 2 [15, с. 87] эти точки – седло-узлы.

Таким образом, пункт (г) доказан.

Дифференциальная система (8) на карте U_2 задается следующим образом:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -au^{n+1} - bu^{n/2+1} - cu - v^{n-1}(1+u^2), \\ \dot{v} &= -au^n v - bu^{n/2} v - cv - uv^n. \end{aligned} \quad (19)$$

Если $c \neq 0$, то система имеет в начале координат гиперболический узел с собственными значениями $-c$ и $-c$. Следовательно, точка будет устойчивой в случае положительного c , иначе – неустойчивой.

Если $c = 0$, то система примет вид

$$\dot{u} = -au^{n+1} - bu^{n/2+1} - v^{n-1}(1+u^2), \quad \dot{v} = -au^n v - bu^{n/2} v - uv^n. \quad (20)$$

В этом случае начало координат – линейно нулевая неподвижная точка дифференциальной системы (8). Выполним замену $(z, v) \rightarrow (z, w), w = v/z$ и ремасштабирование $u^{n/2} dt = ds$:

$$\dot{u} = -bu - au^{n/2+1} - (u^2 + 1)u^{n/2-1}w^{n-1}, \quad \dot{v} = u^{n/2-2}w^n. \quad (21)$$

Когда $u = 0$, начало координат – единственная неподвижная точка с собственными значениями 0 и $-b$. Характер устойчивости неподвижной точки – седло-узел по теореме 2 [15, с. 87]. Возвращаясь к замене, можно заключить, что система имеет четыре параболических сектора.

Таким образом, теорема 3 доказана.

4. Фазовые портреты на диске Пуанкаре. Программная реализация

Задача применения теории усреднения для нахождения периодических решений сопряжена с большими вычислительными трудностями: приведение системы (3) к специальному виду, вычисление f_i, y_i , нахождение целочисленных решений уравнения (7). В связи с этим реализован программный код, который помогает ускорить процесс нахождения количества предельных циклов, в том числе для систем высокой размерности. Ниже описаны этапы работы программы.

4.1. Приведение системы к специальному виду

Для перехода в полярную систему координат используется соотношение

$$\dot{r} = (x\dot{x} + y\dot{y}) / r, \quad \dot{\theta} = (x\dot{y} - y\dot{x}) / r^2,$$

где $x = r \cos(\theta), y = r \sin(\theta)$.

Далее, выбирая в качестве независимой переменной угол θ , получим дифференциальное уравнение $dr / d\theta$ и, выполняя разложение в ряд Тейлора до выбранной степени усреднения, перепишем систему в виде

$$dr / d\theta = \sum_{i=0}^{avg-1} \varepsilon^i F_i(\theta, r) + O(\varepsilon^{avg}). \tag{22}$$

4.2. Применение теории усреднения

Задача усреднения уравнения разбивается на три основных шага:

1. Поиск корней уравнения (7).
2. Составление функций y_i уравнения (6).
3. Вычисление f_i уравнения (5).

Особое внимание следует уделить пункту 1, так как это задача целочисленного программирования, а уравнение (7) относится к линейному неоднородному диофантовому уравнению, решение которого осуществлялось по теореме из работы [16].

Теорема. Любое решение линейного диофантового уравнения $a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n = b$ при $(a_1, a_2, \dots, a_n) | b$ имеет вид $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$, где $a_k x_k^{(0)} \equiv b_k \pmod{\Delta_{k+1}}$ при $1 \leq k \leq n-1$; $x_n^{(0)} = b_n / \Delta_n$; b_k определяются рекуррентными соотношениями:

$$b_k = b_{k-1} - a_{k-1}x_{k-1}^{(0)}; \quad 2 \leq k \leq n. \quad \Delta_i = \text{НОД}(a_i, a_{i+1}, \dots, a_n).$$

Приведем сравнение результатов работы реализованного алгоритма с ранее полученными результатами, а также времени работы программы. Получен новый результат для системы (9) 10-го порядка (табл. 1).

Таблица 1

Результаты тестирования

Степень уравнения	Степень усреднения	Количество предельных циклов		Время работы алгоритма, с
		Ранее полученные результаты	Программная реализация	
10	1 / 2	–	0	1,164 / 1,181
	3 / 4	–	1	1,227 / 1,302
	5 / 6	–	2	1,499 / 1,952
	7 / 8	–	3	2,731 / 7,376
	9 / 10	–	4	21,62 / 36,51
8	1 / 2	0	0	1,059 / 1,101
	3 / 4	1	1	1,235 / 1,298
	5 / 6	2	2	1,548 / 1,963
	7 / 8	–	3	2,692 / 7,160
6	1 / 2	0	0	1,178 / 1,122
	3 / 4	1	1	1,182 / 1,447
	5 / 6	2	2	1,543 / 2,051
4	1 / 2	0	0	1,053 / 1,091
	3 / 4	1	1	1,228 / 1,369

Иллюстрация предельных циклов

В качестве иллюстрации предельных циклов выбрана система (9) порядка $n = 8$ со степенью усреднения 4. Коэффициенты $\alpha_{ij}^{(s)}, \beta_{ij}^{(s)}$ задавались случайным образом. На рис. 2 показано векторное поле заданной системы и две траектории с различным начальным положением.

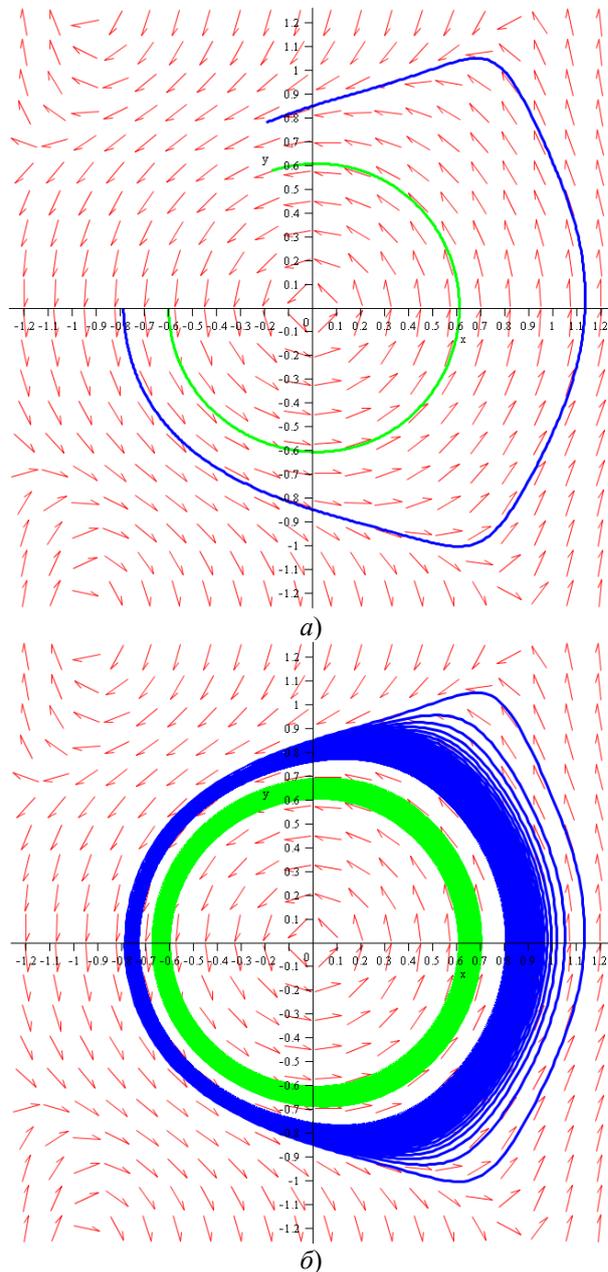


Рис. 2. Пример динамической системы с предельным циклом. Эволюция траекторий системы (9) при $n = 8$ со степенью усреднения 4 и $a = 0, b = 3, c = -1, \varepsilon = 0,01$.
Начальная точка траекторий: внешняя траектория: $x(0) = -0,788, y(0) = 0$;
внутренняя траектория: $x(0) = -0,600, y(0) = 0$: $a - t = 0..5$; $b - t = 0..1000$

Так как внешняя траектория «закручивается» к началу координат, а внутренняя траектория «раскручивается» от начала координат, то существует предельная траектория, к которой стремятся эти две траектории. Следовательно, существует устойчивый предельный цикл.

Заключение

В работе рассмотрена обобщенная дифференциальная полиномиальная система Куклеса. Исследованы неподвижные точки системы, предложена классификация глобальных портретов на диске Пуанкаре. Разработана программа, позволяющая с помощью теории усреднения определять количество предельных циклов системы. Продемонстрированы результаты работы программы и проведено сравнение с полученными ранее результатами. Впервые получено количество предельных циклов для системы порядка $n = 10$ с помощью теории усреднения. Продемонстрирован найденный с помощью теории усреднения предельный цикл. В дальнейшем планируется получить аналитическую оценку количества предельных циклов в зависимости от порядка исходной системы и степени усреднения.

Список литературы

1. Волокитин Е. П., Иванов В. В. Изохронность и коммутруемость полиномиальных векторных полей // Сибирский математический журнал. 1999. № 1 (40). С. 30–48.
2. Gine J. Conditions for the existence of a center for the Kukles homogenous systems // Computers & Mathematics with Applications. 2002. Vol. 43. P. 1261–1269.
3. Gine J., Llibre J., Valls C. Centers for the Kukles homogeneous systems with odd degree // Bulletin of the London Mathematical Society. 2015. Vol 47. P. 315–324.
4. Gine J., Llibre J., Valls C. Centers for the Kukles homogeneous systems with even degree // Journal of Applied Analysis & Computation. 2017. Vol. 7. P. 1534–1548. doi:10.11948/2017093
5. Вулпе Н. И., Сибирский К. С. Центраффинно инвариантные условия наличия центра дифференциальной системы с кубическими нелинейностями // Доклады Академии наук СССР. 1989. № 301 (6). С. 1297–1301.
6. Buzzi C. A., Llibre J., Medrado J. C. Phase portraits of reversible linear differential systems with cubic homogeneous polynomial nonlinearities having a non-degenerate center at the origin // Qualitative Theory of Dynamical Systems. 2009. Vol. 2. P. 369–403.
7. Малкин К. Е. Критерии центра для одного дифференциального уравнения // Волжский математический сборник. 1964. № 2. С. 87–91.
8. Zoladek H. The classification of reversible cubic systems with center // Topological Methods in Nonlinear Analysis. 1994. Vol. 4. P. 79–136.
9. Zoladek H. Remarks on: The classification of reversible cubic systems with center // Topological Methods in Nonlinear Analysis. 1996. Vol. 8. P. 335–342.
10. Benterki R., Llibre J. Centers and limit cycles of polynomial differential systems of degree 4 via averaging theory // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2017. Vol. 313. P. 273–283. doi:10.1016/j.cam.2016.08.047
11. Llibre J., da Silva M. F. Global phase portraits of kukles differential systems with homogeneous polynomial nonlinearities of degree 6 having a center and their small limit cycles // International Journal of Bifurcation and Chaos. 2016. Vol. 26. P. 1650044-1–1650044-25. doi:10.1142/S0218127416500449
12. Llibre J., Novaes D. D., Teixeira M. A. Higher order averaging theory for finding periodic solutions via Brouwer degree // Nonlinearity. 2014. Vol. 27. P. 563–583. doi:10.1088/0951-7715/27/3/563

13. Benterki R., Llibre J. The centers and their cyclicity for a class of polynomial differential systems of degree 7 via averaging theory // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2020. Vol. 368. P. 112456. doi:10.1016/j.cam.2019.112456
14. Belfar A., Benterki R. Centers and Limit Cycles of Generalized Kukles Polynomial Differential Systems: Phase Portraits and Limit Cycles // *Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics*. 2020. Vol. 13. P. 387–397. doi:10.17516/1997-1397-2020-13-4-387-397.
15. Баутин Н. Н., Леонтович Е. В. Методы и приемы качественного исследования динамических систем на плоскости. Новосибирск : Наука, 1990. 490 с.
16. Кодзоков А. Х., Бесланев З. О., Нагоров А. Л., Тхамоков М. Б. О линейных диофантовых уравнениях и способах их решения // *Вестник КРАУНЦ. Физико-математические науки*. 2016. № 2 (13). С. 18–23. doi:10.18454/2079-6641-2016-13-2-18-23

References

1. Volokitin E.P., Ivanov V.V. Isochrony and commutability of polynomial vector fields. *Sibirskiy matematicheskiy zhurnal = Siberian mathematical journal*. 1999;(1):30–48. (In Russ.)
2. Gine J. Conditions for the existence of a center for the Kukles homogenous systems. *Computers & Mathematics with Applications*. 2002;43:1261–1269.
3. Gine J., Llibre J., Valls C. Centers for the Kukles homogeneous systems with odd degree. *Bulletin of the London Mathematical Society*. 2015;47:315–324.
4. Gine J., Llibre J., Valls C. Centers for the Kukles homogeneous systems with even degree. *Journal of Applied Analysis & Computation*. 2017;7:1534–1548. doi:10.11948/2017093
5. Vulpe N.I., Sibirskiy K.S. Centroaffine invariant conditions for the presence of a center of a differential system with cubic nonlinearities. *Doklady Akademii nauk SSSR = Reports of the USSR Academy of Sciences*. 1989;(301):1297–1301. (In Russ.)
6. Buzzi C.A., Llibre J., Medrado J.C. Phase portraits of reversible linear differential systems with cubic homogeneous polynomial nonlinearities having a non-degenerate center at the origin. *Qualitative Theory of Dynamical Systems*. 2009;2:369–403.
7. Malkin K.E. Center criteria for one differential equation. *Volzhskiy matematicheskiy sbornik = Volga mathematical collected articles*. 1964;(2):87–91. (In Russ.)
8. Zoladek H. The classification of reversible cubic systems with center. *Topological Methods in Nonlinear Analysis*. 1994;4:79–136.
9. Zoladek H. Remarks on: The classification of reversible cubic systems with center. *Topological Methods in Nonlinear Analysis*. 1996;8:335–342.
10. Benterki R., Llibre J. Centers and limit cycles of polynomial differential systems of degree 4 via averaging theory. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2017;313:273–283. doi:10.1016/j.cam.2016.08.047
11. Llibre J., da Silva M.F. Global phase portraits of kukles differential systems with homogeneous polynomial nonlinearities of degree 6 having a center and their small limit cycles. *International Journal of Bifurcation and Chaos*. 2016;26:1650044-1–1650044-25. doi:10.1142/S0218127416500449
12. Llibre J., Novaes D.D., Teixeira M.A. Higher order averaging theory for finding periodic solutions via Brouwer degree. *Nonlinearity*. 2014;27:563–583. doi:10.1088/0951-7715/27/3/563
13. Benterki R., Llibre J. The centers and their cyclicity for a class of polynomial differential systems of degree 7 via averaging theory. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2020;368:112456. doi:10.1016/j.cam.2019.112456
14. Belfar A., Benterki R. Centers and Limit Cycles of Generalized Kukles Polynomial Differential Systems: Phase Portraits and Limit Cycles. *Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics*. 2020;13:387–397. doi:10.17516/1997-1397-2020-13-4-387-397.

15. Bautin N.N., Leontovich E.V. *Metody i priemy kachestvennogo issledovaniya dinamicheskikh sistem na ploskosti = Methods and techniques for a qualitative study of dynamic systems on a plane*. Novosibirsk: Nauka, 1990:490. (In Russ.)
16. Kodzokov A.Kh., Beslaneev Z.O., Nagorov A.L., Tkhamokov M.B. On linear Diophantine equations and methods for their solution. *Vestnik KRAUNTs. Fiziko-matematicheskie nauki = Bulletin of the Kamchatka Regional Association Educational and Scientific Center. Physical and mathematical sciences*. 2016;(2):18–23. (In Russ.). doi:10.18454/2079-6641-2016-13-2-18-23

Информация об авторах / Information about the authors

Иван Николаевич Мальков

магистрант, Тюменский
государственный университет
(Россия, г. Тюмень, ул. Володарского, 6)

E-mail: i.n.malkov@yandex.ru

Ivan N. Mal'kov

Master's degree student, Tyumen
State University (6 Volodarskogo
street, Tyumen, Russia)

Владислав Владимирович Мачулис

кандидат педагогических наук, доцент,
кафедра фундаментальной математики
и механики, Тюменский
государственный университет (Россия,
г. Тюмень, ул. Володарского, 6)

E-mail: marelik@runbox.com

Vladislav V. Machulis

Candidate of pedagogical sciences,
associate professor, sub-department
of fundamental mathematics and mechanics,
Tyumen State University (6 Volodarskogo
street, Tyumen, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 09.03.2022

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 17.04.2022

Принята к публикации / Accepted 20.06.2022

О сложности целочисленных полиномиальных возвратных последовательностей

С. С. Марченков

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия

ssmarchen@yandex.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Линейные возвратные последовательности представляют собой «классический» объект комбинаторного анализа. Для выражения произвольного члена линейной возвратной последовательности имеются точные формулы экспоненциального типа как в случае поля комплексных чисел, так и в случае конечного поля Галуа. Следующим шагом в изучении возвратных последовательностей явилось бы рассмотрение полиномиальных возвратных последовательностей. Однако даже для возвратных последовательностей над множеством натуральных чисел эта задача пока не решена. Существует предположение, что при переходе к множеству целых чисел для полиномиальных возвратных последовательностей могут появиться алгоритмически неразрешимые проблемы. Тогда, разумеется, никаких формул для вычисления членов полиномиальной возвратной последовательности в общем случае ожидать не следует. Пока это предположение не доказано, целочисленные полиномиальные возвратные последовательности являются практически неисследованным объектом. В начале 2000-х гг. автор предложил рассматривать «почти полиномиальные» возвратные последовательности – последовательности, порождающие функции которых определяются суперпозициями полиномиальных функций и некоторых простых «почти полиномиальных» функций. Как оказалось, при добавлении к множеству полиномиальных функций функции типа $sg(x)$ появляются возвратные последовательности с алгоритмически неразрешимыми проблемами. Это наводит на мысль, что в случае полиномиальных возвратных последовательностей над множеством целых чисел сами возвратные последовательности с алгоритмической точки зрения должны быть устроены достаточно сложно. Обоснование этого предположения и является целью настоящей статьи. Чтобы говорить о сложности возвратных последовательностей, необходимо прежде всего определить инструмент, с помощью которого можно будет оценивать сложность рассматриваемых последовательностей. В качестве такого инструмента выбрана одноленточная машина Тьюринга, работающая в трехбуквенном алфавите. Вычисления на данных машинах Тьюринга удастся промоделировать целочисленными возвратными последовательностями с полиномиальной порождающей функцией. В результате для ряда проблем, связанных с возвратными последовательностями этого типа, получаются нижние сверхэкспоненциальные оценки сложности их решения. *Материалы и методы.* В построениях и доказательствах используются приемы и методы из теории вычислимых функций. *Результаты и выводы.* Рассматриваются возвратные последовательности над множеством целых чисел с полиномиальными порождающими функциями. С помощью данных последовательностей моделируются вычисления на детерминированных машинах Тьюринга. Из процесса моделирования следует, что некоторые алгоритмические проблемы для рассматриваемых возвратных последовательностей могут быть даже EXSPACE-полными. Таким образом, целочисленные полиномиальные возвратные последовательности с алгоритмической точки зрения представляют собой достаточно сложный объект.

Ключевые слова: возвратная последовательность, полином над множеством целых чисел

Для цитирования: Марченков С. С. О сложности целочисленных полиномиальных возвратных последовательностей // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2022. № 2. С. 17–27. doi:10.21685/2072-3040-2022-2-2

On the complexity of integer polynomial recursive sequences

S.S. Marchenkov

Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

ssmarchen@yandex.ru

Abstract. *Background.* Linear recursive sequences represent the “classic” object of combinatorial analysis. To express an arbitrary term of a linear recursive sequence, there are exact formulas of exponential type as in the case of a field of complex numbers, and in the case of a finite Galois field. The next step in the study of recursive sequences would be to consider polynomial recursive sequences. However, even for recursive sequences over a set of natural numbers, this problem has not yet been solved. There is an assumption that when moving to the set of integers for of polynomial recursive sequences, algorithmically unsolvable problems may appear. Then, of course, no formulas for calculating the common term of a polynomial recursive sequence in the general case should be expected. So far this assumption has not been proven, and integer polynomial recursive sequences are practically an unexplored object. In the early 2000s, the author proposed to consider “almost polynomial” recursive sequences – sequences, the generating functions of which are defined by superpositions of polynomial functions and some simple “almost polynomial” functions. As it turned out, when adding to the set of polynomial functions, for example, functions of type $sg(x)$, recursive sequences with algorithmically unsolvable problems appear. This suggests that in the case of polynomial recursive sequences over a set of integers, the recursive sequences themselves should be rather complicated from an algorithmic point of view. The substantiation of this assumption is the purpose of this article. To talk about the complexity of recursive sequences, it is necessary first of all to determine the tool with which you can will evaluate the complexity of the sequences in question. A single-tape Turing machine operating in a three-letter alphabet was chosen as such a tool. Calculations on these Turing machines can be modeled by integer recursive sequences with a polynomial generating function. As a result, for a number of problems related to recursive sequences of this type, lower superexponential estimates of the complexity of their solution are obtained. *Materials and methods.* The constructions and proofs use techniques and methods from the theory of computable functions. *Results and conclusions.* We consider recursive sequences over a set of integers with polynomial generating functions. Calculations on deterministic Turing machines are modeled using these sequences. It follows from the modeling process that some algorithmic problems for the considered recursive sequences may be EXPSPACE-complete. Thus, integer polynomial recursive sequences from an algorithmic point of view represent a rather complex object.

Keywords: a recursive sequence, a polynomial over a set of integers

For citation: Marchenkov S.S. On the complexity of integer polynomial recursive sequences. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2022;(2):17–27. (In Russ.). doi:10.21685/2072-3040-2022-2-2

Введение

Пусть M – непустое множество, $f(x_1, \dots, x_r)$ – функция на множестве M . Возвратная (рекуррентная) последовательность порядка r над множеством M есть последовательность

$$a_1, a_2, a_3, \dots, \quad (1)$$

которая при любом $n \geq 1$ удовлетворяет соотношению

$$a_{n+r} = f(a_n, \dots, a_{n+r-1}).$$

Возвратная последовательность (1) полностью определяется первыми r членами a_1, \dots, a_r и функцией f , которую будем называть порождающей функцией последовательности (1).

Если функция f линейна, то возвратная последовательность (1) называется линейной. Линейные возвратные последовательности полностью охарактеризованы, когда M – поле комплексных чисел [1] или поле Галуа [2]. В этих случаях они определяются через корни соответствующих характеристических многочленов. Если функция f является полиномиальной, то возвратную последовательность (1) будем также называть полиномиальной.

Для полиномиальных, но нелинейных функций f в общем случае не известно никаких результатов о порождаемых ими возвратных последовательностях (даже когда M – множество натуральных чисел). В связи с этим в работах [3–5] рассматривались почти полиномиальные возвратные последовательности – возвратные последовательности над множеством целых чисел, у которых порождающие функции получаются суперпозициями полиномиальных функций и функций, «близких» к полиномиальным. Было обнаружено, что для некоторых простых «почти полиномиальных» функций (например, функции $\text{sg}(x)$) возникающие возвратные последовательности обладают рядом алгоритмически неразрешимых проблем. Применить эти результаты и конструкции для получения аналогичных результатов, относящихся к полиномиальным возвратным последовательностям, не удастся. Вместе с тем алгоритмическая неразрешимость ряда проблем для разнообразных почти полиномиальных возвратных последовательностей показывает, что, вероятно, данные проблемы должны быть трудно разрешимыми и для полиномиальных возвратных последовательностей.

В настоящей работе рассматриваются возвратные последовательности над множеством целых чисел с полиномиальными порождающими функциями. Чтобы оценить сложность подобных возвратных последовательностей, необходимо в качестве «эталоны сложности» выбрать некоторые абстрактные вычислительные устройства. Мы рассматриваем обычные одноленточные машины Тьюринга с входным алфавитом $\{0, 1, \lambda\}$. Сначала вычисления на указанных машинах Тьюринга с ограничениями на зону вычисления моделируем посредством возвратных последовательностей над конечным множеством, являющимся расширением алфавита $\{0, 1, \lambda\}$. Затем осуществляем эффективный переход к возвратным последовательностям над множеством $\{0, 1\}$ и в заключение – к полиномиальным возвратным последовательностям над множеством целых чисел. В результате для данных возвратных последовательностей получаем экспоненциальные емкостные (ленточные) и сверхэкспоненциальные временные нижние оценки сложности решения некоторых алгоритмических проблем.

Основные понятия

Рассматриваем одноленточную детерминированную машину Тьюринга T с входным алфавитом $\{0,1,\lambda\}$ (λ – «пустой» символ) и множеством внутренних состояний $Q = \{q_0, q_1, \dots, q_s\}$, где q_1 – начальное состояние, q_0 – заключительное состояние. Функционирование машины T определяется программой, которая состоит из команд вида

$$aq_i \rightarrow bq_jM, \quad (2)$$

где $a, b \in \{0,1,\lambda\}$, $0 \leq i, j \leq s$, $i \neq 0$, $M \in \{L, R\}$ (нам удобно рассматривать машину, которая сдвигает головку на каждом шаге вычисления, что, разумеется, не умаляет общности рассуждений). Для любой пары (a, q_i) программа машины T содержит не более одной команды (2) с левой частью aq_i (детерминированность машины T). Вместе с тем по техническим причинам будем предполагать, что для любой пары (a, q_i) , где $i \neq 0$, в программе машины T имеется команда с левой частью aq_i .

Команда (2) интерпретируется обычным образом: если в момент времени t машина T находится в состоянии q_i , а ее головка обозревает символ a , то в момент времени $(t+1)$ машина T будет находиться в состоянии q_j , обозреваемый символ a на ленте будет заменен символом b , а головка на ленте сдвинется на одну клетку влево или вправо в зависимости от равенства $M = L$ или $M = R$. В начальный момент времени на ленте машины T записано некоторое слово α в алфавите $\{0,1\}$, все остальные клетки ленты заполнены символом λ , машина находится в состоянии q_1 , а ее головка обозревает первый символ слова α . Работа машины заканчивается по достижении ею заключительного состояния q_0 . В этом случае говорим, что машина T применима к слову α . Множество всех слов в алфавите $\{0,1\}$, к которым применима машина T , образует язык, допускаемый (распознаваемый) машиной T .

В дальнейшем будем рассматривать ограничения $S(n)$ на размер ленты, используемой в вычислении на машине T . Будем говорить, что машина T работает с зоной $S(n)$, если для всякого входного слова α длины n вычисление машины на входе α использует не более $S(n)$ клеток ленты (сюда входят и клетки ленты, занятые словом α). Удобно предполагать, что $S(n)$ клеток зоны вычисления начинаются в первой клетке слова α и распространяются только вправо от этой клетки. (Это ограничение можно было бы сразу внести в определение машины T , потребовав, чтобы лента машины была односторонней вправо, в алфавите машины имелся символ l , отличный от символов $\{0,1,\lambda\}$, в начальный момент на ленте машины записывалось слово $l\alpha$ и в процессе вычисления машина не стирала бы данный символ l и не вписывала его в другие клетки. Однако мы предпочитаем оставаться в рамках первоначального соглашения.)

Положим

$$A = \{0,1,\lambda\} \cup \{0,1,\lambda\} \times \{0,1,\dots,s\}.$$

Если $a \in \{0,1,\lambda\}$, $i \in \{0,1,\dots,s\}$, то посредством (a,i) будем обозначать символ множества $\{0,1,\lambda\} \times \{0,1,\dots,s\}$.

Пусть машина T работает с зоной $S(n)$, в момент времени t на ленте машины записано слово $a_1 \dots a_{S(n)}$, где $a_1, \dots, a_{S(n)} \in \{0,1,\lambda\}$, машина находится в состоянии q_i и головка обозревает символ a_m ($1 \leq m \leq S(n)$). Назовем конфигурацией машины T в момент времени t слово

$$a_1 a_2 \dots a_{m-1} (a_m, i) a_{m+1} \dots a_{S(n)}$$

в алфавите A .

Результаты

Пусть T – машина Тьюринга с входным алфавитом $\{0,1,\lambda\}$, m – натуральное число и $g(x_1, \dots, x_m)$ – функция на множестве A . И пусть слово α длины m является начальной конфигурацией машины T , а возвратная последовательность $F(\alpha, g)$ определяется начальными значениями α и порождающей функцией g . Будем говорить, что возвратная последовательность $F(\alpha, g)$ моделирует вычисление машины T с начальной конфигурацией α , если последовательность $F(\alpha, g)$ содержит все конфигурации вычисления машины T (начиная с конфигурации α) в том порядке, в котором они появляются в вычислении машины T .

Покажем, как можно промоделировать работу машины T над словами длины $S(n) \geq 4$ в алфавите $\{0,1,\lambda\}$ возвратными последовательностями порядка $S(n)$ в алфавите A . С этой целью определим функцию $f(x_1, \dots, x_{S(n)})$ типа $A^{S(n)} \rightarrow A$. Пусть $(a_1, \dots, a_{S(n)})$ – произвольный набор из $A^{S(n)}$. Возможны следующие случаи:

(1a) $a_1 \in \{0,1,\lambda\}$, $a_2 = (a,i)$ и в программе машины T имеется команда (2), где $M = L$.

(1b) $a_1, a_2, a_{S(n)-1} \in \{0,1,\lambda\}$, $a_{S(n)} = (a,i)$ и в программе машины T имеется команда (2), где $M = R$.

В этих случаях полагаем

$$f(a_1, a_2, \dots, a_{S(n)}) = (a_1, j).$$

(2a) $a_1 = (a,i)$, $a_2 \in \{0,1,\lambda\}$, $a_{S(n)} = (c,j)$ и в программе машины T имеется команда (2), где $M = L$.

(2b) $a_1 = (a,i)$, $a_2 = (c,j)$ и в программе машины T имеется команда (2), где $M = R$.

В этих случаях полагаем

$$f(a_1, a_2, \dots, a_{S(n)}) = b.$$

(3) Во всех остальных случаях полагаем

$$f(a_1, a_2, \dots, a_{S(n)}) = a_1.$$

Отметим, что функция $f(x_1, \dots, x_{S(n)})$ существенно зависит только от переменных $x_1, x_2, x_{S(n)-1}, x_{S(n)}$.

На множестве $A^{S(n)} \times A^{S(n)}$ определим бинарное отношение \vdash . Полагаем

$$(a_1, a_2, \dots, a_{S(n)}) \vdash (b_1, b_2, \dots, b_{S(n)})$$

в том и только том случае, когда

$$b_1 = a_2, b_2 = a_3, \dots, b_{S(n)-1} = a_{S(n)}, b_{S(n)} = f(a_1, a_2, \dots, a_{S(n)}).$$

Через \vDash обозначим рефлексивно-транзитивное замыкание отношения \vdash .

Теорема 1. Пусть T – машина Тьюринга с входным алфавитом $\{0, 1, \lambda\}$, $n \geq 4$, α – слово длины n в алфавите $\{0, 1\}$, функция $S(n)$ натурального аргумента удовлетворяет неравенству $S(n) \geq n$, функция $f(x_1, \dots, x_{S(n)})$ определена условиями 1–3, а возвратная последовательность $F(\alpha, f)$ порядка $S(n)$ – функцией f и начальными значениями $\alpha, \lambda, \dots, \lambda$. Тогда возвратная последовательность $F(\alpha, f)$ моделирует вычисление машины Тьюринга T на входном слове α с зоной $S(n)$.

Доказательство. Пусть $a_1 \dots a_{m-1}(a, i)a_{m+1} \dots a_{S(n)}$ – произвольная не-заключительная конфигурация машины T . Покажем, что для конфигурации $b_1 \dots b_{S(n)}$ машины T , непосредственно следующей за конфигурацией $a_1 \dots a_{m-1}(a, i)a_{m+1} \dots a_{S(n)}$, выполняется соотношение

$$(a_1, \dots, a_{m-1}, (a, i), a_{m+1}, \dots, a_{S(n)}) \vDash (b_1, \dots, b_{S(n)}).$$

Сначала рассмотрим случай, когда в программе машины T имеется команда (2) с левой частью aq_i и $M = L$. В этом случае равенство $m = 1$ не может выполняться по определению вычисления с зоной $S(n)$. Если $m > 2$, то к набору $(a_1, \dots, a_{m-1}, (a, i), a_{m+1}, \dots, a_{S(n)})$ применим только пункт 3. Применяя его $(m - 2)$ раза, получим

$$(a_1, \dots, a_{m-1}, (a, i), a_{m+1}, \dots, a_{S(n)}) \vDash (a_{m-1}, (a, i), a_{m+1}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-2}).$$

Теперь выполняются условия пункта 1а. Это дает соотношение

$$(a_{m-1}, (a, i), a_{m+1}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-2}) \vdash ((a, i), a_{m+1}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-2}, (a_{m-1}, j)).$$

Далее применяем пункт 2а и получаем

$$((a, i), a_{m+1}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-2}, (a_{m-1}, j)) \vdash (a_{m+1}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-2}, (a_{m-1}, j), b).$$

Наконец, применение $(S(n) - m)$ раз пункта 3 к последнему набору дает искомым результат:

$$\begin{aligned} & (a_{m+1}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-2}, (a_{m-1}, j), b) \vdash \\ & \vdash (a_1, \dots, a_{m-2}, (a_{m-1}, j), b, a_{m+1}, \dots, a_{S(n)}). \end{aligned}$$

Случай $m = 2$ фактически содержится в рассмотренном случае $m > 2$.

Пусть теперь в программе машины T имеется команда (2) с левой частью aq_i и $M = R$. Тогда в силу определения зоны $S(n)$ должно быть $m < S(n)$. Дальнейшие рассуждения во многом аналогичны рассуждениям в случае $M = L$. Сначала применяем к исходному набору m раз пункт 3 и получаем соотношение

$$(a_1, \dots, a_{m-1}, (a, i), a_{m+1}, \dots, a_{S(n)}) \vdash (a_{m+1}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-1}, (a, i)).$$

Далее пользуемся пунктом 1b, что дает

$$\begin{aligned} & (a_{m+1}, a_{m+2}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-1}, (a, i)) \vdash \\ & \vdash (a_{m+2}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-1}, (a, i), (a_{m+1}, j)). \end{aligned}$$

Следующий этап – применение $(S(n) - 2)$ раза пункта 3:

$$\begin{aligned} & (a_{m+2}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-1}, (a, i), (a_{m+1}, j)) \vdash \\ & \vdash ((a, i), (a_{m+1}, j), a_{m+2}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-1}). \end{aligned}$$

Затем применяем пункт 2b:

$$\begin{aligned} & ((a, i), (a_{m+1}, j), a_{m+2}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-1}) \vdash \\ & \vdash ((a_{m+1}, j), a_{m+2}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-1}, b). \end{aligned}$$

И в заключение применяем $(S(n) - m)$ раз пункт 3:

$$\begin{aligned} & ((a_{m+1}, j), a_{m+2}, \dots, a_{S(n)}, a_1, \dots, a_{m-1}, b) \vdash \\ & \vdash (a_1, \dots, a_{m-1}, b, (a_{m+1}, j), a_{m+2}, \dots, a_{S(n)}). \end{aligned}$$

Теорема доказана.

Из доказательства теоремы 1 вытекает, что в возвратной последовательности $F(\alpha, f)$ за незаключительной конфигурацией непосредственно следующая конфигурация располагается на расстоянии $S(n)$, если головка машины сдвигается влево, и на расстоянии $2S(n)$ – если головка сдвигается вправо. Кроме того, нетрудно видеть, что в возвратной последовательности $F(\alpha, f)$ за заключительной конфигурацией на расстоянии $S(n)$ располагается та же самая заключительная конфигурация.

Теорема 1 позволяет сделать некоторые выводы о сложности возвратных последовательностей над конечным множеством. Как следует из определений, рассматриваемая возвратная последовательность $F(\alpha, f)$ определяется двоичным набором $\alpha = (a_1, \dots, a_n)$, величиной $S(n)$ и порождающей функцией $f(x_1, \dots, x_{S(n)})$. Последняя функция существенно зависит только от пе-

ременных $x_1, x_2, x_{S(n)-1}, x_{S(n)}$. Поэтому, исключая «константную сложность» дискретной функции от четырех переменных, получаем, что сложность задания функции $f(x_1, \dots, x_{S(n)})$ практически совпадает со сложностью двоичного представления числа $S(n)$. Таким образом, если говорить о сложности задания возвратной последовательности $F(\alpha, f)$, то она по существу определяется двумя параметрами: длиной n двоичного набора α и длиной двоичного представления числа $S(n)$, по порядку равной $\log(S(n))$.

Теорема 1 доказана нами для любой функции $S(n)$, удовлетворяющей неравенству $S(n) \geq n$. Однако на практике интерес представляют лишь такие функции $S(n)$, которые могут служить достижимыми (ленточно конструируемыми) границами зоны вычислений на машине Тьюринга (см. [6, 7]). Помимо этого, сложность задания возвратной последовательности $F(\alpha, f)$ хотелось бы видеть близкой к n . В связи с этим наибольший интерес, на наш взгляд, представляют функции $S(n)$ вида c^n , где c – натуральное число. В этом случае сложность задания возвратной последовательности $F(\alpha, f)$ по порядку равна n , а вычисление на моделируемой машине Тьюринга может продолжаться без заикливания примерно 3^{c^n} тактов. Таким образом, создается возможность формулировать алгоритмические проблемы для возвратных последовательностей, имеющие нижнюю емкостную оценку вида c^n и нижнюю временную оценку сложности вида 3^{c^n} . Для этого необходимо выбрать машину Тьюринга с входным алфавитом $\{0, 1, \lambda\}$, которая на зоне c^n распознает язык, полиномиально полный в классе языков, детерминированно распознаваемых на зоне c^n , т.е. полиномиально EXPSPACE-полной [6, 7].

Однако полученные результаты еще невозможно использовать для возвратных последовательностей над множеством целых чисел с полиномиальными порождающими функциями. В качестве следующего шага мы ходим показать, что те же самые результаты будут справедливы для возвратных последовательностей над множеством $\{0, 1\}$ с булевыми порождающими функциями. Для этого определим некоторое кодирование символов алфавита A словами алфавита $\{0, 1\}$ и соответствующим образом преобразуем функции f .

Пусть алфавит A содержит k символов. Выберем число d так, чтобы выполнялось неравенство $2^d \geq k$, и определим равномерное (словами одинаковой длины) кодирование φ символов алфавита A двоичными словами длины $(4d + 2)$. Пусть φ_1 есть инъективное отображение алфавита A в множество $\{0, 1\}^d$, а отображение φ_2 получается из отображения φ_1 , если в каждом кодовом слове $\varphi_1(a)$ одновременно заменить все символы 0 словом 00, а все символы 1 словом 11. Искомое кодирование φ определим теперь равенством

$$\varphi(a) = \varphi_2(a)\varphi_1(a)01,$$

где $a \in A$.

Покажем, что перестановка в кодовом слове не более чем $(4d + 1)$ первых символов в конец слова не приводит к потере информации об исходном кодовом слове. Более точно, пусть $a_1 \dots a_m$ – слово в алфавите A , $m \geq 4$, $V = \varphi(a_1) \dots \varphi(a_m)$, $1 \leq r \leq 4d + 1$, и слово W получается из слова V удалением префикса Q длины r и приписыванием его справа к полученному после удаления слову. Покажем, что слово Q однозначно восстанавливается по первым $4(2d + 1)$ и последним $2(2d + 1)$ символам слова W .

В самом деле, если $r \leq 4d$, то начало слова W длины $4(2d + 1)$ непременно содержит подслово вида $01\varphi(a)$, причем только одно такое слово. Если же $r = 4d + 1$, то начало слова W длины $4(2d + 1)$ имеет вид $1\varphi(a)\varphi_2(b)\varphi_2(b)0$. По первым $4(2d + 1)$ символам слова W можно однозначно определить, какой именно случай имеет место. Это вытекает из того, что слово вида $1\varphi(a)\varphi_2(b)\varphi_2(b)0$ не может содержать подслово вида $01\varphi(c)$.

Если имеет место первый случай (т.е. $r \leq 4d$), то подслово $01\varphi(a)$ единственно, а r равно разности между $(4d + 2)$ и длиной начала слова W , которое заканчивается первым символом слова $\varphi(a)$. Слово Q в этом случае определяется последними r символами слова W .

Пусть имеет место второй случай. Тогда $r = 4d + 1$ и слово Q образуют последние $(4d + 1)$ символов слова W .

Определим аналог функции $f(x_1, \dots, x_{S(n)})$ – булеву функцию $g(y_1, \dots, y_p)$ от $p = 2(2d + 1)S(n)$ переменных. Аналогично функции f функция g будет существенно зависеть только от первых $4(2d + 1)$ переменных и последних $4(2d + 1)$ переменных. Мы хотим перенести на функцию g идею, примененную в пунктах 1–3 определения функции f . Основная техническая трудность здесь состоит в том, что каждая буква алфавита A кодируется двоичным словом длины $2(2d + 1)$, и при посимвольной обработке этого слова возможна потеря информации о кодируемой букве. Эта трудность преодолевается за счет повторения в коде $\varphi(a)$ слова $\varphi_2(a)$.

Более точно, пусть булев вектор (a_1, \dots, a_p) таков, что для некоторых q , $1 \leq q < 4d$, и $a \in A$ началом слова $a_1 \dots a_p$ служит слово $a_1 \dots a_q \varphi_2(a)01$. Тогда для вычисления значения $g(a_1, \dots, a_p)$ в соответствии с пунктами 1–3 используем код $\varphi_2(a)$. Если же для выбранных q и a началом слова $a_1 \dots a_p$ является слово $a_1 \dots a_q 01\varphi(a)$, то для вычисления значения $g(a_1, \dots, a_p)$ используем код $\varphi_2(b)$, где $b \in A$ и слово $\varphi_2(b)a_{p-2d+q+1} \dots a_p$ есть конец слова $a_1 \dots a_p$.

В качестве примера рассмотрим определение значения $g(a_1, \dots, a_p)$ в случае, аналогичном случаю 2а для функции f . Пусть для некоторых q , $1 \leq q \leq 2d$, и a, b_1, b_2 из $\{0, 1, \lambda\}$ начало слова $a_1 \dots a_p$ имеет вид $a_1 \dots a_q \varphi_2(a, i)01\varphi(b_1)$, конец – вид $\varphi(b_2, j)a_{p-2d+q+1} \dots a_p$ и в программе машины T имеется команда (2), где $M = L$. Тогда значение $g(a_1, \dots, a_p)$ полагаем равным $(2d - q + 1)$ -му разряду слова $\varphi_2(b)$.

Пусть для некоторых q , $1 \leq q \leq 2d$, и b_1, b_2 из $\{0, 1, \lambda\}$ начало слова $a_1 \dots a_p$ имеет вид $a_1 \dots a_q 01\varphi(b_1)$, а конец – вид $\varphi(b_2, j)\varphi_2(b)a_{p-2d+q+1} \dots a_p$. Тогда $g(a_1, \dots, a_p)$ полагаем равным $(2d - q + 1)$ -му разряду слова $\varphi_2(b)$.

Рассмотрение аналога случая 2а завершаем определением значения $g(a_1, \dots, a_p)$, когда слово $a_1 \dots a_p$ имеет начало вида $01\varphi(b_1)$ или $1\varphi(b_1)$. Тогда полагаем соответственно $g(a_1, \dots, a_p) = 0$ и $g(a_1, \dots, a_p) = 1$. Заметим еще, что при выполнении аналога пункта 3 мы пользуемся установленной выше возможностью восстанавливать исходное кодовое слово, когда из начала слова в его конец переставлен префикс длины q , где $1 \leq q \leq 2d + 1$.

Заметим, что переход от возвратных последовательностей в алфавите A и порождающих функций на множестве A к возвратным последовательностям в алфавите $\{0, 1\}$ и булевым порождающим функциям проведен эффективно. Более того, как нетрудно видеть, указанный переход (от начальных членов последовательности и порождающей функции) можно выполнить на машине Тьюринга за квадратичное время. Это показывает, что отмеченные выше проблемы для возвратных последовательностей в алфавите A с очевидными изменениями переносятся на возвратные последовательности в алфавите $\{0, 1\}$. Мы не будем оформлять этот результат в виде отдельной теоремы, а сразу перейдем к множеству целых чисел и полиномам над этим множеством.

Напомним следующий общеизвестный факт: любую булеву функцию можно реализовать формулой над множеством функций, состоящим из \bar{x} (отрицание) и $x \& y$ (конъюнкция). Заметим также, что данные булевы функции на множестве $\{0, 1\}$ можно выразить целочисленными полиномами $(1 - x)$ и $xу$. Отсюда сразу следует, что любая булева функция на множестве $\{0, 1\}$ представима некоторым целочисленным полиномом. Это позволяет при рассмотрении возвратных последовательностей над множеством $\{0, 1\}$ в качестве порождающих функций использовать специальные полиномы с целыми коэффициентами, полученные суперпозициями функций $(1 - x), xу$. Поскольку указанный переход от булевых функций (заданных формулами в базисе $\{\bar{x}, x \& y\}$) к соответствующим полиномиальным функциям выполняется за полиномиальное время, мы приходим к следующему утверждению.

Теорема 2. Пусть T – машина Тьюринга с входным алфавитом $\{0, 1, \lambda\}$, функция φ (определенная выше) осуществляет равномерное кодирование букв алфавита A двоичными словами длины $(4d + 2)$, а функция $S(n)$ натурального аргумента удовлетворяет неравенству $S(n) \geq n$. Тогда существует полиномиальный алгоритм, который для любого $n \geq 4$ по двоичной записи числа $S(n)$ строит полиномиальную функцию

$$q\left(x_1^1, \dots, x_1^{4d+2}, x_2^1, \dots, x_2^{4d+2}, \dots, x_{S(n)-1}^1, \dots, x_{S(n)-1}^{4d+2}, x_{S(n)}^1, \dots, x_{S(n)}^{4d+2}\right)$$

такую, что для любого слова $a_1 \dots a_n$ в алфавите $\{0, 1\}$ возвратная последовательность, определенная начальными значениями $\varphi(a_1) \dots \varphi(a_n)\varphi(\lambda) \dots \varphi(\lambda)$ и

порождающей функцией q , моделирует применение машины T к слову $a_1 \dots a_n$ на зоне $S(n)$ при кодировании букв алфавита A кодом φ .

Список литературы

1. Холл М. Комбинаторика. М. : Мир, 1970. 424 с.
2. Нечаев В. И. Элементы криптографии. Основы теории защиты информации. М. : Высшая школа, 1999. 108 с.
3. Марченков С. С. О сложности возвратных последовательностей // Дискретная математика. 2003. Т. 15, № 2. С. 52–62.
4. Марченков С. С. О сложности полиномиальных возвратных последовательностей // Проблемы передачи информации. 2018. Т. 54, № 3. С. 67–72.
5. Марченков С. С. О полиномиально-модульных возвратных последовательностях // Дискретная математика. 2022. Т. 34, № 2. С. 39–45.
6. Ахо А., Хопкрофт Дж., Ульман Дж. Построение и анализ вычислительных алгоритмов. М. : Мир, 1979. 536 с.
7. Sipser M. Introduction to the theory of computation. Boston : PWS Publishing Company, 1997. 458 p.

References

1. Khol M. *Kombinatorika = Combinatorics*. Moscow: Mir, 1970:424. (In Russ.)
2. Nechaev V.I. *Elementy kriptografii. Osnovy teorii zashchity informatsii = Elements of cryptography. Fundamentals of information security theory*. Moscow: Vysshaya shkola, 1999:108. (In Russ.)
3. Marchenkov S.S. On the complexity of recursive sequences. *Diskretnaya matematika = Discrete math*. 2003;15(2):52–62. (In Russ.)
4. Marchenkov S.S. On the complexity of polynomial recursive sequences. *Problemy peredachi informatsii = Information transfer problems*. 2018;54(3):67–72. (In Russ.)
5. Marchenkov S.S. On polynomial-modular recursive sequences. *Diskretnaya matematika = Discrete math*. 2022;34(2):39–45. (In Russ.)
6. Akho A., Khopcroft Dzh., Ul'man Dzh. *Postroenie i analiz vychislitel'nykh algoritmov = Construction and analysis of computational algorithms*. Moscow: Mir, 1979:536. (In Russ.)
7. Sipser M. *Introduction to the theory of computation*. Boston: PWS Publishing Company, 1997:458.

Информация об авторах / Information about the authors

Сергей Серафимович Марченков

доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры
математической кибернетики,
Московский государственный
университет имени М. В. Ломоносова
(Россия г. Москва, ул. Ленинские горы, 1)

E-mail: ssmarchen@yandex.ru

Sergey S. Marchenkov

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, professor
of the sub-department of mathematical
cybernetics, Lomonosov Moscow
State University (1 Leninskiye gory
street, Moscow, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 24.05.2022

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 15.06.2022

Принята к публикации / Accepted 20.06.2022

УДК 004.021; 004.023; 519.17
doi:10.21685/2072-3040-2022-2-3

О графовой модели для задач рефлектометрии и некоторых алгоритмах их решения. Часть I. Постановка задачи и подходы к алгоритмизации

Б. Ф. Мельников¹, Ю. Ю. Терентьева²

^{1,2}Центр информационных технологий и систем
органов исполнительной власти, Москва, Россия

bormel@mail.ru, terjul@mail.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Актуальность рассматриваемой предметной области обусловлена прежде всего необходимостью минимизации стоимости так называемых рефлектометров при имеющемся ограничении на условие тотального мониторинга волоконно-оптических кабелей. Подобные задачи возникают при проектировании и/или модернизации сети связи, причем они особенно важны в тех ситуациях, когда сеть связи имеет очень большую размерность. Целью является исследование возможности применения метода ветвей и границ в нескольких схожих постановках задачи рефлектометрии. *Материалы и методы.* Применены эвристические алгоритмы искусственного интеллекта и дискретной оптимизации, объединенные в единый программный пакет, а также статистические методы анализа алгоритмов. *Результаты.* Результатами являются закономерности, полученные при применении жадной эвристики и вариантов метода ветвей и границ при решении задач рефлектометрии. *Выводы.* Были предложены алгоритмы, описывающие улучшение метода ветвей и границ с помощью подключения к нему различных вспомогательных эвристик. Однако полученное временное улучшение среднего времени работы этого алгоритма в рассмотренной нами прикладной задаче – по сравнению с жадным алгоритмом – очень невелико, это позволяет сделать предварительные выводы о том, что в задачах рефлектометрии достаточным является применение простейших жадных алгоритмов.

Ключевые слова: эвристические алгоритмы, задачи дискретной оптимизации, модели теории графов, жадный алгоритм, метод ветвей и границ

Для цитирования: Мельников Б. Ф., Терентьева Ю. Ю. О графовой модели для задач рефлектометрии и некоторых алгоритмах их решения. Часть I. Постановка задачи и подходы к алгоритмизации // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2022. № 2. С. 28–39. doi:10.21685/2072-3040-2022-2-3

On a graph model for reflectometry issues and some algorithms for their solution. Part 1. Issue statement and approaches to algorithmics

B.F. Mel'nikov¹, Yu.Yu. Terent'eva²

^{1,2}Centre of Information Technologies and Systems
for Executive Authorities, Moscow, Russia

bormel@mail.ru, terjul@mail.ru

Abstract. *Background.* The relevance of the subject area under consideration is primarily due to the need to minimize the cost of so-called reflectometers, with the existing re-

striction on the condition of total monitoring of fiber-optic cables. Similar tasks arise when designing and / or upgrading a communication network, and they are especially important in situations where the communication network has a very large dimension. The purpose of the research is to study the possibility of using the method of branches and boundaries in some similar formulations of the problem of reflectometry. *Materials and methods.* The research uses heuristic algorithms of artificial intelligence and discrete optimization, combined into a single software package, as well as statistical methods for analyzing algorithms. *Results.* The results are regularities obtained by applying the greedy heuristics and the version of the method of branches and boundaries in solving problems of reflectometry. *Conclusions.* Algorithms have been proposed describing the improvement of the branch and boundary method by connecting various auxiliary heuristics to it. However, the obtained temporary improvement in the average operating time of this algorithm in the applied problem we have considered, compared to the greedy algorithm, is very small, and this allows us to draw preliminary conclusions that the use of the simplest greedy algorithms is sufficient in reflectometry problems.

Keywords: heuristic algorithms, discrete optimization problems, graph theory models, greedy algorithm, method of branches and boundaries

For citation: Mel'nikov B.F., Terent'eva Yu.Yu. On a graph model for reflectometry issues and some algorithms for their solution. Part 1. Issue statement and approaches to algorithms. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2022;(2):28–39. (In Russ.). doi:10.21685/2072-3040-2022-2-3

Введение

В настоящей статье мы:

- рассматриваем достаточно актуальную задачу рефлектометрии¹;
- предлагаем для нее графовую модель;
- приводим несколько возможных алгоритмов решения задачи в рамках предложенной модели;
- приводим краткие результаты первых проведенных вычислительных экспериментов;
- а также – на основе этих результатов – делаем выводы о возможном применении этих алгоритмов; пока это предварительные выводы.

В этой работе мы рассматриваем тему рефлектометрии оптических волокон сети связи, связанную с выявлением участков волоконно-оптического кабеля, которые могут быть изменены в результате воздействия внутренних или внешних дестабилизирующих факторов. В рамках этой темы рассматривается конкретная задача – задача оптимального размещения рефлектометров на объектах сети.

Настоящая статья продолжает тематику работ [1–5]. Будем без дополнительных пояснений пользоваться описанной в этих работах терминологией, а также терминами, введенными непосредственно в них («правая (под)задача», «левая (под)задача», «последовательность правых подзадач» и др.)². Мы продолжаем рассмотрение применения метода ветвей и границ

¹ Согласно Википедии и многим сайтам на ее основе «рефлектометрия – это технология, позволяющая определять различные характеристики исследуемой среды по отражению отклика сигнала: поверхности (например, определение коэффициентов отражения и поглощения) или объемной среды (например, изучение распределения неоднородностей в оптическом волокне)».

² См. также приведенные в них ссылки.

(МВГ) (точнее, его расширения, ранее названного нами *мультиэвристическим подходом*) в самых различных задачах дискретной оптимизации. При этом мы к «обычным» вариантам метода ветвей и границ добавляем несколько вспомогательных эвристических алгоритмов, которые почти одинаково реализуются в различных предметных областях. Однако, в отличие от всех остальных предметных областей, здесь мы в процессе вычислительных экспериментов *не получили* какого-либо приемлемого выигрыша от применения метода ветвей и границ – вследствие чего делаем *предварительное* заключение о том, что в рассматриваемой предметной области более удачными являются самые простые (жадные) алгоритмы.

Настоящая часть I содержит общее описание нескольких вариантов постановки рассматриваемой задачи и основных подходов к ее алгоритмизации; она включает разделы 1–5. В разделе 1 мы рассматриваем актуальность темы и, в частности, приводим несколько связанных предметных областей, в которых возможны рассматриваемые здесь задачи. Раздел 2 посвящен неформальному описанию рассматриваемой в статье задачи дискретной оптимизации, а формальная графовая модель для одного из возможных упрощенных вариантов приведена в разделе 3. В разделе 4 также формально описан жадный алгоритм решения одной из рассматриваемых задач – причем с несколькими разными возможностями для целевой функции. В разделе 5 приведены варианты решения задачи методом ветвей и границ и особенности этих алгоритмов в рассматриваемой задаче. Специально отметим, что мы рассматривали несколько вариантов МВГ, условия выполнения которых могут быть упорядочены «от более жестких» (где однажды выполненное действие не может быть отменено, по крайней мере на рассматриваемой ветви вычислений) к «менее жестким».

Разделы 6–8 включены в часть II «Подход к программной реализации». В разделе 6 приведено краткое описание программной реализации, рассмотрены алгоритмы генерации входных данных для проведения вычислительных экспериментов: в отличие от большинства рассматривавшихся нами ранее прикладных задач дискретной оптимизации, здесь такая генерация – одна из основных составляющих всей рассматриваемой задачи (и предмета настоящей статьи). В разделе 8 приведены краткие результаты вычислительных экспериментов – и стоит отметить, что в реальности временное улучшение МВГ по сравнению с жадным алгоритмом ни разу не превысило 6 %. В заключении приводим предварительные выводы о сравнительной эффективности рассматриваемых для задач рефлектотрии алгоритмах.

1. Актуальность темы

Актуальность рассматриваемой предметной области обусловлена прежде всего необходимостью минимизации стоимости так называемых рефлектотров при имеющемся ограничении на условие тотального мониторинга волоконно-оптических кабелей. Решения конкретных задач дискретной оптимизации, возникающих в предметной области, должны содержать:

- подмножество объектов сети связи, на которых следует размещать рефлектотры,
- указание конкретного типа рефлектотра на объекте, технические характеристики которого являются параметрами, влияющими на формирование вышеупомянутого подмножества.

Подобные задачи возникают при проектировании и/или модернизации сети связи, причем они особенно важны в тех ситуациях, когда сеть связи имеет очень большую размерность¹. Поиск возможных *практических алгоритмов* решений этой задачи, являющейся NP-сложной², и составляет предмет настоящей статьи.

Таким образом, рассматриваемая здесь чисто инженерная задача имеет существенную математическую составляющую, поскольку при больших размерностях сети связи поиск точного решения становится невозможным и требует исследования в первую очередь подходов к решению, включающих эвристические алгоритмы, синтез классических алгоритмов поиска на графах и т.п., а также разработку самих алгоритмов решения с их апробацией и проведением вычислительных экспериментов.

Важно отметить, что математическая постановка задачи, возникшей из проблемы оптимального размещения рефлектометров на сети связи, может быть использована *и для другой* не менее важной сетевой задачи – задачи оптимального размещения ремонтных бригад (и необходимого запасного оборудования) на узлах связи; такую немного модифицированную формулировку мы предполагаем рассмотреть в дальнейших публикациях.

2. Неформальное описание задачи

Перейдем к *неформальному* описанию рассматриваемой в статье задачи дискретной оптимизации. В виде неориентированного графа задана сеть связи, при этом, как и в других наших моделях [7–10], для каждой вершины графа задается пара ее координат³. Кроме того, заданы несколько видов «осветительных приборов» (далее – «лампы», причем без кавычек), а у каждого вида ламп имеется *мощность* (измеряемая в единицах *длины*) и *стоимость*; при будущем решении можно использовать неограниченное количество ламп каждого вида. Мы должны поместить некоторые лампы в некоторые вершины графа с целью оптимизации значения специальной *целевой функции* (о которой скажем далее).

Во всех моделях, рассматриваемых в статье, мы считаем, что помещенная в вершину лампа освещает все вершины, находящиеся на расстоянии, не превышающем мощности этой лампы⁴ (среди освещенных вершин и сама

¹ Мы пока рассматривали размерности (число вершин графа – узлов сети связи) не превышающие 1000. Однако уже сейчас представляют интерес размерности, большие на порядок, а в ближайшей перспективе – еще на один порядок, т.е. до 100 000.

² NP-сложность этой задачи доказывать не будем. Очевидно, что по терминологии [6] она является трудной (hard).

³ Исключением является лишь [11], где рассматривается оптимизационная задача на графе без привязки вершин последнего к координатам.

⁴ Все расстояния считаются «с точки зрения графов»: это (минимальная) сумма длин *имеющихся в графе* ребер, которые вместе образуют путь между двумя рассматриваемыми вершинами.

В связи с последним – возможно, может показаться спорным термин «освещение»: ведь, согласно имеющимся у нас представлениям «о природе вещей», свет распространяется прямолинейно. Однако, во-первых, мы уже отмечали, что рассматриваем модель оптико-волоконной связи; во-вторых, с нашей точки зрения, очень удачной была бы замена термина «освещение» на близкое по написанию слово «освящение» (чего мы делать всё-таки пока не будем): ведь можно сказать, что именно «святость» передается не далее расстояния, высчитываемого с точки зрения графов.

вершина, в которую эта лампа помещена). Поместить же лампу в вершину (лампу выбираемого нами типа в выбираемую нами вершину графа) можно в процессе решения задачи.

Полная постановка задачи включает некоторое множество вершин графа, в которые лампы помещать запрещено¹. Согласно терминологии, применявшейся в наших предыдущих статьях по применению МВГ в задачах дискретной оптимизации (некоторые ссылки были приведены выше), такие вершины можно назвать «табуированными»; однако этот термин надо отнести даже не к некоторым вершинам, а к парам (вершина, лампа) – впрочем, это не принципиально.

Само выполнение задачи зависит от целевой функции; она обычно заключается в том, что необходимо осветить максимально возможное число вершин², а среди размещений ламп, освещающих такое максимально возможное число вершин, нужно выбрать множество вершин, имеющих минимальную стоимость. При этом возможны многочисленные варианты целевой функции: например, какая-либо линейная комбинация числа вершин и суммарной стоимости освещения³ либо вариант, как-то зависящий от времени выполнения⁴, и т.п. (Забегая вперед, отметим, что любой такой вариант при описании общего алгоритма МВГ и его программной реализации может являться критерием упорядочивания имеющихся подзадач в массиве указателей на эти подзадачи.)

3. Формальная графовая модель

Терминология теории графов согласована с работами [12, 13].

Формальную модель приведем для одного из возможных упрощенных вариантов, когда:

- вершины графа, в которые лампы помещать запрещено, отсутствуют;
- все вершины необходимо осветить;
- целевая функция выбирается как минимум стоимости использованных ламп.

Формулировка проблемы

Входные данные:

- неориентированный граф $G = (V, E)$; считаем, что $V = \{v_1, v_2, \dots, v_m\}$, $E = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$;
- по 2 координаты для каждой из вершин множества V , определяющие вершину графа как точку единичного квадрата, т.е.

¹ Заранее заметим, что при проведении описанных далее вычислительных экспериментов мы такие ограничения не использовали – хотя в наших программах (структурах данных) возможность подобных ограничений имеется.

² При отсутствии вершин графа, в которые лампы помещать запрещено, необходимо осветить все вершины.

³ При этом такие значения входят в целевую функцию с разными знаками.

⁴ Обычно в наших предыдущих вариантах применения МВГ ограничение на время задавалось заранее и применялся так называемый незавершенный МВГ (truncated BVM). С этим вариантом использования МВГ была связана, например, желательность построения так называемой последовательности правых задач, также отраженная в предыдущих публикациях. Однако в настоящей статье мы этот момент не рассматриваем.

$$(\forall i \in \{1, 2, \dots, m\}) (X(i) \in [0,1], Y(i) \in [0,1]);$$

при этом в программе представлять координаты мы будем целыми числами – от 0 до 10^6 (10^6 соответствует значению 1);

• k видов ламп, для каждой имеется мощность (длина освещения) $Dlin(i)$ и стоимость $Cost(i)$, обе функции заданы $\forall i \in \{1, 2, \dots, k\}$.

Вспомогательное определение расстояния между вершинами v_i и v_j : минимальная длина пути по ребрам графа между этими вершинами, где длина ребра вычисляется обычным геометрическим образом:

$$\rho(v_i, v_j) = \left((X(i) - X(j))^2 + (Y(i) - Y(j))^2 \right)^{1/2};$$

формула верна, когда $(\exists e \in E) (e = \{v_i, v_j\})$, но и при невыполнении такого условия определенное здесь расстояние между вершинами v_i и v_j будем обозначать так же $\rho(v_i, v_j)$.

Промежуточное решение: таковым для $i \in \{1, 2, \dots, m\}$ является отображение $K: i \rightarrow \{0, 1, 2, \dots, k\}$; при этом любое положительное число (в качестве значения K) означает номер помещенной в вершину лампы, а 0 – отсутствие таковой.

Стоимость промежуточного решения:

$$\sum_{i \in \{1, 2, \dots, m\}} Cost(K(i)).$$

Допустимое решение: таковым является любое промежуточное решение, в котором все вершины освещены; вершина v является освещенной тогда и только тогда, когда

$$(\exists i \in \{1, 2, \dots, m\}) (\rho(v, v_i) \leq Dlin(K(i)));$$

при этом допускаем вариант $v_i = v$.

Выход: (псевдо)оптимальное размещение (как допустимое решение) – для которого минимизируется стоимость. □

Понятно, что приведенная формулировка может рассматриваться:

- и как задача поиска оптимального решения;
- и как задача поиска псевдооптимального решения, например, при наличии заранее заданных временных ограничений.

4. Жадный алгоритм решения задачи

Простейшая целевая функция жадного алгоритма, которую мы используем в приведенном ниже алгоритме, заключается в оценке числа вновь освещаемых вершин.

Формулировка жадного алгоритма

Входные данные, выходные данные: совпадают с входными и выходными данными формулировки проблемы, приведенной в разделе 3.

Метод.

Шаг 0. Инициализация: в качестве промежуточного решения задаем отображение $K(i) = 0$ для каждого $i \in \{1, 2, \dots, m\}$.

Шаг 1. Если рассматриваемое промежуточное решение является допустимым, то выход из алгоритма с ним в качестве ответа.

Шаг 2. Выбор некоторого i из множества $i \in \{1, 2, \dots, m\}$ такого, что $K(i) = 0$; для него – выбор некоторого j из множества $j \in \{0, 1, 2, \dots, k\}$; при этом выбор пары (i, j) осуществляется таким образом, чтобы максимизировать значение $N / \text{Cost}(j)$, где N – количество *вновь освещенных* вершин при помещении в i -ю вершину j -й лампы¹.

Шаг 3. В случае отсутствия возможности выбора пары (i, j) на шаге 2^2 – выход из алгоритма с имеющимся промежуточным решением в качестве ответа.

Шаг 4. Добавление выбранной пары в промежуточное решение (т.е. присваивание $K(i) = j$) и переход на шаг 1. □

В оставшихся разделах статьи (в том числе в части II) целевую функцию считаем заданной (т.е. считаем, что она сформулирована на шаге 2 приведенного алгоритма) и специально говорить про ее определение не будем; однако, как уже было отмечено, мы рассмотрим ее реализацию.

5. Варианты решения задачи методом ветвей и границ и особенности этих алгоритмов в рассматриваемой задаче

Сразу отметим, что при реализации метода ветвей и границ и в процессе вычислительных экспериментов мы рассматривали несколько вариантов:

- вариант, не использующий МВГ, т.е. фактически просто жадный алгоритм;
- вариант «с простым МВГ», т.е. можно производить присваивание $K(i) = j$ (для некоторых возможных согласно условию задачи i и j); это присваивание для рассматриваемой задачи выполняется в ее правой подзадаче, запрещается в ее левой подзадаче³, при этом в правой подзадаче оно остается неизменным до конца ее обработки;
- вариант «со сложным МВГ» – мы допускаем возможность последующей⁴ замены лампы на более яркую (но не на менее яркую);
- вариант «с очень сложным МВГ» – мы допускаем возможности последующей замены лампы как на более яркую, так и на менее яркую⁵.

¹ Это значение числителя N можно «записать в виде формулы» – однако мы этого делать не будем. Подробно вычисление такого значения N будет прокомментировано в части II.

² Мы оставляем этот шаг – хотя именно для такого описания постановки задачи и рассматриваемого алгоритма такое отсутствие выбора невозможно. А поэтому в нашем варианте ответом всегда будет некоторое допустимое решение (а не просто промежуточное решение). Однако все это возможно в других похожих ситуациях – в связи с чем мы и оставляем описание шага 3.

³ Согласно терминологии наших предыдущих публикаций это присваивание в левой подзадаче является табуированным разрешающим элементом.

⁴ То есть при дальнейшей работе МВГ *на этой ветви вычислений*.

⁵ Такая замена действительно может иметь смысл: в процессе формирования промежуточного решения может возникнуть такая ситуация, когда «рядом» все уже освещено и при этом, в отличие от результатов предварительных вычислений, проведенных с помощью жадной эвристики, «менее яркой» лампы в рассматриваемой вершине достаточно.

Сразу отметим, что здесь при реализации (при представлении структур данных) имеется *три*¹ варианта наличия лампы для будущего шага МВГ:

- «есть» (такая лампа),
- «нет» (такой лампы),
- «запрещена» (такая лампа).

Впрочем, это замечание в большей степени относится к части II настоящей статьи.

Также повторим отмеченное во введении краткое описание всех приведенных вариантов. Можно сказать, что мы рассматриваем несколько вариантов МВГ, условия выполнения которых могут быть упорядочены «от более жестких», в которых однажды выполненное действие не может быть отменено, по крайней мере на рассматриваемой ветви вычислений, – к «менее жестким».

Теперь приведем формальное описание одного из таких алгоритмов МВГ.

Формулировка простого варианта метода ветвей и границ^{2,3}

Входные данные, выходные данные: совпадают с входными и выходными данными формулировки проблемы, приведенной в разделе 3.

Метод.

Шаг 0. Инициализация, состоящая из следующих действий:

- Создать список подзадач, состоящий из единственной подзадачи; в этой исходной подзадаче задаем отображение $K(i) = 0$ для каждого значения $i \in \{1, 2, \dots, m\}$; отметим, что это отображение можно также рассматривать как некоторое промежуточное решение.

- Создать текущее псевдооптимальное решение – совпадающее с таким промежуточным решением.

Шаг 1. Если список подзадач пуст⁴, то выход из алгоритма с ответом, являющимся текущим псевдооптимальным решением.

Шаг 2. Выбор первой подзадачи из имеющегося списка (и исключение ее из списка). Будем называть выбранную подзадачу текущей, обозначая при необходимости T .

Шаг 3. Построение на основе подзадачи T ее правой подзадачи (в новом сегменте памяти), пусть это $T_{\text{П}}$, и одновременная модификация подзадачи T как ее левой подзадачи, пусть это $T_{\text{Л}}$. Правая подзадача строится на основе описанной выше жадной эвристики и, аналогично алгоритму из раздела 4, применяется на этом шаге один раз.

При этом каждая из новых подзадач, $T_{\text{П}}$ и $T_{\text{Л}}$, может оказаться вырожденной, в этом случае на следующих шагах алгоритма она рассматриваться не будет.

¹ А не 2, как обычно.

² «Простым» он был назван в этом разделе выше.

³ Отметим еще, что в описанной формулировке алгоритма МВГ мы *не применяем* вспомогательного алгоритма построения последовательности правых подзадач, которую мы уже упоминали выше.

⁴ Либо при выполнении какого-то другого условия останова. В первую очередь таким возможным условием останова является превышение заранее заданных временных ограничений, но возможны и другие варианты.

Шаг 4. Если T_{II} имеет «малую размерность»¹, то выполнение ее окончательного переборного решения. Если при этом полученное решение лучше текущего псевдооптимального, то замена текущего псевдооптимального решения на вновь полученное.

Если же «малая размерность» не наблюдается, то добавление T_{II} в список подзадач; при этом упорядочивание списка идет согласно критерию, являющемуся специальной модификацией жадной эвристики.

Шаг 4'. Повторение шага 4 – для подзадачи T_{II} вместо T_{II} .

Шаг 5. Переход на шаг 1. □

В заключение раздела отметим, что здесь мы – из-за ограничений на объем статьи – не имеем возможности подробно описать *дополнительные* эвристики, добавляемые к приведенному общему описанию алгоритма метода ветвей и границ. Поэтому перечислим их очень кратко – подробности см., например, в [3, 4, 7, 14–17].

- Предварительная формулировка нескольких вариантов выбора разрешающего элемента²; после этого выбор одного из них – для непосредственного использования в алгоритме МВГ – путем дополнительного применения функций риска, в том числе динамически генерируемых.

- Кластеризация ситуаций (подзадач) – т.е. в некоторых случаях отказ от подробного поиска разделяющего элемента применением жадного алгоритма³ и выбор вместо такого поиска разделяющего элемента, найденного ранее в «похожей» ситуации⁴.

- Предварительная «сортировка» элементов графа⁵.

Рассматривать алгоритмы, связанные с задачами рефлектотрии, мы продолжим в части II настоящей статьи. В основном в ней будет приведен возможный подход к программной реализации описанных в части I алгорит-

¹ Здесь мы применяем общую стандартную терминологию метода ветвей и границ, многократно описанную в наших предыдущих публикациях. Применительно к рассматриваемой нами задаче это означает малое число еще не освещенных вершин. При этом конкретное определение «малого числа» зависит от конкретного варианта реализации алгоритма.

² В нашем случае можно считать, что имеется несколько различных вариантов жадного алгоритма, предназначенного для выбора очередной лампы.

³ Мы во всех задачах дискретной оптимизации полагаем, что такие алгоритмы требуют относительно много времени.

⁴ Ранее мы многократно отмечали, что «ухудшить» выполнение алгоритма подобные действия не могут: мы не теряем возможности применять какие-либо иные разделяющие элементы на других ветвях вычислений. А «улучшить» выполнение алгоритма подобные действия иногда могут. Конечно, *теоретически* здесь – как и в большинстве эвристических алгоритмов – ничего «доказать» невозможно, однако *на практике* временной выигрыш часто заметен.

⁵ Здесь оптимальным вариантом *был бы* вспомогательный алгоритм такого расположения вершин графа (точек), при котором суммарное расстояние между соседними вершинами (плюс расстояние от последней до первой) было бы минимальным. Однако это – в чистом виде задача коммивояжера, она NP-трудная, поэтому в качестве «вспомогательной» ее использовать, конечно, нельзя, и поэтому мы иногда применяем некоторые быстрые эвристические вспомогательные алгоритмы для такого первоначального расположения.

мов, а также результаты вычислительных экспериментов (которые, по-видимому, стоит назвать предварительными).

Список литературы

1. Melnikov B. Multiheuristic approach to discrete optimization problems // *Cybernetics and Systems Analysis*. 2006. Vol. 42, № 3. P. 335–341.
2. Мельников Б. Ф., Сайфуллина Е. Ф. Применение мультиэвристического подхода для случайной генерации графа с заданным вектором степеней // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. 2013. № 3. С. 70–83.
3. Мельников Б. Ф., Мельникова Е. А., Пивнева С. В., Давыдова Е. В. Кластеризация ситуаций в алгоритмах решения задачи коммивояжера и ее применение в некоторых прикладных задачах. Ч. I. Общее описание задач и алгоритмов // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. 2018. № 3. С. 36–51.
4. Мельников Б. Ф., Тренина М. А. Применение метода ветвей и границ в задаче восстановления матрицы расстояний между цепочками ДНК // *International Journal of Open Information Technologies*. 2018. Vol. 6, № 8. P. 1–13.
5. Мельников Б. Ф., Сайфуллина Е. Ф., Терентьева Ю. Ю., Чурикова Н. П. Применение алгоритмов генерации случайных графов для исследования надежности сетей связи // *Информатизация и связь*. 2018. № 1. С. 71–80.
6. Hromkovič J. *Algorithmics for Hard Problems: Introduction to Combinatorial Optimization, Randomization, Approximation, and Heuristics*. Berlin : Springer, 2004. 547 p.
7. Булынин А. Г., Мельников Б. Ф., Мещанин В. Ю., Терентьева Ю. Ю. Оптимизационные задачи, возникающие при проектировании сетей связи высокой размерности, и некоторые эвристические методы их решения // *Информатизация и связь*. 2020. № 1. С. 34–40.
8. Melnikov B. F., Terentyeva Y. Y. Building communication networks: on the application of the Kruskal's algorithm in the problems of large dimensions // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. Krasnoyarsk, Russian Federation, 2021. P. 12089.
9. Мельников Б. Ф., Терентьева Ю. Ю. Построение оптимального остоного дерева как инструмент для обеспечения устойчивости сети связи // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Технические науки*. 2021. № 1. С. 36–45.
10. Мельников Б. Ф., Терентьева Ю. Ю. Разработка больших сетей связи: оптимизационные проблемы и эвристики // *Современные информационные технологии и ИТ-образование*. 2021. Т. 17, № 1. С. 69–79.
11. Мельников Б. Ф., Стариков П. П., Терентьева Ю. Ю. Об одной задаче анализа топологии коммуникационных сетей // *International Journal of Open Information Technologies*. 2022. Vol. 10, № 6. P. 1–8.
12. Харари Ф. *Теория графов*. М. : Мир, 1973. 301 с.
13. Дистель Р. *Теория графов*. Новосибирск : Изд-во Института математики, 2002. 336 с.
14. Мельников Б., Радионов А. О выборе стратегии в недетерминированных антагонистических играх // *Программирование*. 1998. № 5. С. 55–67.
15. Мельников Б., Романов Н. Еще раз об эвристиках для задачи коммивояжера // *Теоретические проблемы информатики и ее приложений*. 2001. № 8. С. 81–94.
16. Мельников Б. Ф., Мельникова Е. А. Кластеризация ситуаций в алгоритмах реального времени для задач дискретной оптимизации // *Системы управления и информационные технологии*. 2007. № 2 (28). С. 16–20.
17. Мельников Б. Ф., Пивнева С. В. Принятие решений в прикладных задачах с применением динамически подобранных функций риска // *Вестник транспорта Поволжья*. 2010. № 3 (23). С. 28а–33.

References

1. Melnikov B. Multiheuristic approach to discrete optimization problems. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2006;42(3):335–341.
2. Mel'nikov B.F., Sayfullina E.F. Application of a multiheuristic approach for random generation of a graph with a given degree vector. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2013;(3):70–83. (In Russ.)
3. Mel'nikov B.F., Mel'nikova E.A., Pivneva S.V., Davydova E.V. Clustering situations in algorithms for solving the traveling salesman problem and its application in some applied problems. Part 1. General description of problems and algorithms. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2018;(3):36–51. (In Russ.)
4. Mel'nikov B.F., Trenina M.A. Application of the branch and bound method in the problem of restoring the matrix of distances between DNA strands. *International Journal of Open Information Technologies*. 2018;6(8):1–13. (In Russ.)
5. Mel'nikov B.F., Sayfullina E.F., Terent'eva Yu.Yu., Churikova N.P. Application of algorithms for generating random graphs to study the reliability of communication networks. *Informatizatsiya i svyaz' = Informatization and communication*. 2018;(1):71–80. (In Russ.)
6. Hromkovič J. *Algorithmics for Hard Problems: Introduction to Combinatorial Optimization, Randomization, Approximation, and Heuristics*. Berlin: Springer, 2004:547.
7. Bulynin A.G., Mel'nikov B.F., Meshchanin V.Yu., Terent'eva Yu.Yu. Optimization problems arising in the design of high-dimensional communication networks and some heuristic methods for their solution. *Informatizatsiya i svyaz' = Informaion and communication*. 2020;(1):34–40. (In Russ.)
8. Melnikov B.F., Terentyeva Y.Y. Building communication networks: on the application of the Kruskal's algorithm in the problems of large dimensions. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. Krasnoyarsk, Russian Federation, 2021:12089.
9. Mel'nikov B.F., Terent'eva Yu.Yu. Building an optimal spanning tree as a tool for ensuring communication network stability. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Tekhnicheskije nauki = University proceedings. Volga region. Engineering sciences*. 2021;(1):36–45. (In Russ.)
10. Mel'nikov B.F., Terent'eva Yu.Yu. Designing large communication networks: optimization problems and heuristics. *Sovremennye informatsionnye tekhnologii i IT-obrazovanie = Modern information technologies and IT-education*. 2021;17(1):69–79. (In Russ.)
11. Mel'nikov B.F., Starikov P.P., Terent'eva Yu.Yu. On one problem of analysis of the topology of communication networks. *International Journal of Open Information Technologies*. 2022;10(6):1–8. (In Russ.)
12. Kharari F. *Teoriya grafov = Graph theory*. Moscow: Mir, 1973:301. (In Russ.)
13. Distel' R. *Teoriya grafov = Graph theory*. Novosibirsk: Izd-vo Instituta matematiki, 2002:336. (In Russ.)
14. Mel'nikov B., Radionov A. On the choice of strategy in non-deterministic antagonistic games. *Programirovanie = Programming*. 1998;(5):55–67. (In Russ.)
15. Mel'nikov B., Romanov N. Once again on the heuristics for the traveling salesman problem. *Teoreticheskie problemy informatiki i ee prilozheniy = Theoretical issues of informatics and its applications*. 2001;(8):81–94. (In Russ.)
16. Mel'nikov B.F., Mel'nikova E.A. Situation clustering in real-time algorithms for discrete optimization problems. *Sistemy upravleniya i informatsionnye tekhnologii = Control systems and information technologies*. 2007;(2):16–20. (In Russ.)
17. Mel'nikov B.F., Pivneva S.V. Decision making in applied problems using dynamically selected risk functions. *Vestnik transporta Povolzh'ya = Bulletin of Volga region transport*. 2010;(3):28a–33. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Борис Феликсович Мельников

доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник,
Центр информационных технологий
и систем органов исполнительной
власти (Россия, Москва, ул. Пресненский
Вал, 19, стр. 1)

E-mail: bormel@mail.ru

Boris F. Mel'nikov

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, principal researcher,
Centre of Information Technologies
and Systems for Executive Authorities
(building 1, 19 Presnenskiy
Val street, Moscow, Russia)

Юлия Юрьевна Терентьева

кандидат технических наук, начальник
управления анализа и методологии
совершенствования информационных
телекоммуникационных систем,
Центр информационных технологий
и систем органов исполнительной
власти (Россия, Москва, ул. Пресненский
Вал, 19, стр. 1)

E-mail: terjul@mail.ru

Yuliya Yu. Terent'eva

Candidate of engineering sciences,
head of the department of analysis
and methodology for improving information
telecommunication systems, Centre
of Information Technologies and Systems
for Executive Authorities (building 1,
19 Presnenskiy Val street, Moscow, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 07.06.2022

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 21.06.2022

Принята к публикации / Accepted 07.07.2022

УДК 546.722+546.271
doi:10.21685/2072-3040-2022-2-4

**Subwavelength optical microscopy of nanostructured objects
on the surface of an optical metamaterial with a zero refractive index**

**O.N. Gadomsky¹, N.M. Ushakov², V.E. Katnov³,
D.O. Musich⁴, M.M. Gebeydullov⁵, A.H. Adam⁶**

^{1,4,5,6}Ulyanovsk State University, Ulyanovsk, Russia

²Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics
of the Russian Academy of Sciences, Saratov Branch, Saratov, Russia

³Kazan Federal University, Kazan, Russia

¹gadomsky@mail.ru, ²nmu@bk.ru, ³vkatnov@yandex.ru, ⁴zokeraf@mail.ru,
⁵marat735654@gmail.com, ⁶adamali43434@gmail.com

Abstract. It has been proven theoretically that light reflected from the surface of an optical metamaterial with a zero refractive index is focused in the area of a focal spot with a radius of $\lambda / 16$, where λ is the wavelength of light. It is shown that at a zero refractive index, the laws of refraction and reflection of light are violated, the angles of refraction and reflection become random quantities. The reflectivity of the surface in the region of the focal spot is calculated in the presence of a diatomic nanostructured object on the surface. It is shown that the size of the focal spot increases with the distance from the center of the focal spot from the surface. In this case, an image of a nanostructured object can be obtained.

Keywords: nanostructures, optical metamaterial, zero refractive index, focal spot

For citation: Gadomsky O.N., Ushakov N.M., Katnov V.E., Musich D.O., Gebeydullov M.M., Adam A.H. Subwavelength optical microscopy of nanostructured objects on the surface of an optical metamaterial with a zero refractive index. *Izvestiya vysshih uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2022;(2):40–53. (In Russ.). doi:10.21685/2072-3040-2022-2-4

**Субволновая оптическая микроскопия
наноструктурированных объектов на поверхности
оптического метаматериала с нулевым показателем преломления**

**О. Н. Гадо́мский¹, Н. М. Уша́ков², В. Е. Катнов³,
Д. О. Мусич⁴, М. М. Губейдулло́в⁵, А. Х. Адам⁶**

^{1,4,5,6}Ульяновский государственный университет, Ульяновск, Россия

²Институт радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН,
Саратовский филиал, Саратов, Россия

³Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

¹gadomsky@mail.ru, ²nmu@bk.ru, ³vkatnov@yandex.ru, ⁴zokeraf@mail.ru,
⁵marat735654@gmail.com, ⁶adamali43434@gmail.com

© Gadomsky O.N., Ushakov N.M., Katnov V.E., Musich D.O., Gebeydullov M.M., Adam A.H., 2022. Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 License / This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 License.

Аннотация. Теоретически доказано, что свет, отраженный от поверхности оптического метаматериала с нулевым показателем преломления, фокусируется в области фокального пятна с радиусом $\lambda/16$, где λ – длина волны света. Показано, что при нулевом показателе преломления законы преломления и отражения света нарушаются, углы преломления и отражения становятся случайными величинами. Рассчитана отражательная способность поверхности в области фокального пятна при наличии на поверхности двухатомного наноструктурированного объекта. Показано, что размер фокального пятна увеличивается по мере удаления от центра фокального пятна от поверхности. В этом случае можно получить изображение наноструктурированного объекта.

Ключевые слова: наноструктуры, оптический метаматериал, равный нулю показатель преломления, фокальное пятно

Для цитирования: Gadomsky O.N., Ushakov N.M., Katnov V.E., Musich D.O., Gebeydullov M.M., Adam A.H. Subwavelength optical microscopy of nanostructured objects on the surface of an optical metamaterial with a zero refractive index // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2022. № 2. С. 40–53. doi:10.21685/2072-3040-2022-2-4

1. Introduction

A large number of studies have been devoted to various methods of designing an optical superlens, and among them, several methods that have already been implemented experimentally can be distinguished.

Silver is used in many optical devices, including devices in which subwavelength focusing of light is achieved [1–4], for example, an optical resolution of 170 nm is achieved with a one-dimensional grating with a period of 500 nm on the silver surface. In our paper [5], it is shown that a record size of the focal spot can be achieved using a one-dimensional grating on the silver surface, which is determined only by the grating period.

The review [6] presents some examples of the implementation of subwavelength light focusing based on thin silver layers. Thus, in [7], using a 35 nm thick silver film with a periodic structure of slits, light was focused in the focusing region, the linear dimensions of which are 270 nm. Approximately the same result was achieved in works [8–11].

In [12–14], more complex silver-based lens designs are used for subwavelength focusing of light.

In [15], experimental results of subwavelength focusing of light using a thin chromium Fresnel plate are presented. In this work, focusing of laser radiation with a wavelength of $\lambda = 532$ nm into an elliptical spot with dimensions of 0.64λ and 0.42λ is achieved.

Review [16] presents examples of experimental implementation of superlens based on metasurfaces with nanoatoms of various shapes and gold films with nanoparticles. Thus, using V-shaped nanoparticles at a wavelength of 676 nm, focusing of radiation into a focal spot 630 nm in diameter with an efficiency of 10% was achieved.

Several problems can be identified in the implementation of subwavelength focusing of light. One of them is to achieve the smallest possible focusing area of light. The second key problem is to achieve focusing of light away from the superlens in the wave zone. The third key problem is to achieve subwavelength focusing of light regardless of the wavelength of external radiation. This article will investigate the possibility of subwavelength focusing of light reflected from the surface of

an optical metamaterial with a zero refractive index and the possibility of designing a subwavelength optical microscope based on this effect.

In works [17–20] it is shown that when in “fishnet” structures and in structures from a set of layers, the real part of the permittivity and permeability can be close to zero in a narrow wavelength range.

Our research group has developed a technology for the synthesis of a metamaterial (PMMA + Ag) with silver nanoparticles (see references to our patents in [21, 22]) and, on the basis of experimental reflection and transmission spectra of layers of this metamaterial, it has been established that the metamaterial we synthesize has a random close to zero refractive index. Unique optical phenomena have been discovered in this metamaterial. Thus, in [21], experimental data are presented showing a violation of the principle of reversibility of light fluxes in (PMMA + Ag) / glass samples on a glass substrate in a wide wavelength range from 450 to 1200 nm. In [22], a significant decrease in the shadow of a highly reflective sphere covered with a layer of metamaterial (PMMA + Ag) was found experimentally, which indicates the possibility of masking bodies using layers of different thicknesses from this metamaterial.

In [23], the effect of photon localization in the (PMMA + Ag) layer was experimentally discovered. We hypothesize that the use of this metamaterial could play an important role in solving key problems and in the development of a superlens. In this theoretical article, the boundary problem of reflection and refraction of light with different wavelengths in the range from 450 to 1200 nm from the surface of a semi-infinite medium with a zero refractive index is solved. It is shown that the surface of an optical metamaterial with a zero refractive index can be the basis for the implementation of subwavelength optical microscopy of nanostructured objects located on the surface of this metamaterial.

2. Generalized laws of refraction and reflection of light

We write the generalized law of refraction in the following form:

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2, \quad (1)$$

Where n_1 is the refractive index of the input medium 1, θ_1 is the angle of incidence of light, n_2 is the refractive index of a semi-infinite medium 2, equal to zero, θ_2 is the angle of refraction in medium 2. Since $n_2 = 0$, then the angle of refraction θ_2 is indeterminate, that is, it is random. We will assume that the random angle θ_2 distributed with equal probability in the range of values $[-\pi/2, \pi/2]$. Then, at normal incidence of light on the surface of medium 2, we have $\theta_1 = 0$ and the possible directions of refraction are shown in fig. 1a.

We represent the generalized law of reflection as

$$\theta_R = \pi - \theta_2, \quad (2)$$

where θ_R is the random angle of reflection (Fig. 1b). Possible angles of reflection are related to possible angles of refraction in accordance with the law of conservation of momentum of photons at the interface 1-2 of two media. In this case, the zero-vector k_2 determines the direction of refraction and reflection of light.

The angles of refraction can be both complex and real. For complex angles of refraction, we have the following relations:

$$\theta_2 = \theta_2' - i\theta_2'', \quad \cos \theta_2 = ish\theta_2'' = i\sqrt{x_2^2 - 1}, \quad x_2 = ch\theta_2'', \quad \sin \theta_2 = x_2, \quad \theta_2' = \pi/2. \quad (3)$$

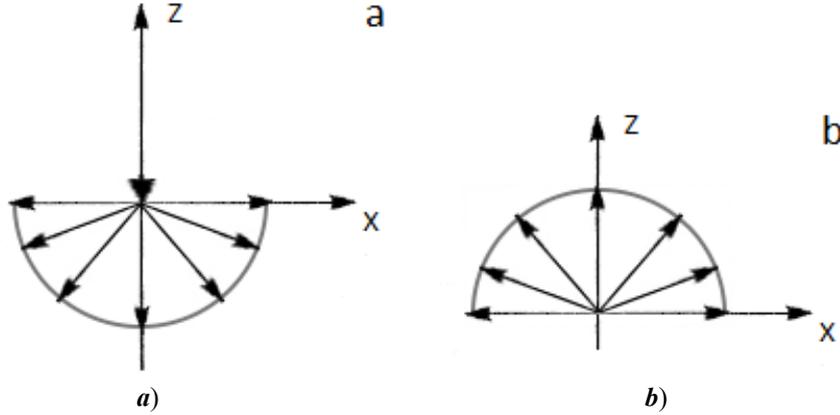


Fig. 1. Possible directions of refraction (a) and reflection (b) of light on the surface of an optical metamaterial with a zero refractive index

In this case, the angle θ_2'' determines the direction of wave attenuation, and the angle θ_2' – the direction of wave propagation. For real angles of refraction, we have the following relations:

$$\sin \theta_2 = y_2, \quad \cos \theta_2 = \sqrt{1 - y_2^2}. \quad (4)$$

3. Refraction of light at the boundary of a vacuum-semi-infinite medium with zero refractive index

The amplitude of the refracted wave T_0 is determined using the extinction theorem [24, 25], which takes into account the extinction of the external wave at the boundary and instead of it, a wave with a zero wave vector propagates in the medium. Calculating the surface integral in the extinction theorem under the condition

$$k_0 r \gg 1, \quad (5)$$

where $k_0 = 2\pi/\lambda$, λ is the light wavelength, r is the depth of the observation point inside the environment, we obtain the following equality:

$$\mathbf{A}_0^{(i)} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\sin(\varphi_2 + \theta_2)}{\cos \varphi_2 \sin \theta_2} \cdot [\mathbf{s}(\mathbf{s} \cdot \mathbf{T}_0) - \mathbf{T}_0] e^{-i\Delta}. \quad (6)$$

Here $\mathbf{A}_0^{(i)}$ is the amplitude of the external plane wave, the angle φ_2 is defined as $\sin \varphi_2 = n_2 \sin \theta_2$ and the unit vector \mathbf{s} has the following components:

$$s_x = -\sin \varphi_2, \quad s_y = 0, \quad s_z = -\cos \varphi_2. \quad (7)$$

Since $n_2 = 0$, then the angle $\varphi_2 = 0$, therefore, formula (6) is greatly simplified. The phase Δ in equality (6) has the form:

$$\Delta = -k_0(\mathbf{r}\mathbf{s}_1) + k_0(\mathbf{r}\mathbf{s}), \quad (8)$$

where \mathbf{s}_1 is the unit vector along the direction of propagation of the external wave,

$$s_{1x} = -\sin\theta_1, \quad s_{1y} = 0, \quad s_{1z} = -\cos\theta_1. \quad (9)$$

In the generalized law of refraction (1), the angle $\theta_1 = 0$, therefore the phase $\Delta = 0$.

As a result, for s-polarized waves with amplitudes A_\perp and T_\perp we obtain from (6) the following formula:

$$T_\perp = 2A_\perp. \quad (10)$$

For p-polarized waves with amplitudes A_\parallel and T_\parallel we obtain that

$$T_\parallel = \frac{2}{\cos\theta_2} A_\parallel. \quad (11)$$

4. Focusing the reflected light

Let us now consider the observation points over the surface of the medium with a zero refractive index, taking into account the generalized law of reflection (2). The calculations in this case are similar, only now in the corresponding formulas the coordinates inside the medium $z' = -r$ should be replaced by $z' = r$. The electric field strength of the reflected wave takes the following form:

$$\mathbf{E}_R = \frac{1}{2} \cdot \frac{\sin(\varphi_2 - \theta_2)}{\cos\varphi_2 \sin\theta_2} \cdot [\mathbf{s}_R(\mathbf{s}_R \cdot \mathbf{T}_0) - \mathbf{T}_0] e^{-ik_0(\mathbf{r}\mathbf{s}_R)}, \quad (12)$$

where the random unit vector \mathbf{s}_R along the direction of propagation of the reflected wave has the following components

$$s_{xR} = -\sin\theta_R, \quad s_{yR} = 0, \quad s_{zR} = -\cos\theta_R. \quad (13)$$

Denoting by R_\perp and R_\parallel the corresponding projections of \mathbf{E}_R in directions perpendicular and parallel to the plane of incidence, we obtain

$$R_\perp = A_\perp \exp[ik_0(\mathbf{r}\mathbf{s}_R)], \quad (14)$$

$$R_\parallel = A_\parallel \exp[ik_0(\mathbf{r}\mathbf{s}_R)]. \quad (15)$$

Transform the random phase in these formulas using the polar angle φ for the vector \mathbf{r} . Then we get that

$$(\mathbf{r}\mathbf{s}_R) = r \cos\theta, \quad (16)$$

where the angle varies within $0 \leq \theta \leq \pi$.

Let's average the values R_{\perp} and R_{\parallel} over the random angles of refraction θ_2 . Squaring the resulting expression in absolute value, we get the following function:

$$|F(x, z)|^2 = \frac{1 - \cos(2k_0 r)}{2(k_0 r)^2}, \quad (17)$$

where we represent the variable r as $r = \sqrt{x^2 + (R_0 + z)^2}$ taking into account the condition $k_0 R_0 \gg 1$. For $k_0 r = 0$ and $R_0 = 0$ function (17) is equal to $|F(x, z)|^2 = 1$, for $2k_0 r = \pi/4$ the function is $|F|^2 = 0.95$, that is, this function is slowly decreasing with increasing argument ($2k_0 r$) near the maximum of this function. This makes it possible to estimate the radius of the brightest part of the focal spot Δr using the following equality

$$\Delta r = (\lambda / 16). \quad (18)$$

Function (17) vanishes at $2k_0 r = \pm 2\pi, \pm 4\pi$ etc. (fig. 2). Function (17) determines the brightness of the focal spot and is characterized by a Strehl number close to unity, since the side maxima are much less than the main maximum. The brightness of the focal spot area corresponding to the classical diffraction limit is approximately five times less than the brightness of the central area of the focal spot.

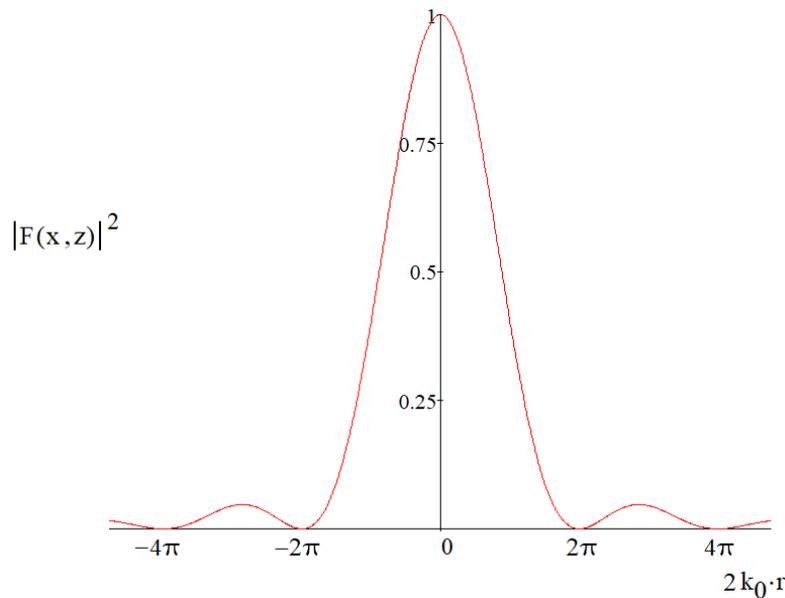


Fig. 2. Function graph $|F(x, z)|^2 = \frac{1 - \cos(2k_0 r)}{2(k_0 r)^2}$

When focusing natural light, the reflectivity of the surface of the medium with a zero refractive index is determined using the equality

$$\frac{R}{A} = |F(x, z)|^2. \tag{19}$$

In fig. 3 shows the structure of the focal spot. At the edge of the focal spot at $2k_0r = \pi/4$ at $R_0 = 0$ we get R/A , equal to 0.95. The integral value of the surface reflectivity over the area of the focal spot is defined as

$$\frac{\bar{R}}{A} = \frac{1}{[\Delta r(0)]^2 k_0^2} \int_0^{\Delta x(0)} \frac{1 - \cos x}{x} dx, \tag{20}$$

where the variable of integration $x = 2k_0r$, $\Delta x(0) = 2k_0\Delta r(0)$, $\Delta r(0)$ – is the radius of the focal spot at $R_0 = 0$. Calculation of this integral gives the value $(\bar{R}/A) = 1$.

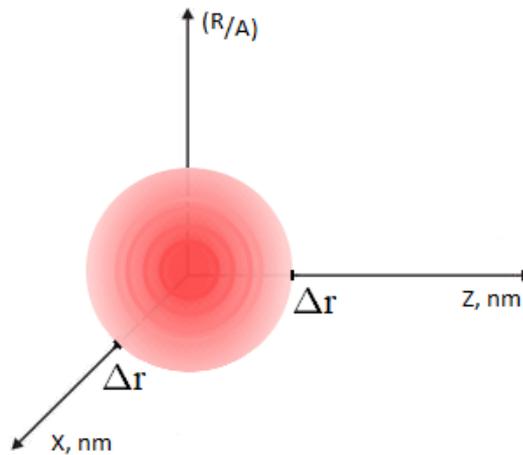


Fig. 3. Reflectivity of the surface of a metamaterial with zero refractive index in the region of the focal spot. The wavelength is $\lambda = 600$ nm, the coordinate of the center of the focal spot is $r(0, 0, \Delta r)$, where $\Delta r = 37.5$ nm. In the center of the focal spot, the reflectivity of the surface of an optical metamaterial with a zero refractive index $R/A = 1$

Let us now consider the properties of reflectivity (\bar{R}/A) when changing the distance R_0 from the center of the focal spot to the surface $z = 0$. Let us determine the radius of the focal spot Δr at an arbitrary distance of the focal center from the surface $z = 0$ as follows:

$$2k_0\Delta r = \frac{\pi}{4} + 2\pi m, \quad m = 0, 1, 2, \dots \tag{21}$$

At $m = 1$ the reflectivity of surface (19) at the edge of the focal spot is 41.3 times less than the corresponding value (\bar{R}/A) at $m = 0$. This means that with increasing distance R_0 the local brightness of the focal spot decreases, however, the area of the focal spot increases. The integral value of the reflectivity of the surface of the medium with a zero refractive index has the form:

$$\frac{\bar{R}}{A} = \frac{1}{p^2} f(p), \quad (22)$$

where $p = 2k_0\Delta r(R_0)\sin\beta$, $\Delta r(R_0)$ is the radius of the focal spot, the center of which is at a distance R_0 from the surface $z=0$, the angle β is defined as $\text{tg}(\beta) = \Delta r / R_0$. The graph of the function $f(p)$ is shown in Fig. 4. As seen from fig. 4, under the condition

$$2k_0\Delta r(R_0)\sin\beta \approx 1 \quad (23)$$

we obtain from (22) the value $(\bar{R} / A) \approx 1$.

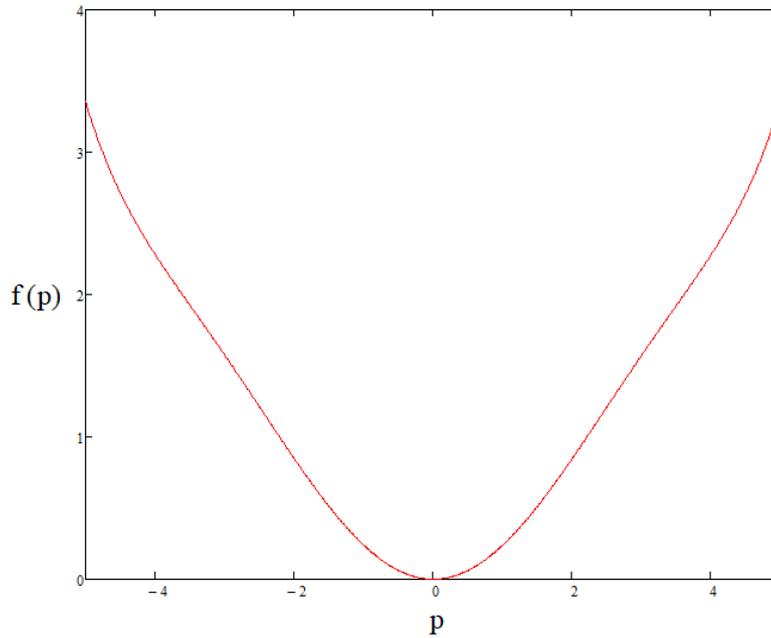


Fig. 4. Function graph $f(p)$

$$f(p) = \frac{p^2}{2 \cdot 2!} - \frac{p^4}{4 \cdot 4!} + \frac{p^6}{6 \cdot 6!} - \dots, \text{ where } p = 2k_0\Delta r(R_0)\sin\beta$$

Let us also determine the relationship between R_0 and the radius of the focal spot $\Delta r(R_0)$, taking into account that

$$\Delta r^2 = x_B^2 + (z_B - R_0)^2, \quad (24)$$

where x_B, z_B are coordinates at the border of the focal spot. We also take into account that $x_B = z_B = \frac{1}{\sqrt{2}}\Delta r$. Then from relation (24) we obtain that

$$R_0 = \Delta r\sqrt{2}. \quad (25)$$

In fig. 5 shows the focal spots at different distances of the centers of the focal spots from the surface of an optical metamaterial with a zero refractive index. It can be seen that the size of the focal spots increases with increasing this distance. The integral value of the reflectivity of the boundary $z = 0$ does not depend on the distance, but in this case the local values of the reflectivity decrease.

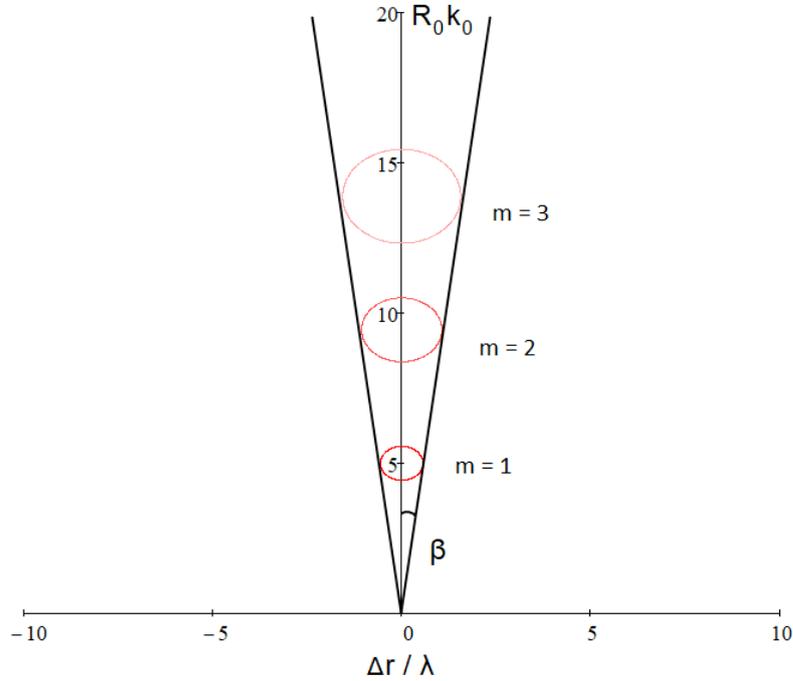


Fig. 5. Dependence of the area of the focal spot on the distance between the center of the focal spot and the surface of an optical metamaterial with a zero refractive index

5. Subwavelength optical microscopy of nanostructured objects

Let us consider the image of a diatomic nanostructured object located on the surface $z = 0$ of the medium, in the region of the focal spot, the center of which is at a distance R_0 from the surface. The reflectivity of the surface, taking into account a diatomic nanostructured object, has the form:

$$\frac{R_M}{A} = \left| 1 + f_1(x, z) e^{-ik_0 x_1} + f_2(x, z) e^{-ik_0 x_1} \right|^2 \times |F(x, z)|^2, \quad (26)$$

where

$$f_1 = -\frac{\omega^2}{c^2} \alpha \left\{ \frac{(eR_1)^2}{R_1^3} - \frac{1}{R_1} \right\}, \quad (27a)$$

$$f_2 = -\frac{\omega^2}{c^2} \alpha \left\{ \frac{(eR_2)^2}{R_2^3} - \frac{1}{R_2} \right\}, \quad (27b)$$

e is the unit vector of polarization of external radiation, $R_1 = |r - r_1|$, $R_2 = |r - r_2|$, r – is the radius vector of the observation point in the focal spot region, $r_1(-x_1, 0, 0)$, $r_2(x_1, 0, 0)$ – are the radius vectors of atoms on the surface of the optical metamaterial, and α is the polarizability of atoms. In expressions (27.a) and (27.b), only the retarded parts of the atomic dipole field are presented, since the observation point is in the wave zone with respect to the surface $z = 0$.

In fig. 6 shows images of atoms of a nanostructured object at the edges of a focal spot, the diameter of which is greater than the wavelength. This means that a nanostructured object can be detected with an optical microscope.

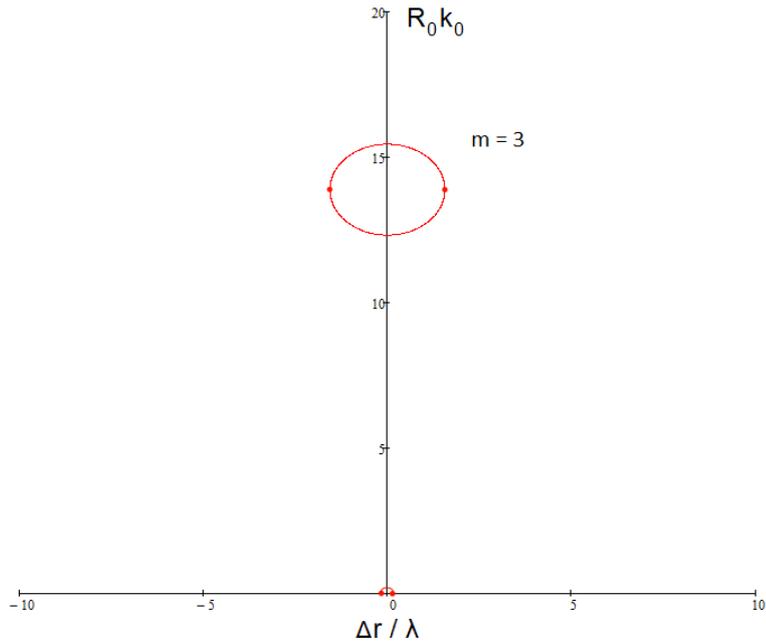


Fig. 6. Image of a diatomic nanostructured object of two Na atoms in the region of the focal spot. $\alpha = (2d_0^2 / \hbar) \frac{1}{\omega_0 - \omega - i / T_2'}$, d_0 – the dipole moment of the 3S-3P

transition of the sodium atom, $1 / T_2'$ – natural resonance width, ω_0 – transition frequency,

$$d_0 = 5.1 \cdot 10^{-18} \text{ un. CGSE}, 1 / T_2' = 10 \text{ MHz}, \omega_0 = 3.197 \cdot 10^{15} \text{ rad/sec}$$

So, this article provides a theoretical justification for the fact that a subwavelength optical microscope can be built on the basis of an optical metamaterial with a zero refractive index to study nanostructured objects on the surface of this metamaterial. We assume that such a subwavelength optical microscope can be implemented on the basis of an optical metamaterial PMMA + Ag with silver nanoparticles synthesized using our nanotechnology in a wide wavelength range from 450 to 1200 nm.

References

1. Jonson P.B., Cristy R.W. Optical constants of noble metals. *Physical Review B* 50. 1972;6(12):4370–4379.

2. Melville D., Blaikie R. Super-resolution imaging through a planar silver layer. *Optics Express*. 2005;13(6):2127–2134.
3. Fu Y., Zhou W. Hybrid Au-Ag subwavelength metallic structures with variant periods for superfocusing. *Journal of Nanophotonics*. 2009;3(1):033504.
4. Fu Y., Mote R.G., Wang Q., Zhou W. Experimental study of plasmonic structures with variant periods for sub-wavelength focusing: analyses of characterization errors. *Journal of Modern Optics*. 2009;56(14):1550–1556.
5. Gadomsky O.N., Musich D.O. *JETP Letters*. 2019;110(2):115–120.
6. Fu Y., Wang J., Zhang D. Plasmonic Lenses. *Physics*. 2012. Available at: <http://dx.doi.org/10.5772/50029>
7. Shi H.F., Wang C.T., Du C.L. Beam manipulating by metallic nano-slits with variant widths. *Optics Express*. 2005;13(18):6815–6820.
8. Fang N., Lee H., Sun C., Zhang X. Sub-Diffraction-Limited Optical Imaging with a Silver Superlens. *Science*. 2005;308(5721):534–537.
9. Song W., Fang Z., Huang S., Lin F., Zhu X. Near-field nanofocusing through a combination of plasmonic Bragg reflector and converging lens. *Optics Express*. 2010;18(14):1472–1467.
10. Melville D.O.S., Blaikie R.J., Wolf C.R. Submicron imaging with a planar silver lens. *Applied Physics Letters*. 2007;84(22):4403–4405.
11. Wang M.H., Sarris C.D., Eleftheriades G.V. Metallic transmission screen for sub-wavelength focusing. *Electronic Letters*. 2007;43(25):1402–1404.
12. Wang H., Deng Y., He J., Gao P., Yao N., Wang C., Luo X. Subwavelength light focusing of plasmonic lens with dielectric filled nanoslits structures. *Journal of Nanophotonics*. 2014;8(1):083079.
13. Wang J., Zhou W., Asundi A.K. Effect of polarization on symmetry of focal spot of a plasmonic lens. *Optics Express*. 2009;17(10):8137–8143.
14. Steele J.M., Lin Z., Wang Y. Resonant and non-resonant generation and focusing of surface plasmons with circular gratings. *Optics Express*. 2006;14(12):5664–5670.
15. Nalimov A.G., Stafeev S.S., Kozlova E.S., Kotlyar V.V., Faolein L., Kotlyar M.V. Subwavelength focusing of laser light using a chromium zone plate. *Computer Optics*. 2017;41(3):356–362.
16. Remnev M.A., Klimov V.V. Metasurfaces: a new look at Maxwell's equations and new methods for controlling light. *Uspekhi fizicheskikh nauk = Advances in the physical sciences*. 2018;188(2):169–180. (In Russ.)
17. Gao J., Sun L., Deng H., Mathai C.J., Gandopadhyay S., Yang X. Experimental realization of epsilon-near-zero metamaterial slabs with metal-dielectric multilayers. *Applied Physics Letters*. 2013;103(5):051111.
18. Yun S., Jiang Z.H., Xu Q., Lin Z., Werner D.H., Mayer T.S. Low-Loss Impedance-Matched Optical Metamaterials with Zero Phase Delay. *ACS Nano*. 2012;6(5):4475–4482.
19. Kwon D.-H., Werner D.H. Low-index metamaterial designs in the visible spectrum. *Optics Express*. 2007;15(15):9267–9272.
20. Vesseur E.J.R., Coenen T., Caglayan H., Engheta N., Polman A. Experimental Verification of Structures for Visible Light. *Physics Review Letter*. 2013;110(1):013902.
21. Gadomskiy O.N., Ushakov N.M. Violation of the principle of reversibility of light fluxes in a medium with a random refractive index close to zero. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki = Journal of experimental and theoretical physics*. 2017;152(4):666–675. (In Russ.)
22. Gadomskiy O.N., Ushakov N.M., Katnov V.E. Masking a highly reflective sphere with a layer with a random refractive index close to zero. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki = Journal of experimental and theoretical physics*. 2018;154(6):1077–1086. (In Russ.)

23. Gadomskiy O.N., Ushakov N.M., Gadomskaya I.V. Localization of photons in an optical metamaterial with a random refractive index close to zero. *Radioelektronika. Nanosistemy. Informatsionnye tekhnologii = Radioelectronics. Nanosystems. Information technology*. 2018;11(2):153–164.
24. Born M., Vol'f E. *Osnovy optiki: per. s angl. = Fundamentals of optics: translated from English*. 2nd ed. Moscow: Nauka, 1973:713. (In Russ.)
25. Gadomskiy O.N., Ushakov N. *Optika sred so sluchaynym blizkim k nulyu pokaza-telem prelomleniya. Fundamental'nye osnovy, nanotekhnologii i primeneniye: monografiya = Optics of media with a random refractive index close to zero. Fundamentals, nanotechnology and applications: monograph*. Saint Petersburg: Lan', 2020:288. (In Russ.)

Список литературы

1. Jonson P. B., Cristy R. W. Optical constants of noble metals // *Physical Review B* 50. 1972. Vol. 6, № 12. P. 4370–4379.
2. Melville D., Blaikie R. Super-resolution imaging through a planar silver layer // *Optics Express*. 2005. Vol. 13, № 6. P. 2127–2134.
3. Fu Y., Zhou W. Hybrid Au-Ag subwavelength metallic structures with variant periods for superfocusing // *Journal of Nanophotonics*. 2009. Vol. 3, № 1. P. 033504.
4. Fu Y., Mote R. G., Wang Q., Zhou W. Experimental study of plasmonic structures with variant periods for sub-wavelength focusing: analyses of characterization errors // *Journal of Modern Optics*. 2009. Vol. 56, № 14. P. 1550–1556.
5. Gadomsky O. N., Musich D. O. *JETP Letters*. 2019. Vol. 110, № 2. P. 115–120.
6. Fu Y., Wang J., Zhang D. Plasmonic Lenses // *Physics*. 2012. URL: <http://dx.doi.org/10.5772/50029>
7. Shi H. F., Wang C. T., Du C. L. Beam manipulating by metallic nano-slits with variant widths // *Optics Express*. 2005. Vol. 13, № 18. P. 6815–6820.
8. Fang N., Lee H., Sun C., Zhang X. Sub-Diffraction-Limited Optical Imaging with a Silver Superlens // *Science*. 2005. Vol. 308, № 5721. P. 534–537.
9. Song W., Fang Z., Huang S., Lin F., Zhu X. Near-field nanofocusing through a combination of plasmonic Bragg reflector and converging lens // *Optics Express*. 2010. Vol. 18, № 14. P. 1472–1467.
10. Melville D. O. S., Blaike R. J., Wolf C. R. Submicron imaging with a planar silver lens // *Applied Physics Letters*. 2007. Vol. 84, № 22. P. 4403–4405.
11. Wang M. H., Sarris C. D., Eleftheriades G. V. Metallic transmission screen for sub-wavelength focusing // *Electronic Letters*. 2007. Vol. 43, № 25. P. 1402–1404.
12. Wang H., Deng Y., He J., Gao P., Yao N., Wang C., Luo X. Subwavelength light focusing of plasmonic lens with dielectric filled nanoslits structures // *Journal of Nanophotonics*. 2014. Vol. 8, № 1. P. 083079.
13. Wang J., Zhou W., Asundi A. K. Effect of polarization on symmetry of focal spot of a plasmonic lens // *Optics Express*. 2009. Vol. 17, № 10. P. 8137–8143.
14. Steele J. M., Lin Z., Wang Y. Resonant and non-resonant generation and focusing of surface plasmons with circular gratings // *Optics Express*. 2006. Vol. 14, № 12. P. 5664–5670.
15. Nalimov A. G., Stafeev S. S., Kozlova E. S., Kotlyar V. V., Faolein L., Kotlyar M. V. Subwavelength focusing of laser light using a chromium zone plate // *Computer Optics*. 2017. Vol. 41, № 3. P. 356–362.
16. Ремнев М. А., Климов В. В. Метаповерхности: Новый взгляд на уравнения Максвелла и новые методы управления светом // *Успехи физических наук*. 2018. Т. 188, № 2. С. 169–180.
17. Gao J., Sun L., Deng H., Mathai C. J., Gandopadhy S., Yang X. Experimental realization of epsilon-near-zero metamaterial slabs with metal-dielectric multilayers // *Applied Physics Letters*. 2013. Vol. 103, № 5. P. 051111.

18. Yun S., Jiang Z. H., Xu Q., Lin Z., Werner D. H., Mayer T.S. Low-Loss Impedance-Matched Optical Metamaterials with Zero Phase Delay // ACS Nano. 2012. Vol. 6, № 5. P. 4475–4482.
19. Kwon D.-H., Werner D. H. Low-index metamaterial designs in the visible spectrum // Optics Express. 2007. Vol. 15, № 15. P. 9267–9272.
20. Vesseur E. J. R., Coenen T., Caglayan H., Engheta N., Polman A. Experimental Verification of Structures for Visible Light // Physics Review Letter. 2013. Vol. 110, № 1. P. 013902.
21. Гадомский О. Н., Ушаков Н. М. Нарушение принципа обратимости световых потоков в среде со случайным близким к нулю показателем преломления // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2017. Т. 152, № 4. С. 666–675.
22. Гадомский О. Н., Ушаков Н. М., Катнов В. Е. Маскировка высокоотражающего шара слоем со случайным близким к нулю показателем преломления // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2018. Т. 154, № 6 (12). С. 1077–1086.
23. Гадомский О. Н., Ушаков Н. М., Гадомская И. В. Локализация фотонов в оптическом метаматериале со случайным близким к нулю показателем преломления // Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии. 2018. Т. 11, № 2. С. 153–164.
24. Борн М., Вольф Э. Основы оптики : пер. с англ. Изд. 2-е. М. : Наука, 1973. 713 с.
25. Гадомский О. Н., Ушаков Н. Оптика сред со случайным близким к нулю показателем преломления. Фундаментальные основы, нанотехнологии и применение : монография. СПб. : Лань, 2020. 288 с.

Информация об авторах / Information about the authors

Олег Николаевич Гадомский

доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры
радиофизики и электроники,
Ульяновский государственный
университет (Россия, г. Ульяновск,
ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: gadomsky@mail.ru

Oleg N. Gadomskiy

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, professor
of the sub-department of radiophysics
and electronics, Ulyanovsk State University
(42 L'va Tolstogo street, Ulyanovsk,
Russia)

Николай Михайлович Ушаков

доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник
лаборатории субмикронной электроники,
Саратовский филиал Института
радиотехники и электроники имени
В. А. Котельникова Российской академии
наук (Россия, г. Саратов, ул. Зеленая, 38)

E-mail: nmu@bk.ru

Nikolay M. Ushakov

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, principal researcher
of the Laboratory of submicron electronics,
Kotel'nikov Institute of Radio Engineering
and Electronics of the Russian Academy
of Sciences, Saratov Branch (38 Zelenaya
street, Saratov, Russia)

Владимир Евгеньевич Катнов

кандидат химических наук, доцент,
старший научный сотрудник, Институт
геологии и нефтегазовых технологий,
Казанский (Приволжский) федеральный
университет (Россия, г. Казань,
ул. Кремлевская, 18)

E-mail: vkatnov@yandex.ru

Vladimir E. Katnov

Candidate of chemical sciences, associate
professor, principal researcher, Institute
of Geology and Petroleum Technologies,
Kazan Federal University (18 Kremlevskaya
street, Kazan, Russia)

Дмитрий Олегович Мусич

программист службы протектората по научной работе, Научно-исследовательский технологичный институт имени С. П. Капицы, Ульяновский государственный университет (Россия, г. Ульяновск, ул. Л. Толстого, 42)

E-mail: zokeraf@mail.ru

Dmitriy O. Musich

Protectorate service programmer for scientific work, Research Institute of Technology named after S.P. Kapitsa, Ulyanovsk State University (42 L'va Tolstogo street, Ulyanovsk, Russia)

Марат Маратович Губейдуллов

аспирант, Ульяновский государственный университет (Россия, г. Ульяновск, ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: marat735654@gmail.com

Marat M. Gebeydullo

Postgraduate student, Ulyanovsk State University (42 L'va Tolstogo street, Ulyanovsk, Russia)

Али Хусейн Адам

аспирант, Ульяновский государственный университет (Россия, г. Ульяновск, ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: adamali43434@gmail.com

Ali Hussein Adam

Postgraduate student, Ulyanovsk State University (42 L'va Tolstogo street, Ulyanovsk, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 23.03.2022

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 19.05.2022

Принята к публикации / Accepted 22.06.2022

Трилемма магнитной гипертермии «поле – частота – размер» на примере наночастиц ZnMn феррита

Н. Н. Лю¹, А. П. Пятаков², Н. А. Пятаев³, Г. Б. Сухоруков⁴, А. М. Тишин⁵

^{1,2,5}Московский государственный университет
имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия

³Национальный исследовательский Мордовский
государственный университет имени Н. П. Огарева, Саранск, Россия

⁴Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

⁴Лондонский университет королевы Марии, Лондон, Великобритания

¹nannan.liu@irlc.msu.ru, ²pyatakov@physics.msu.ru, ³pyataevna@mail.ru,

⁴g.sukhorukov@qmul.ac.uk, ⁵tishin@amtc.org

Аннотация. Эффективность преобразования электромагнитной (ЭМ) энергии в тепловую является ключевым фактором использования магнитных наночастиц (МНЧ) в магнитной гипертермии и ряде других новейших медицинских технологиях, таких как лечение болезни Паркинсона и нейроинтерфейсы на основе МНЧ. В настоящее время для увеличения тепловыделения увеличивают концентрацию МНЧ в опухоли и/или амплитуду и частоту ЭМ-поля, что приводит к увеличению веса, размера и потребляемой мощности источников поля, а также к усилению неблагоприятного воздействия на здоровые ткани. В данном обзоре впервые формулируется трилемма магнитной гипертермии и определяются пути нахождения оптимального баланса между частотой, амплитудой ЭМ-поля и размером МНЧ. Целью работы является попытка решения этой трилеммы на примере МНЧ-ферритов MnZn. А именно нахождение оптимального сочетания свойств МНЧ и параметров внешнего поля и разработка новой стратегии повышения эффективности тепловыделения на относительно низких частотах с использованием МНЧ на основе феррита MnZn, которая позволит сфокусировать исследование в области магнитной гипертермии на новой области магнитных полей и размеров МНЧ. В работе продемонстрирована нетривиальная зависимость (ближе к пятой степени, а не к хорошо известной квадратичной) теплового выделения от величины ЭМ-поля в МНЧ $Zn_{0,2}Mn_{0,8}Fe_2O_4$. Наше исследование ставит под вопрос традиционный подход, основанный на минимизации величины магнитного поля и увеличении частоты (в отдельных случаях до 300–500 кГц или даже выше) и предлагает улучшенную стратегию: увеличение амплитуды при максимальном уменьшении частоты. Это позволит более эффективно использовать наличие у МНЧ сверхквадратичной зависимости величины удельного поглощения ЭМ-энергии от амплитуды поля. Результаты исследований могут оказать серьезное влияние на стратегии разработок других передовых биомедицинских технологий с использованием МНЧ.

Ключевые слова: магнитная гипертермия, удельная скорость поглощения, магнитные наночастицы, мощность внутренних потерь, гистерезисный механизм

Благодарности: авторы выражают благодарность профессору Ю. К. Гунько, Н. С. Перову за полезные обсуждения материалов работы.

Финансирование: работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований (грант № 19-29-10013). Лю Н. Н. признательна Китайскому стипендиальному совету за поддержку учебы.

Для цитирования: Лю Н. Н., Пятаков А. П., Пятаев Н. А., Сухоруков Г. Б., Тишин А. М. Трилемма магнитной гипертермии «поле – частота – размер» на примере наночастиц

Trilemma of magnetic hyperthermia “field – frequency – size” by the example of ZnMn ferrite nanoparticles

N.N. Liu¹, A.P. Pyatakov², N.A. Pyataev³, G.B. Sukhorukov⁴, A.M. Tishin⁵

^{1,2,5}Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

³Ogarev Mordovia State University, Saransk, Russia

⁴Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia

⁴Queen Mary University of London, London, United Kingdom

¹nannan.liu@irlc.msu.ru, ²pyatakov@physics.msu.ru, ³pyataevna@mail.ru,

⁴g.sukhorukov@qmul.ac.uk, ⁵tishin@amtc.org

Abstract. The efficiency of conversion of electromagnetic energy into heat is a key factor for magnetic nanoparticles (MNPs) utilization in magnetic hyperthermia and many other emerging medical technologies, such as treating Parkinson’s disease and MNP-based nerve interface. At present, in order to increase the release of heat, the concentration and/or EM field of the MNPs in tumors increased, which increases the weight, size and power consumption of the field source, and the increase in the adverse effects of the health organization. In this review, we first proposed the dilemma of magnetic hyperthermia for the first time. The best balance between the frequency, amplitude and MNP size of the electromagnetic field is determined. The purpose of the work is to try to use MnZn iron oxygen MNP as an example to solve this dilemma. That is to find the best combination of MNP features and external parameters, and develop a new strategy that uses MnZn iron oxygen -based MNP to improve heat dissipation efficiency at a lower frequency. Research in the field of magnetic hyperthermia will be focused on the new range of magnetic field amplitude and MNP sizes. The paper shows the extraordinary dependence of EM field in $Zn_{0.2}Mn_{0.8}Fe_2O_4$ MNP (nearly five, not well-known the second-power one). Our study challenges the traditional approach based on minimizing the magnetic field and increasing the frequency (in some cases up to 300–500 kHz or even higher) and suggests an improved strategy: increasing the amplitude while decreasing the frequency as much as possible. This will make it possible to effectively use the presence of a superquadratic dependence of the specific absorption of EM energy on the field amplitude in MNPs. The results of the study may have a significant impact on the development strategy of other advanced biomedical technology using MNPs.

Keywords: magnetic hyperthermia, specific absorption rate, magnetic nanoparticles, internal loss power, hysteresis mechanism

Acknowledgments: The author extends gratitude to Yu. K. Gun’ko, N. S. Perov for helpful discussions of the work. The research was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant No.19-29-10013). Liu N. N. is grateful to the China Scholarship Council for supporting studies.

For citation: Liu N.N., Pyatakov A.P., Pyataev N.A., Sukhorukov G.B., Tishin A.M. Trilemma of magnetic hyperthermia “field – frequency – size” by the example of ZnMn ferrite nanoparticles. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* = *University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2022;(2):54–80. (In Russ.). doi:10.21685/2072-3040-2022-2-5

Введение

Магнитные наночастицы (МНЧ) нашли широкое применение в клинической практике и уже сейчас активно используются не только как контраст-

ный агент для хорошо известной процедуры магнитной томографии, но и для магнитной гипертермии, разделения клеток и др. [1]. Метод магнитной гипертермии имеет серьезные преимущества при лечении рака, поскольку воздействие тепла, выделяемого МНЧ, в идеале способно приводить к избирательной гибели раковых клеток, сводя к минимуму повреждение окружающих тканей и не вызывая побочных эффектов от традиционной химиотерапии [2–3]. Суть магнитной гипертермии заключается в доставке в опухоль МНЧ с последующим воздействием внешнего электромагнитного (ЭМ) поля для выработки тепла. Тепловыделение происходит за счет вызванного внешним полем разворота направления магнитного момента суперпарамагнитных МНЧ с его последующей релаксацией или перемагничивания по частной петле гистерезиса ферро- или ферромагнитных, а также других механизмов преобразования энергии ЭМ-поля в тепло. Эти воздействия вызывают локальный нагрев прилегающих тканей до 42–45 °С, что приводит к гибели опухолевых клеток [4]. Локальный нагрев опухоли продемонстрировал положительные клинические результаты, также он гораздо лучше переносится пациентами, чем общая гипертермия, что, несмотря на большие массо-габаритные параметры источников поля и низкую эффективность тепловыделения в МНЧ магнетита Fe_3O_4 , привело к внедрению данной технологии в клиническую практику. Компания MagForce AG уже внедрила магнитную гипертермию в клиническую практику [5] для лечения пролиферативных опухолей с низкой внутренней васкуляризацией, таких как опухоли поджелудочной железы [1]. Однако тепловыделения используемых в настоящее время МНЧ магнетита не всегда достаточно, что приводит к необходимости введения в опухоль больших концентраций МНЧ.

Ключевым физическим параметром МНЧ, который может быть использован для сравнения эффективности тепловыделения в магнитной гипертермии, является удельная скорость поглощения ЭМ-энергии (SAR), которая показывает, насколько эффективно МНЧ преобразуют электромагнитную энергию в тепловую. SAR сильно зависит от различных параметров МНЧ, таких как размер, распределение по размерам, форма, структура, химический состав и форма поверхности, намагниченность насыщения частиц, коэрцитивная сила, характер взаимодействия между частицами, частота и амплитуда приложенного переменного магнитного поля и др. [6, 7]. Зависимость SAR от последних двух свойств может иметь большое значение, поскольку вероятность паразитного нагрева ткани и другие побочные эффекты (например вероятность нейростимуляции) увеличиваются с увеличением частоты и амплитуды. Допустимые величины произведения частоты и амплитуды ограничены физиологическим пределом Брезовича [8], который был выбран из того соображения, что одновременное увеличение частоты и амплитуды ЭМ-поля приводит к нежелательному увеличению вихревых токов и их побочному воздействию на здоровые ткани. ЭМ-поля с частотой выше 0,1 МГц могут значительно повышать порог возбуждения периферических нервов, что также является неблагоприятным физиологическим эффектом [9]. Поэтому принято считать, что произведение амплитуды переменного магнитного поля на частоту не должно превышать значения 10^9 А/(м·с). Таким образом, одной из задач является максимизация теплового отклика МНЧ с минимальными побочными эффектами в данной области параметров ЭМ-поля.

Рисунок 1 дает графическое представление областей магнитного поля, расположенных в и вне предела Брезовича в области максимальных допустимых величин магнитного поля 1000 Э и частоты 1 МГц рассматриваемых учеными (слева), а также область наших исследований (справа).

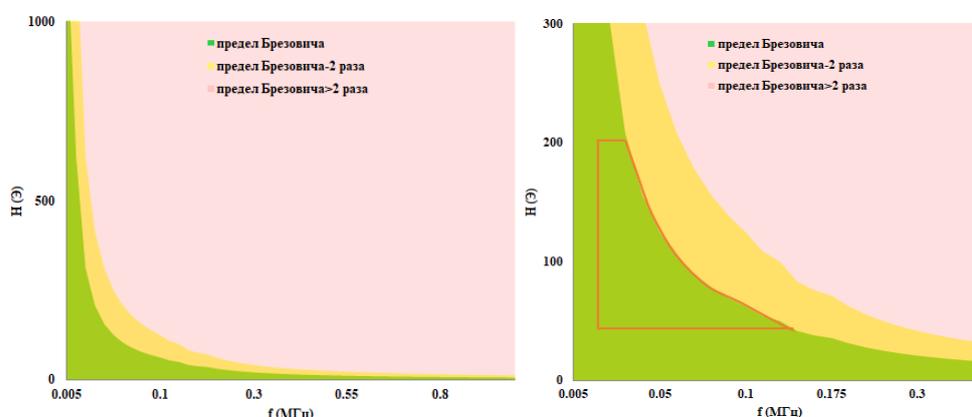


Рис. 1. Области амплитуды магнитного поля и частоты в и вне предела Брезовича в различных масштабах. Зеленый: в рамках предела Брезовича, желтый: предел Брезовича превышен в 2 раза, оранжевый: предел Брезовича превышен более чем в 2 раза (часть, обведенная оранжевым на рисунке справа, – это изучаемый нами диапазон)

Регуляторы (FDA, EMA – европейская медицинская ассоциация – аналог FDA) не рассматривают магнитную гипертермию как универсальный метод. Они оценивают и одобряют конкретные устройства и реализованные именно с их помощью методы лечения. Каждое такое устройство вместе с методом лечения одобряется отдельно. Существуют методические рекомендации по проведению клинических испытаний устройств для гипертермии [10, 11], и в них нет конкретных значений критерия $f \cdot H$. Так как главным повреждающим фактором при магнитной гипертермии является температура, то контроль температуры тканей обязателен и к нему существует очень много требований.

В работе [12] упоминается критерий Брезовича и говорится о том, что при изменении размера катушки и области воздействия этот критерий может быть превышен в 10 раз, что впервые было показано еще в 1984 г. в работе [13] на примере человеческой руки. Существуют устройства, одобренные EMA и FDA, одно из которых – устройство для гипертермии MFH® упоминаемой выше компании MagForce [14]. Оно генерирует поле 2,5–18 kA/m с частотой 100 кГц, т.е. на максимальных значениях критерий Брезовича превышен в 2 раза. Есть много публикаций о клиническом применении MFH@300F MagForce [15, 16]. Наш анализ показывает, что желательной областью является комбинация параметров поля в пределах амплитуды 50–200 Э и частоты 15–150 кГц.

Улучшенная эффективность нагрева также открывает окно для ускоренного рыночного применения новых медицинских технологий с использованием МНЧ таких, например, как доставка лекарств на основе микрокапсул [17], облегчение паркинсоноподобных симптомов [18], запуск высвобожде-

ния гормонов надпочечников посредством активации термочувствительных ионных каналов [19] и многих других.

В настоящее время исследователями рассматривается множество МНЧ, пригодных для магнитной гипертермии, в том числе МНЧ Fe_3O_4 , MnFe_2O_4 , Zn-Mn феррита [20–24], а также кобальтовые ферриты и керамика типа $\text{La}_{0,75}\text{Sr}_{0,25}\text{MnO}_3$ [25, 26]. При этом акцент делается на совершенствовании магнитных характеристик МНЧ (прежде всего увеличении константы анизотропии) за счет совершенствования химсостава, методов синтеза, формы и размеров МНЧ. Однако задача исследователей усложняется целым рядом обстоятельств. Так, например, в отличие от разработки материалов для сред магнитной памяти, где повышение величины константы анизотропии также является одной из трех задач трилеммы магнитной анизотропии, в случае магнитной гипертермии круг допустимых к рассмотрению магнитных материалов существенно ограничен за счет требования биосовместимости и нетоксичности, что, например, исключает из рассмотрения кобальт, который имеет большую величину анизотропии. Другим важным фактором является заметный разброс по размерам МНЧ при использовании методов (прежде всего соосаждения), пригодных для массового синтеза МНЧ, а также синтез стабильных коллоидов, пригодных для реальной клинической практики и сохраняющих свои физико-химические свойства в течение по крайней мере 1 года. Это приводит к тому обстоятельству, что в коллоиде содержатся МНЧ разного размера (как ниже, так и выше 13 нм), имеющие разные механизмы тепловыделения, что делает весьма затруднительным нахождение оптимального распределения по размеру для наиболее эффективного тепловыделения. В процессе реального применения все еще более усложняется за счет изменения времени релаксации как за счет образования белковой короны на поверхности наночастиц и вязкости, так и разогрева наночастиц непосредственно в процессе процедуры магнитной гипертермии.

Мало того, если зависимость величины SAR от частоты внешнего поля является линейной и хорошо изучена, то зависимость от магнитного поля определяется большим количеством факторов и требует дальнейшего исследования. Предыдущие исследования показали, что эффективность преобразования, SAR/H^2 , может увеличиваться или уменьшаться в зависимости от амплитуды магнитного поля H , стремясь к постоянному значению для сравнительно малых магнитных полей.

Так, например, в кобальтсодержащих ферритах с обменной связью значение SAR может достигать высокого показателя 3866 Вт/г, 37,3 кА/м на частоте 500 кГц [27]. Значения SAR 3417 Вт/г при 380 кГц, 33 кА/м при 380 кГц и 282 Вт/г при 3 кА/м были продемонстрированы в работе [4]. Однако их значения SAR достаточно малы (менее 0,05 Вт/г) в области частот и амплитуд поля, находящихся в пределах предела Брезовича (10–20 Э при $f = 500$ кГц) [28]. Даже несмотря на хорошие значения SAR на высоких частотах, исследования *in vivo* и *in vitro* продемонстрировали вредное токсикологическое воздействие МНЧ феррита кобальта на различные органы и системы [29]. Однако, поскольку его токсичность сильно зависит от типа клеток, органа и размера, дозы, поверхностного заряда и времени, обычно делается вывод, что ферритовые МНЧ на основе кобальта требуют детальных исследований их токсичности в будущем [29, 30].

Дальнейшее совершенствование методов синтеза и изучение способов повышения эффективности тепловыделения в нетоксичных и биосовместимых МНЧ в условиях, близких к пределу Брезовича, является важной фундаментальной и практической задачей. В данной обзорной работе мы обобщаем результаты наших исследований нетоксичных и биосовместимых МНЧ феррита MnZn, которые являются перспективным агентом для технологии магнитной гипертермии. МНЧ феррита MnZn не обладают гемолитической активностью, генотоксическим действием и цитотоксичностью [31].

Еще один важный вопрос связан с радиотехническими проблемами. По мере того как разработчики масштабировали источники магнитного поля от лабораторных размеров для исследований в пробирке до пригодных для проведения процедуры магнитной гипертермии на пациентах в клинических условиях, источники становились гораздо более громоздкими и энергоемкими, что заметно сдерживает скорость внедрения данной технологии в медицинскую практику. Кроме того, скин-эффект ограничивает эффективное поперечное сечение провода соленоида, что приводит к увеличению эффективного сопротивления и увеличению потерь мощности, что делает вопрос снижения рабочей частоты ЭМ-поля насущной технической проблемой.

Таким образом, по сути ученым, работающим в данной области, и радиоинженерам приходится решать даже не дилемму, а трилемму магнитной гипертермии (частота-поле-размер), аналогичную, но гораздо более сложную, чем в магнитной записи информации, вследствие вышеупомянутых ограничений на допустимые к применению материалы, а также возможное изменение времен релаксаций МНЧ в человеческом организме в процессе процедуры. То есть необходимо увеличение частоты внешнего поля для увеличения тепловыделения, что ведет к упомянутым выше техническим сложностям и превышению предела Брезовича (выход – минимизировать частоту поля, что тут же приводит линейному уменьшению величины SAR). Уменьшение частоты поля ведет к увеличению оптимальной величины времени релаксации (выполнение условия $2\pi f\tau = 1$) и требует изменения размера, распределения по размеру и констант анизотропии МНЧ (выход – подбор оптимальных магнитных и структурных параметров МНЧ для данной частоты, что тут же приводит к изменению физических механизмов тепловыделения). Уменьшение тепловыделения вследствие понижения частоты и изменения физических механизмов тепловыделения приводит к нежелательному требованию увеличения концентрации МНЧ в опухоли (выход – компенсировать данное уменьшение тепловыделения за счет увеличения амплитуды поля, оставаясь в пределах критерия Брезовича).

Поэтому целями нашей работы являлись: более детальный сравнительный анализ результатов наших более ранних исследований удельного тепловыделения нетоксичных МНЧ MnZn и ферритов на основе Mn при различных амплитудах и частотах ЭМ-поля (до 100 Э и 0,3 МГц) [32–34], выявление роли различных релаксационных процессов и анализ их вклада в удельное тепловыделение МНЧ марганцево-цинкового феррита; разработка новых подходов для увеличения тепловыделения (обнаружение сверхквадратичной зависимости между SAR от амплитуды ЭМ-поля; определение наиболее эффективных составов МНЧ марганцево-цинкового феррита (их химического состава, размера наночастиц и свойств электромагнитного поля для решения вышеуказанных проблем).

Материалы и методы

Синтез

В наших работах [32–34] использовался метод соосаждения [35]. Хотя этот метод имеет недостатки, связанные с широким гранулометрическим составом и образованием крупных коллоидов (агрегатов), с его помощью можно быстро и с разумной себестоимостью получить большое количество материалов, что имеет важное практическое значение.

Частицы феррита получали соосаждением солей Fe^{3+} и Me^{2+} ($\text{Me}^{2+} = \text{Fe}^{2+}$, Mn^{2+} , Zn^{2+} , Mg^{2+}) (в мольном соотношении 2:1 соответственно) в щелочной среде гидроксида натрия [35]. Синтез проводили в инертной атмосфере аргона для предотвращения окисления ионов двухвалентных металлов, особенно Fe^{2+} . Растворяли 16 ммоль FeCl_3 и 8 ммоль MeCl_2 ($\text{Me} = \text{Fe}^{2+}$, Mn^{2+} , Zn^{2+} , Mg^{2+}) в 20 мл деионизированной воды, предварительно нагретой до 90 °С. Затем при интенсивном перемешивании этот раствор медленно по каплям добавляли к 30 мл 1,7 М раствора NaOH . Суспензию частиц перемешивали еще 1 ч при 100 °С. Следующим этапом синтеза является очистка частиц методом магнитной декантации и промывка деионизированной водой до нейтрального рН. После каждой процедуры промывки МНЧ обрабатывались ультразвуком (0,035 МГц, 200 Вт) в течение 10 мин. Полученные гранулы затем сушили в вакуумной печи при 80 °С в течение 24 ч. Были получены порошки ферритов следующих составов: Fe_3O_4 , $\text{Zn}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($x = 0, 0,05, 0,1, 0,15, 0,2, 0,25, 0,3$), $\text{Zn}_{0,25}\text{Fe}_{0,75}\text{Fe}_2\text{O}_4$, $\text{Mg}_{0,25}\text{Fe}_{0,75}\text{Fe}_2\text{O}_4$ и $\text{Mg}_{0,25}\text{Mn}_{0,75}\text{Fe}_2\text{O}_4$.

Характеристика

Рентгеноструктурные исследования

Рентгенофазовый анализ (РФА) образцов и полнопрофильный анализ по методу Ритвельда проводили в непрерывном режиме в диапазоне $2\theta = 10\text{--}100^\circ$ с использованием рентгенограмм, полученных на дифрактометре PANalytical (CuK α 1+2). Результаты обрабатывались с помощью программного обеспечения MAUD. По данным рентгеноструктурного анализа каждый из приготовленных образцов порошка содержал фазу с пространственной группой Fd – 3 m S [32–34].

Размеры и морфология

Как неелевский, так и броуновский механизмы могут вносить значительный вклад в процесс релаксации магнитного момента МНЧ. При этом время релаксации Нееля зависит от объема самой МНЧ, а значение времени броуновской релаксации зависит от гидродинамического объема наночастицы. Поэтому в работах [32–34] были измерены оба данных диаметра (рис. 2 и табл. 1).

Измерения с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) проводились на ПЭМ высокого разрешения JEOL JEM-2010 для подтверждения распределения частиц по размерам и морфологии МНЧ. Частицы ресуспензировали в этаноле и наносили на медные сетки, покрытые углеродной пленкой, для исследования в ПЭМ.

Гидродинамический размер частиц также определяли методом динамического светорассеяния на корреляционном спектрометре Photocor Compact.

Брались 20 мг образца в стеклянный флакон, затем добавлялись 2 мл воды и помещались в прибор для измерения. Для вычисления гидродинамического диаметра частицы использовалось уравнение Стокса – Эйнштейна [36]:

$$D_{\tau} = \frac{k_B T}{3\pi\eta_0 d}, \quad (1)$$

где D_{τ} – коэффициент диффузии; k_B – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; η_0 – кинематическая вязкость системы; d – величина гидродинамического диаметра, по которой можно рассчитать соответствующее время броуновской релаксации $\tau_{B_0} = \frac{3V\eta_0}{k_B T}$ [37, 38], здесь V – гидродинамический объем МНЧ; k_B – постоянная Больцмана ($1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К); T – температура, η_0 – коэффициент вязкости среды.

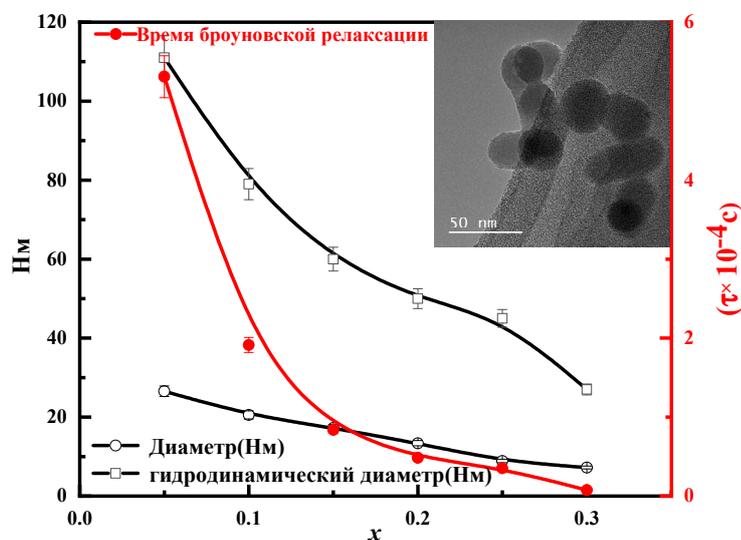


Рис. 2. Кривые гидродинамического диаметра и времени броуновской релаксации ($\times 10^{-4}$ с) МНЧ $Zn_x Mn_{1-x} Fe_2 O_4$ ($x = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2; 0,25; 0,3$) при $20^\circ C$. На вставке – ПЭМ-изображение наночастиц $Zn_{0,3} Mn_{0,7} Fe_2 O_4$ [33]

Таблица 1

Гидродинамический диаметр, диаметр (ПЭМ), время броуновской релаксации ($\times 10^{-4}$ с) данные МНЧ $Zn_x Mn_{1-x} Fe_2 O_4$ ($x = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2; 0,25; 0,3$) при $20^\circ C$ [33]

x	Гидродинамический диаметр, Нм	Диаметр (ПЭМ), Нм	Время броуновской релаксации ($\times 10^{-4}$ с)
0,05	104–118 \pm 5,5	27 \pm 1,3	5,3 \pm 0,26
0,1	68–90 \pm 3,9	21 \pm 1	1,9 \pm 0,09
0,15	50–70 \pm 3	17 \pm 0,8	0,84 \pm 0,04
0,2	35–65 \pm 2,5	13 \pm 0,6	0,49 \pm 0,02
0,25	35–55 \pm 2,25	9 \pm 0,4	0,35 \pm 0,1
0,3	19–35 \pm 1,35	7 \pm 0,36	0,076 \pm 0,003

Время броуновской релаксации рассчитывалось по формуле $\tau_{B_0} = \frac{3V\eta_0}{k_B T}$, где $T = 293$ К, а коэффициент вязкости воды при этой темпера-

туре принимался равным $1 \text{ мПа} \cdot \text{с}$. Форма МНЧ предполагалась сферической. Как видно из рис. 2, гидродинамический диаметр уменьшается с увеличением содержания Zn. Возможные механизмы, приводящие к уменьшению размера частиц с увеличением концентрации Zn, включают изменение параметров элементарной ячейки, длины межатомных связей и распределения катионов в октаэдрических и тетраэдрических позициях в кубической кристаллической структуре. Гидродинамическое отношение диаметра к диаметру МНЧ, измеренное с помощью ПЭМ, составляет около 4 и остается примерно постоянным для всех соединений феррита ZnMn, демонстрируя воспроизводимые условия синтеза (см. рис. 2 и табл. 1). Наши оценки времени броуновской релаксации [33] дали значения от 0,01 до 0,5 мс в зависимости от концентрации (красная кривая на рис. 2). Это означает, что на используемых частотах (сотни килогерц) влияние этого механизма на нагрев незначительно.

Магнитные измерения

Магнитные измерения данных частиц опубликованы в нашей работе [34] и проводились с использованием вибрационного магнитометра (VSM) Lake Shore модели 7407 с максимальным магнитным полем 1,5 Тл. Результаты измерения петли гистерезиса частиц феррита Zn-Mn показывают [34], что зависимость остаточной намагниченности от содержания Zn не является монотонной. Коэрцитивная сила монотонно уменьшается с увеличением содержания цинка. У МНЧ размером более 13 нм обнаружена ненулевая ширина петли гистерезиса. МНЧ меньшего размера обнаруживали ярко выраженное суперпарамагнитное поведение. Повторные измерения намагниченности показали [34], что после нагрева в процессе измерения SAR магнитные свойства МНЧ не изменились.

Магнитотермические измерения: SAR и ILP

Для измерения магнитотепловых свойств МНЧ использовали калориметр производства Группы АМТ&С (Москва, Россия), состоящий из индукционной катушки и системы реконфигурируемых конденсаторов, последовательно включенных с генератором переменного тока, переключающим частотный диапазон (рис. 3). Поскольку использование термопар в магнитотепловых измерениях часто вызывает вопросы о наводках из-за электромагнитной индукции Фарадея, то для того чтобы продемонстрировать, что в нашем исследовании этот фактор был пренебрежимо мал, мы провели измерения в режиме ступенчатого нагрева (при выключении магнитного поля за фазой нагрева следовала кратковременная фаза охлаждения [39] (рис. 4)). Видно, что скачки в показаниях термопары отсутствуют (имеют место только изломы). Это означает, что показания термопары полностью определяются значением температуры с пренебрежимо малым вкладом паразитных сигналов.

Для проверки достоверности результатов нами также были проведены измерения температуры деионизированной воды в зависимости от времени. Было обнаружено, что значение величины dT/dt деионизированной воды на

два порядка ниже, чем у наночастиц феррита ZnMn, а повышение температуры не превышает 1 °С в течение того же периода времени измерения, как и с МНЧ феррита ZnMn. Можно сделать вывод, что паразитный нагрев не влиял на представленные ниже экспериментальные результаты.

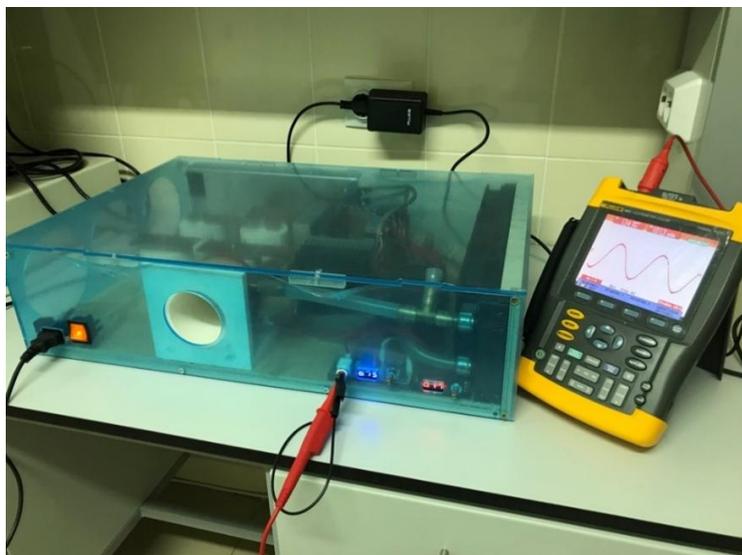


Рис. 3. Устройство калориметрии переменного магнитного поля [33]

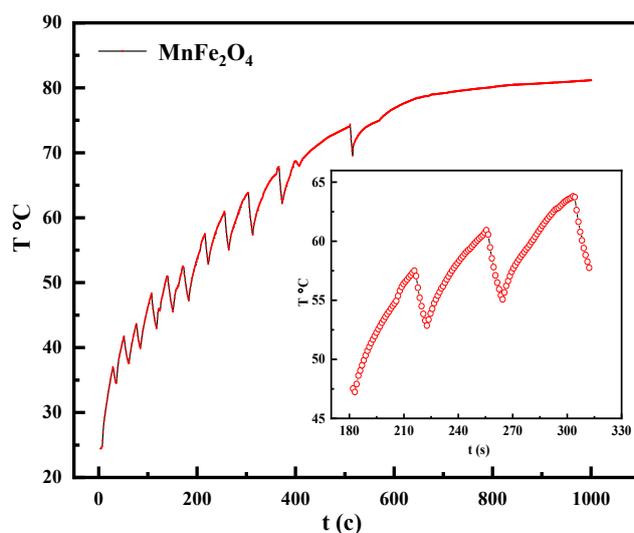


Рис. 4. Кривая в режиме ступенчатого нагрева (фаза нагрева сменяется короткой фазой охлаждения при выключении поля переменного тока) [33]

Величина SAR рассчитывалась как производная температуры по времени [40, 41]:

$$\text{SAR} = C \left(\frac{dT}{dt} \right) \left(\frac{M}{m} \right), \quad (2)$$

где C – теплоемкость жидкости; M/m – отношение массы воды к массе МНЧ; dT/dt – скорость нагрева, которую можно определить модифицированным методом наклона (сумма модулей и наклонов нагрева и кривые охлаждения при фиксированной температуре [42]).

SAR зависит не только от используемого образца, но и от величины и частоты поля переменного магнитного поля [43]:

$$\text{SAR} \sim \chi_0 H_0^2 f \frac{2\pi f \tau}{1 + |2\pi f \tau|^2}, \quad (3)$$

где H_0 – величина переменного магнитного поля; f – его частота; χ_0 – магнитная восприимчивость; τ – время релаксации.

Поскольку величина SAR зависит от величин H и f , то для сопоставления экспериментальных результатов, полученных при различных параметрах поля, разными группами ученых в опубликованных работах вводится еще одна магнитотепловая характеристика – мощность внутренних потерь (ILP), которая в простейшем случае не зависит от поля и частоты [43, 44]:

$$\text{ILP} = \frac{\text{SAR}}{H_0^2 \cdot f}. \quad (4)$$

Частотная восприимчивость образца МНЧ определяется временем магнитной релаксации, определяемым как сумма обратных броуновского и неелевского вкладов, соответствующих механическому вращению частицы и ее перемагничиванию под действием переменного магнитного поля соответственно [43]:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_B} + \frac{1}{\tau_N}. \quad (5)$$

Для МНЧ, взвешенных в жидкости вдали от точки Кюри и точки замерзания/стеклования жидкой среды, трудно различить вклад броуновского и неелевского механизмов, поскольку их частотная и полевая зависимости имеют аналогичный характер. Однако возможно воспользоваться тем фактом, что вязкость некоторых жидкостей, таких как глицерин, изменяется на три порядка в диапазоне температур от комнатной до 150 °С, что позволяет выделить броуновский вклад путем сравнения величины SAR в МНЧ при разных температурах.

Все материалы и методы в этой работе не связаны с испытаниями на людях и животных.

Результаты и обсуждение

На рис. 5, по данным нашей работы [33], для сравнения представлены типичные кривые нагрева/охлаждения суспензий $\text{Zn}_{0,2}\text{Mn}_{0,8}\text{Fe}_2\text{O}_4$ и Fe_3O_4 (наночастицы 20 мг, взвешенные в 100 мкл деионизированной воды) в ЭМ-поле со среднеквадратичной величиной магнитного поля 100 Э (далее по тексту имеется в виду именно данное значение поля) и частотой 0,15 МГц. В этих условиях температура достигает насыщения в течение 600 с. При этом при достижении насыщения мощность нагрева равна потерям тепла за счет теп-

лоотвода, что видно на фазе охлаждения: при выключении переменного магнитного поля ($t > 600$ с) температура падает с той же скоростью, что и в начальной фазе (0–100 с). Как можно видеть, скорость и температуры нагрева суспензий $Zn_{0,2}Mn_{0,8}Fe_2O_4$ и Fe_3O_4 существенно отличаются, что связано с заметно большим тепловыделением суспензий $Zn_{0,2}Mn_{0,8}Fe_2O_4$ и, таким образом, они могут быть рассмотрены как более эффективный магнитный материал для процедуры магнитной гипертермии.

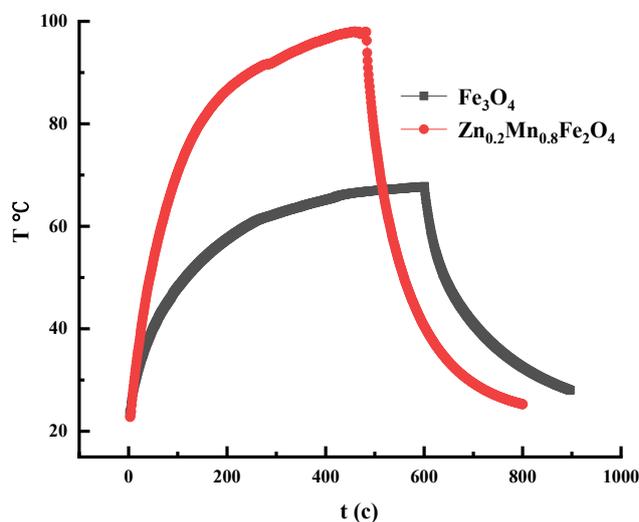


Рис. 5. Кривые нагрева/охлаждения и значения SAR водных суспензий МНЧ в переменном ЭМ-поле 100 Э и частотой 0,15 МГц [33]

Эти измерения нагрева/охлаждения были использованы для расчета величины SAR для различных ферритовых соединений в соответствии с процедурой, описанной в нашей работе [33]. Окончательная гистограмма значений SAR показана на рис. 6. Видно, что наиболее эффективное тепловыделение со значениями SAR более 12 Вт/г наблюдается для МНЧ $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ в диапазоне замещения Zn $x = 10\text{--}20\%$. Максимальное значение SAR = 16,22 Вт/г для данной частоты и амплитуды поля обнаружено для образца $Zn_{0,15}Mn_{0,85}Fe_2O_4$. Вместе с этим нами установлено, что расположение максимального значения величины SAR существенно зависит от амплитуды и частоты ЭМ-поля. Поэтому рассмотрение возможности использования диапазона более низких частот должно сочетаться с изменением содержания Zn и размера МНЧ.

С целью дальнейшего изучения магнитотепловых свойств $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ и их зависимости от частоты ЭМ-поля в работе [33] была проведена серия экспериментов в поле 60 Э. Рассчитанные значения SAR показаны на рис. 7. Проведенные исследования подтвердили, что, как и следовало ожидать, значения величины SAR всех соединений $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ линейно увеличивались с увеличением частоты поля. Установлено, что увеличение частоты с 0,1 до 0,3 МГц приводит к смещению максимума SAR от $x = 0,15$ до 0,25 (эта тенденция показана пунктирной стрелкой на рис. 7), что также можно объяснить выполнением условия $2\pi f\tau = 1$: более высокая частота означает, что при меньшем времени магнитной релаксации τ и меньшем среднем размере частиц размер действительно уменьшается с увеличением содержания Zn x .

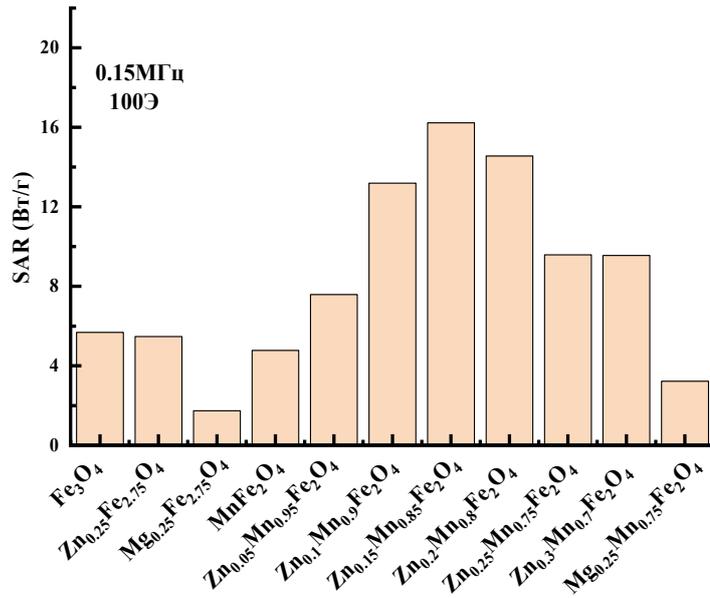


Рис. 6. Значения SAR различных взвесей МНЧ в воде в переменном магнитном поле 100 Э ($f = 0,15$ МГц) [33]

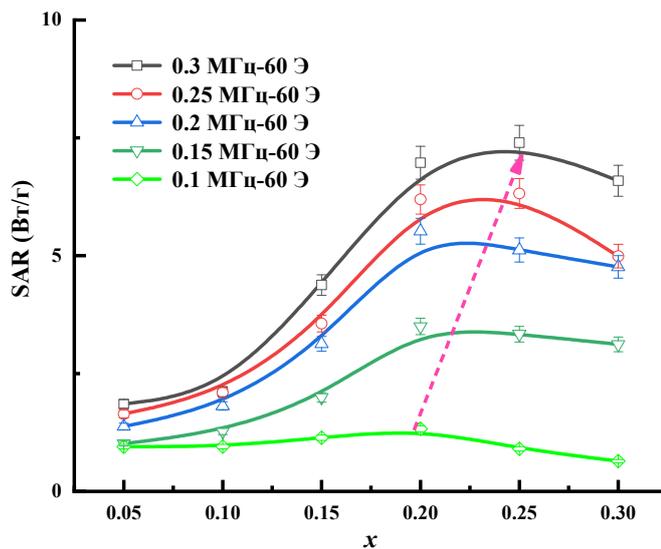


Рис. 7. Значения SAR и кривые суспензий $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ ($x = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2; 0,25; 0,3$) в дистиллированной воде при разных частотах (переменное магнитное поле фиксировалось на уровне 60 Э, расположение пиков указано штриховой стрелкой). Значки – экспериментальные значения. Линия – аппроксимация по методу наименьших квадратов [33]

Зависимость значения SAR от диаметра наночастиц $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ с различным содержанием Zn при $f = 0,1$ МГц и $H = 60$ Э представлена на рис. 8. Можно сделать вывод, что зависимость $SAR(x)$ имеет ярко выраженный немонотонный характер, что свидетельствует о лучшем тепловом отклике при приложении к МНЧ переменного магнитного поля при $x = 0,2$.

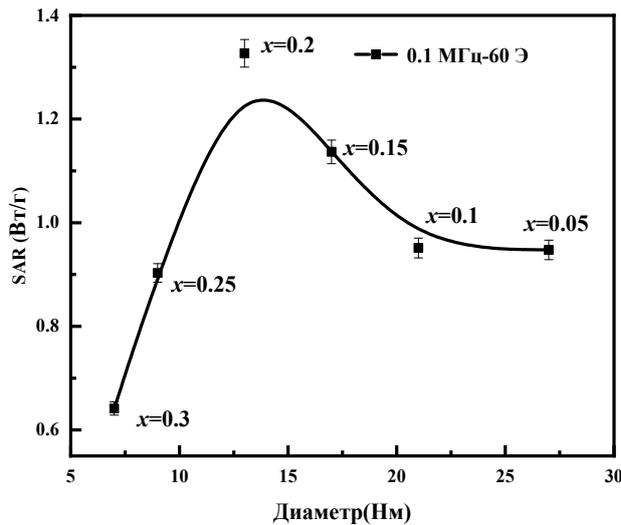


Рис. 8. Зависимость SAR диаметра $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ ($x = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2; 0,25; 0,3$) при $f = 0,1$ МГц и поле $H = 60$ Э [32]

Наши исследования [32] показали, что значения величины SAR изменялись в зависимости от содержания Zn и для частиц среднего размера $x = 0,2$ достигали максимума при $f = 0,1$ МГц при значениях магнитных полей 60 и 100 Э. Таким образом, можно сделать вывод, что магнитотепловые свойства наночастиц зависят как от размера, так и состава и весьма существенно влияют на наблюдаемые экспериментально значения SAR.

На рис. 9 представлена зависимость SAR от среднеквадратичного значения магнитного поля. Как можно видеть, характер зависимости $SAR(H)$ изменяется от содержания Zn (и, следовательно, от среднего размера МНЧ). Для более мелких частиц ($x = 0,25, x = 0,3$) зависимость тяготеет к традиционному квадратичному закону, а величина SAR более крупных частиц ($x = 0,1-0,2$) для данных концентраций 200 мг/мл имеет сверхквадратичную зависимость с диапазоном магнитного поля переменного тока 60–100 Э. Следует отметить, что в более высоком диапазоне магнитных полей (от 100 до 200 Э) величина SAR увеличивается с ростом магнитного поля, однако данный диапазон ЭМ-поля на частоте 0,1 МГц превышает предел Брезовича. Как показали наши исследования [34], сверхквадратичную зависимость тепловыделения более крупных частиц от магнитного поля (SAR , пропорциональную H^5) можно объяснить нелинейным магнитным откликом МНЧ из-за увеличения вклада гистерезисных потерь (петля гистерезиса и коэрцитивная сила более выражены для МНЧ феррита ZnMn с $x = 0-0,2$), в то время как неелевская релаксации [19, 40] доминирует для более мелких МНЧ ($x > 0,2$), обнаруживающих типичное суперпарамагнитное поведение [34].

Таким образом, установлено [32], что зависимость величины SAR от амплитуды магнитного поля может быть нетривиальной, даже когда величина произведения $H \times f$ находится в рамках физиологического предела Брезовича [7]. Это очень важный вывод, поскольку потенциальные побочные эффекты на здоровые ткани возрастают пропорционально квадрату амплитуды, а величина SAR в МНЧ увеличивается быстрее квадратичной зависимости, что гарантирует селективность нагрева опухолевой ткани, содержащей МНЧ.

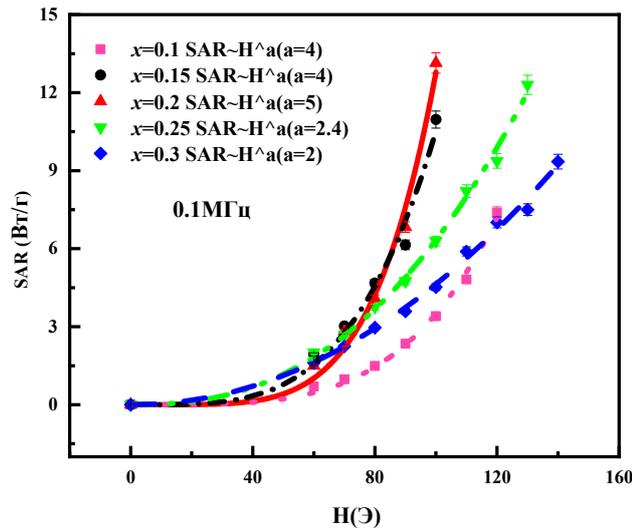


Рис. 9. Зависимость SAR(H) МНЧ $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ ($x = 0,1; 0,15; 0,2; 0,25; 0,3$) от магнитного поля $f = 0,1$ МГц [32]

В целом оба механизма (как броуновский, так и неелевский) вносят вклад в эффективное время релаксации τ (5), но полученные нами относительно высокие значения расчетного времени броуновской релаксации (0,01 мс и выше) означают, что они вносят пренебрежимо малый вклад в величину общего времени релаксации (которое может быть рассчитано в соответствии с выражением (5)) по сравнению со временем релаксации Нееля (время Нееля оценивается порядка 1 мкс и меньше, чтобы удовлетворить условию $2\pi f\tau = 1$ при частотах переменного поля 100 кГц и выше).

Чтобы лучше понять физический механизм нагревания, нами были проведены дополнительные эксперименты [33]. Водная суспензия была заменена на 96 % раствор глицерина в воде, вязкость которого сильно зависит от температуры, и проведены дополнительные измерения кривых нагревания/охлаждения. Сравнение значений SAR и ILP для воды и глицерина показано на рис. 10. Видно, что для составов наночастиц с умеренными степенями замещения Zn $x = 0,1, 0,2$ (средние гидродинамические диаметры наночастиц 80 нм и 50 нм соответственно) значения SAR и ILP существенно отличаются от соответствующих значений для воды, в то время как для $x = 5\%$ и $x = 30\%$ (гидродинамические диаметры 110 нм и 25 нм соответственно) две жидкости почти идентичны.

Значительную разницу в величине SAR МНЧ в растворах воды и глицерина можно объяснить отличием в механизмах нагревания в этих двух жидкостях. При низких температурах преобладает механизм Нееля в обеих жидкостях, и магнитотепловые свойства двух суспензий подобны друг другу. Однако для частиц среднего размера ($x = 0,1$ и $0,2$), времена релаксации которых удовлетворяют оптимальному условию $2\pi f\tau = 1$, значения SAR и ILP настолько велики, что во время воздействия ЭМ-поля достигается диапазон температур выше $70\text{ }^\circ\text{C}$. Быстрое падение вязкости глицерина (более чем на порядок по сравнению со значениями комнатной температуры) при этих температурах активизирует механизм броуновского нагрева, что приводит к более

высоким значениям SAR и ILP. Следует отметить, что время релаксации Нееля также зависит от температуры, но дальнейшее его уменьшение лишь снижает тепловой отклик (за счет нарушения оптимального условия $2\pi f\tau = 1$).

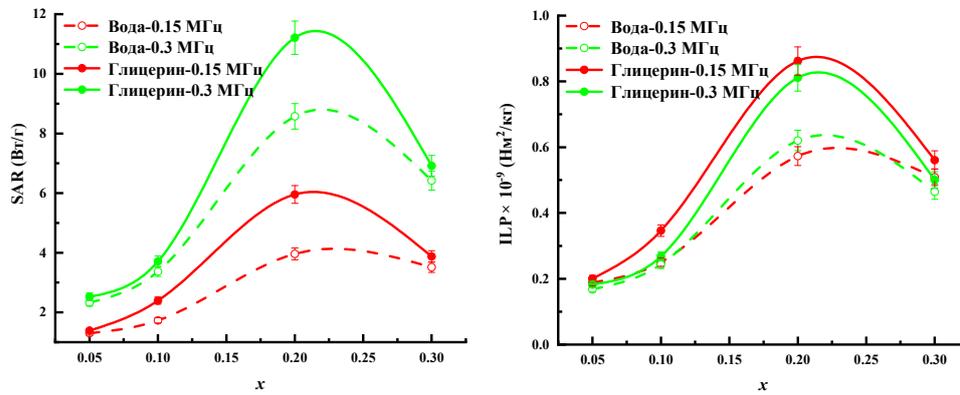


Рис. 10. Сравнение магнито-тепловых свойств суспензий $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ ($x = 0,05, 0,1, 0,2, 0,3$) в дистиллированной воде и 96 % растворе глицерина на частотах 0,15 и 0,3 МГц (переменное магнитное поле 60 Э). Точки – экспериментальные значения. Линия – аппроксимация по методу наименьших квадратов [33]

На температурной зависимости значений SAR, полученных методом скорректированного наклона, отчетливо видна активация броуновского механизма в глицерине для частиц среднего размера: значения SAR значительно увеличиваются при более высоких температурах, которые могут быть достигнуты при 0,3 МГц (рис. 11, замкнутые кружки – экспериментальные точки).

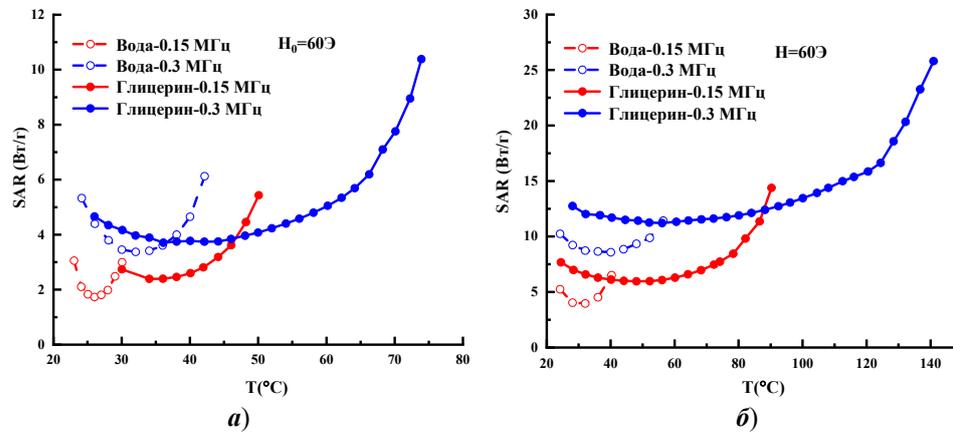


Рис. 11. Значения SAR наночастиц $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$, взвешенных в дистиллированной воде и глицерине, в диапазоне температур: **a** – $x = 0,1$; **б** – $x = 0,2$. График – экспериментальные значения. Линия – математическое приближение по методу наименьших квадратов [33]

По сравнению с частотной зависимостью SAR, которая обычно следует линейной тенденции для всех соединений $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$, зависимость от по-

ля носит гораздо более сложный характер (рис. 12). ИЛР частиц с низким содержанием цинка ($x = 0,05-0,2$) увеличивалась с переменным магнитным полем (рис. 12,б), а для мелких частиц с более высоким содержанием цинка ($x = 0,25-0,3$) значение ИЛР для всех магнитных полей внутри имеет все те же статистические ошибки. Иными словами, для малых частиц зависимость от амплитуды магнитного поля тривиальна (квадратична), а для крупных частиц – сверхквадратична.

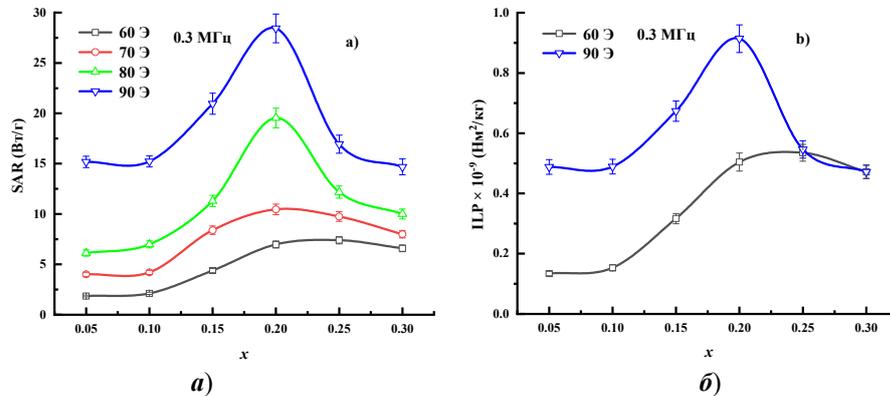


Рис. 12. Магнитотепловые свойства суспензий $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ ($x = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2; 0,25; 0,3$) в дистиллированной воде при различных значениях магнитного поля (частота фиксирована на уровне 0,3 МГц): **а** – значение SAR; **б** – ИЛР значений (для наглядности показаны предельные случаи 60 и 90 Э). Значок – экспериментальное значение. Линия – аппроксимация с использованием метода наименьших квадратов [33]

Этот сверхквадратичный закон хорошо виден на рис. 13 для самых крупных частиц с содержанием цинка $x = 0,05$. Аппроксимация кривой дает зависимость 5-й степени.

Обсуждая оптимизацию магнитотепловых свойств магнитных наночастиц для гипертермии, следует учитывать не только свойства магнитных материалов, но и физиологические и технические аспекты. Физиологические требования должны удовлетворять упомянутому выше пределу по Брезовичу. Еще одной проблемой, как упоминалось выше, являются чисто технические проблемы высокочастотных электропроводящих систем: скин-слой менее 0,1 мм в проводах источника поля на частотах выше 0,2 МГц, что не позволяет масштабировать рабочий объем катушки до 500 мм, необходимый для проведения клинических процедур на пациентах.

При создании резонансного силового контура переменного магнитного поля по мере увеличения частоты необходимо уменьшать индуктивность и емкость самого соленоида, что вызывает скин-эффект, а также сильную неоднородность магнитного поля внутри соленоида.

В этом случае разумной стратегией является работа на относительно низких частотах (0,1 МГц и ниже). Учитывая частотный сдвиг максимума SAR (см. рис. 7), следует использовать крупные частицы $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ с низким содержанием Zn ($x = 0,1-0,15$). Хотя SAR пропорционален частоте, его можно компенсировать соответствующим увеличением переменного магнитного поля: 5-я степенная полевая зависимость означает, что уменьшение

частоты в два раза приведет к увеличению значения SAR в $2^4 = 16$ раз, а поддержание произведения Брезовича постоянным.

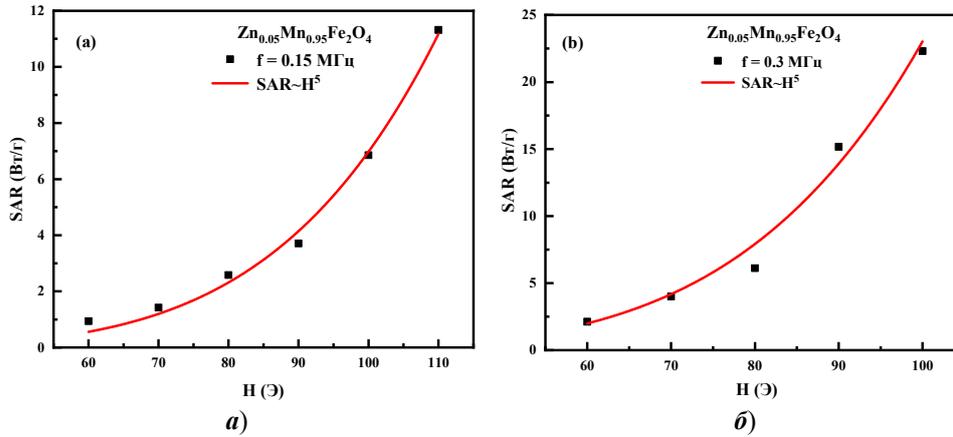


Рис. 13. Зависимость наночастиц $Zn_{0.05}Mn_{0.95}Fe_2O_4$ от магнитного поля:
a – $f = 0,15$ МГц; **б** – $f = 0,3$ МГц. Значки – экспериментальные значения.
 Линия – аппроксимация с использованием метода наименьших квадратов [33]

Проведенный в настоящей работе анализ с использованием наших экспериментальных данных, опубликованных в работах [32, 34], позволил четко разделить области с различными механизмами релаксации. На рис. 14 представлен график зависимости коэрцитивной силы от объема наночастиц. Согласно приведенным выше данным SAR для наночастиц размером менее 13 нм доминирующим механизмом является механизм релаксации Нееля (сиреневая область: механизм релаксации Нееля), тогда как для наночастиц размером более 13 нм преобладает гистерезисный механизм (светло-зеленая область).

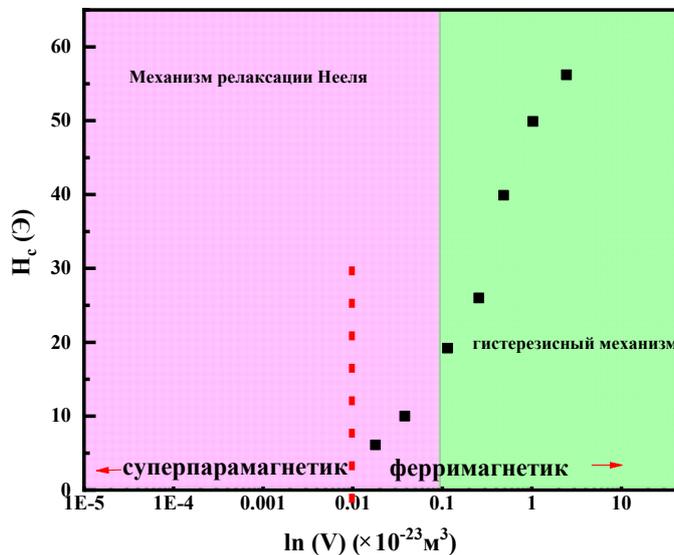


Рис. 14. Зависимость коэрцитивной силы, H_c , как функция объема, V , водных суспензий наночастиц (объем дан в логарифмическом масштабе)

Заключение

Проведенные нами исследования показали [32–34], что значения величины SAR в Zn-замещенных МНЧ существенно выше, чем у Mg-замещенных МН и обычных МНЧ магнетита. Выполненные магнитотепловые измерения $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ показали, что максимальные значения величины SAR имеют явную тенденцию к смещению в сторону более высоких концентраций Zn с увеличением частоты поля. Этот факт можно объяснить связью между временем магнитной релаксации и средним размером частиц, который, в свою очередь, зависит от содержания в них Zn (последний факт подтвержден данными динамического светорассеяния и ПЭМ-измерений).

Сравнение магнитотепловых свойств суспензий $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ в дистиллированной воде и 96 % растворе глицерина позволяет сделать вывод, что в терапевтическом диапазоне температур ниже 50 °С преобладает механизм Нееля. В настоящей работе также продемонстрирована активация броуновского механизма релаксации наночастиц ZnMn в растворе глицерина при температуре выше 50 °С.

Данные исследований [32–34] особенно важны, поскольку позволили обнаружить ранее неизвестную, близкую к пятой, сверхквадратичную зависимость удельного коэффициента поглощения электромагнитной энергии от амплитуды магнитного поля в МНЧ Zn-Mn-феррита с содержанием Zn 20 %. Показано, что подбор оптимального состава, структурных параметров и магнитных свойств МНЧ феррита MnZn сможет значительно улучшить тепловыделение МНЧ на относительно низких частотах (~0,1 МГц) и расширить применение магнитной гипертермии за счет снижения концентраций суспензий, требуемых для проведения лечебной процедуры (повышения преобразования электромагнитной энергии в тепловую), а также снижения массо-габаритных и энергетических характеристик источников ЭМ-поля для проведения клинических процедур. Дальнейшие исследования должны быть сконцентрированы на поиске физических механизмов, позволяющих еще больше увеличить отклонение сверхквадратичной зависимости от хорошо известной квадратичной.

Обнаруженная в наших работах [32–34] сверхквадратичная корреляция значения величины SAR с амплитудой магнитного поля позволяет предложить новую стратегию оптимизации проведения магнитной гипертермии и сдвинуть фокус поиска оптимального решения трилеммы магнитной гипертермии в сторону пониженных частот (ниже 0,1 МГц), увеличения амплитуды магнитного поля (при сохранении постоянного произведения частоты и амплитуды магнитного поля, удовлетворяющих критерию Брезовича) и крупных МНЧ с гистерезисным механизмом тепловыделения.

Обоснование выбора наночастиц зависит от конкретного состава и метода химического приготовления. В случае наночастиц $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$, полученных методом соосаждения, химический состав тесно связан со средним размером частиц. Поэтому снижение рабочей частоты должно сопровождаться соответствующим увеличением среднего размера наночастиц. В случае исследованных в настоящей работе образцов $Zn_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ это означает снижение содержания Zn.

Полученные в работе результаты являются крайне важными для целого ряда других магнитотепловых применений МНЧ, таких как доставка лекарств

на основе микрокапсул, запуск выброса гормонов надпочечников, нейроинтефейсы и т.д., поскольку могут позволить проводить данные процедуры в более низких частотах.

Список литературы

1. Hilger I. The role of magnetic hyperthermia in heating-based oncological therapies // *Magnetic materials and Technologies for Medical Applications* / ed. by A. M. Tishin. Elsevier, 2021. P. 0128225327.
2. Vasseur S., Duguet E., Portier J., Goglio G., Mornet S., Hadová E., Knížek K., Maryško M., Veverka P., Pollert E. Lanthanum manganese perovskite nanoparticles as possible in vivo mediators for magnetic hyperthermia // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2006. Vol. 302 (2). P. 315–320. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2005.09.026>
3. Thorat N. D., Khot V. M., Salunkhe A. B., Ningthoujam R. S., Pawar S. H. Functionalization of $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ nanoparticles with polymer: Studies on enhanced hyperthermia and biocompatibility properties for biomedical applications // *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*. 2013. Vol. 104. P. 40–47. URL: <https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2012.11.028>
4. Hilger I. In vivo applications of magnetic nanoparticle hyperthermia // *International Journal of Hyperthermia*. 2013. Vol. 29 (8). P. 828–834. URL: <https://doi.org/10.3109/02656736.2013.832815>
5. He S. L., Zhang H. W., Liu Y. H., Sun F., Yu X., Li X. Y., Zhang L., Wang L. Ch., Mao K. Y., Wang G. Sh., Lin Y. J., Han Zh. Ch., Sabirianov R., Zeng H. Magnetic Nanoparticle Hyperthermia: Maximizing Specific Loss Power for Magnetic Hyperthermia by Hard-Soft Mixed Ferrites // *Small*. 2018. Vol. 14. P. 29. URL: <https://doi.org/10.1002/sml.201870133>
6. Etemadi H., Plieger P. G. Magnetic Fluid Hyperthermia Based on Magnetic Nanoparticles: Physical Characteristics, Historical Perspective, Clinical Trials, Technological Challenges, and Recent Advances // *Advances in Therapy*. 2020. Vol. 200006. P. 11–49. URL: <https://doi.org/10.1002/adtp.202000061>
7. Brezovich I. A. Low frequency hyperthermia: capacitive and ferromagnetic thermoseed methods // *Medical Physics Monograph*. 1988. Vol. 16. P. 82–111. URL: <https://scholar.google.com/scholar?hl=en&q=%0A%0AI.+Brezovich%2C+Med.+Phys.+Monogr.+16%2C+82%E2%80%9393111+%281988%29.>
8. Weinberg I. N., Stepanov P. Y., Fricke S. T., Roland P., Mario U., Daniel W., Howard S., Glidden S. C., Alan M. M., Starewicz P. M., Reilly J. P. Increasing the oscillation frequency of strong magnetic fields above 101 kHz significantly raises peripheral nerve excitation thresholds // *Medical Physics*. 2012. Vol. 39 (5). P. 2578–2583. URL: <https://doi.org/10.1118/1.3702775>
9. Bruggmoser G., Bauchowitz S., Canters R., Crezee H., Ehmann M., Gellermann J., Lamprecht U., Lomax N., Messmer M. B., Ott O., Abdel-Rahman S., Schmidt M., Sauer R., Thomsen A., Wessalowski R., van Rhoon G. Atzelsberg Research Group European Society for Hyperthermic Oncology. Guideline for the clinical application, documentation and analysis of clinical studies for regional deep hyperthermia // *Strahlentherapie Onkologie*. 2012. Vol. 188, suppl. 2. P. 198–211. doi:10.1007/s00066-012-0176-2
10. Dobšíček Trefná H., Schmidt M., van Rhoon G. C., Kok H. P., Gordeyev S. S., Lamprecht U., Marder D., Nadobny J., Ghadjar P., Abdel-Rahman S., Kukielka A. M., Strnad V., Hurwitz M. D., Vujaskovic Z., Diederich C. J., Stauffer P. R., Crezee J. Quality assurance guidelines for interstitial hyperthermia // *International Journal of Hyperthermia*. 2019. Vol. 36 (1). P. 276–293. doi:10.1080/02656736.2018.1564155
11. Dutz S., Hergt R. Magnetic particle hyperthermia – a promising tumour therapy? // *Nanotechnology*. 2014. Vol. 25. P. 452001. doi:10.1088/0957-4484/25/45/452001

12. Borrelli N. F., Luderer A. A., Panzarino J. N. Hysteresis heating for the treatment of tumours // *Physics in Medicine and Biology* 1984. Vol. 29 (5). P. 487–494. doi:10.1088/0031-9155/29/5/001
13. Gneveckow U., Jordan A., Scholz R. The novel hyperthermia- and thermoablation-system MFH@300F for MFH // *Medical Physics*. 2004. Vol. 31. P. 6. doi:10.1118/1.1748629
14. Johannsen M., Gneveckow U., Taymoorian K., Thiesen B., Waldöfner N., Scholz R., Jung K., Jordan A., Wust P., Loening S. A. Morbidity and quality of life during thermo-therapy using magnetic nanoparticles in locally recurrent prostate cancer: results of a prospective phase I trial // *International Journal of Hyperthermia*. 2007. Vol. 23 (3). P. 315–23. doi:10.1080/02656730601175479. PMID: 17523023.
15. Maier-Hauff K., Ulrich F., Nestler D., Niehoff H., Wust P., Thiesen B., Orawa H., Budach V., Jordan A. Efficacy and safety of intratumoral thermotherapy using magnetic iron-oxide nanoparticles combined with external beam radiotherapy on patients with recurrent glioblastoma multiforme // *Journal of Neuro-Oncology*. 2011. Vol. 103 (2). P. 317–324. doi:10.1007/s11060-010-0389-0
16. Pavlov A. M., Gabriel S. A., Sukhorukov G. B., Gould D. J. Improved and targeted delivery of bioactive molecules to cells with magnetic layer-by-layer assembled microcapsules // *Nanoscale*. 2015. Vol. 7. P. 9686–9693. URL: <https://doi.org/10.1039/C5NR01261A>
17. Hescham S. A., Chiang P. H., Gregurec D., Moon J., Christiansen M. G., Jahanshahi A., Liu H. J., Rosenfeld D., Pralle A., Anikeeva P., Temel Y. Magnetothermal nanoparticle technology alleviates parkinsonian-like symptoms in mice // *Nature Communications* 2021. Vol. 12. P. 5569. URL: <https://doi.org/10.1038/s41467-021-25837-4>
18. Maeng L. Y., Rosenfeld D., Simandl G. J., Koehler F., Senko A. W., Moon J., Varnavides G., Murillo M. F., Reimer A. E., Wald A., Anikeeva P., Widge A. S. Probing Neuro-Endocrine Interactions Through Wireless Magnetothermal Stimulation of Peripheral Organs // *bioRxiv*. 2021. P. 1–22. URL: <https://doi.org/10.1101/2021.06.24.449506>
19. Thiesen B., Jordan A. Clinical applications of magnetic nanoparticles for hyperthermia // *International Journal of Hyperthermia*. 2008. Vol. 24 (6). P. 467–474. URL: <https://doi.org/10.1080/02656730802104757>
20. Pradhan P., Giri J., Samanta G., Sarma H. D., Mishra K. P., Bellare J., Banerjee R., Bahadur D. Comparative evaluation of heating ability and biocompatibility of different ferrite-based magnetic fluids for hyperthermia application // *Journal of Biomedical Materials Research Part B: Applied Biomaterials*. 2007. Vol. 81 (1). P. 12–22. URL: <https://doi.org/10.1002/jbm.b.30630>
21. Liu J., Zhang J., Wang L., Li Y. T., Zhang D. S., Biocompatibility Study of $Mn_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$ Magnetic Nanoparticles // *Key Engineering Materials*. 2011. Vol. 483. P. 552–558. URL: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.483.552>
22. Das R., Alonso J., Porshokouh Z. N., Kalappattil V., Torres D., Phan M. H., Garaio E., Garcia J. A., Llamazares J. L. S., Srikanth H., Tunable High Aspect Ratio Iron Oxide Nanorods for Enhanced Hyperthermia // *The Journal of Physical Chemistry C*. 2016. Vol. 120. P. 10086–10093. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b02006>
23. Elkhova T. M., Yakushechkina A. K., Semisalova A. S., GuñKo Y. K., Spichkin Y. I., Pyatakov A. P., Kamilov K. I., Perov N. S., Tishin A. M. Heating of Zn-Substituted Manganese Ferrite Magnetic Nanoparticles in Alternating Magnetic Field // *Solid State Phenomena*. 2015. Vol. 761. P. 233–234. URL: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.233-234.761>
24. Price P. M., Mahmoud W. E., Al-Ghamdi A. A., Bronstein L. M. Magnetic Drug Delivery: Where the Field Is Going // *Frontiers in Chemistry*. 2018. Vol. 6. P. 619. URL: <https://doi.org/10.3389/fchem.2018.00619>
25. Salakhova R. T., Pyatakov A. P., Zverev V. I., Pimentel B., CaraballoVivas R. J., Makarova L. A., Perov N. S., Tishin A. M., Shtil A. A., Reis M. S. The frequency dependence of magnetic heating for $La_{0.75}Sr_{0.25}MnO_3$ nanoparticles // *Journal of Mag-*

- netism and Magnetic Materials. 2019. Vol. 470. P. 38–40. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.11.126>
26. Ferreira M. C., Pimentel B., Andrade V., Zverev V., Gimaev R. R., Pomorov A. S., Pyatakov A., Alekhina Y., Komlev A., Makarova L., Perov N., Reis M. S. Understanding the dependence of nanoparticles magnetothermal properties on their size for hyperthermia applications: A case study for la-sr manganites // *Nanomaterials*. 2021. Vol. 11.7. P. 1826. URL: <https://doi.org/10.3390/nano11071826>
 27. Verde E. L., Landi G. T., Carrião M. S., Drummond A. L., Gomes J. A., Vieira E. D., Sousa M. H., Bakuzis A. F. Field dependent transition to the non-linear regime in magnetic hyperthermia experiments: Comparison between maghemite, copper, zinc, nickel and cobalt ferrite nanoparticles of similar sizes // *AIP Advances*. 2012. Vol. 2. P. 032120. URL: <https://doi.org/10.1063/1.4739533>
 28. Lee J. H., Jang J. T., Choi J. S., Moon S. H., Noh S. H., Kim J. W., Kim J. G., Park K. I., Cheon J. Exchange-coupled magnetic nanoparticles for efficient heat induction // *Nature Nanotechnology*. 2011. Vol. 6 (7). P. 418–422. doi:10.1038/nnano.2011.95
 29. Ahmad F. Pitfalls and Challenges in Nanotoxicology: A Case of Cobalt Ferrite(CoFe_2O_4) Nanocomposites // *Chemical Research in Toxicology*. 2017. Vol. 30 (2). P. 492–507. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.chemrestox.6b00377>
 30. Mmesli O. K., Masunga N., Kuvarega A., Nkambule T.T., Mamba B. B., Kefeni K. K. Cobalt ferrite nanoparticles and nanocomposites: Photocatalytic, antimicrobial activity and toxicity in water treatment // *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2021. Vol. 123. P. 105523. URL: <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2020.105523>
 31. Yuan Ch. Y., Tang Q.-Sh., Zhang D. Sh. Biocompatibility of $\text{Mn}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{Fe}_2\text{O}_4$ Magnetic Nanoparticles and Their Thermotherapy on VX_2 -Carcinoma-Induced Liver Tumors // *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. 2015. Vol. 15. P. 74–84. doi:10.1166/jnn.2015.9150
 32. Liu N. N., Pyatakov A. P., Zharkov M. N., Pyataev N. A., Sukhorukov G. B., Alekhina Y. A., Perov N. S., Gun'ko Y. K., Tishin A. M. Optimization of Zn–Mn ferrite nanoparticles for low frequency hyperthermia: Exploiting the potential of superquadratic field dependence of magnetothermal response // *Applied Physics Letters*. 2022. Vol. 120. P. 1–5. doi:10.1063/5.0082857
 33. Liu N. N., Pyatakov A. P., Saletsky A. M., Zharkov M. N., Pyataev N. A., Sukhorukov G. B., Gun'ko Y. K., Tishin A. M. The “field or frequency” dilemma in magnetic hyperthermia: The case of Zn single bond Mn ferrite nanoparticles // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2022. Vol. 555. P. 1–12. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2022.169379>
 34. Лю Н. Н., Алехина Ю. А., Пятаков А. П., Жарков М. Н., Пятаев Н. А., Перов Н. С., Сухоруков Г. Б., Тишин А. М., Взаимосвязь магнитных и магнитотепловых свойств наночастиц феррита ZnMn // *Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия*. 2022. № 2.
 35. Kannan Y. B., Saravanan R., Srinivasan N., Praveena K., Sadhana K. Synthesis and characterization of some ferrite nanoparticles prepared by co-precipitation method // *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2016. Vol. 27. P. 12000–12008. URL: <https://doi.org/10.1007/s10854-016-5347-y>
 36. Edward T. J. Molecular volumes and the stokes-einstein equation // *Journal of Chemical Education*. 1970. Vol. 47 (4). P. 261–270. URL: <https://doi.org/10.1021/ed047p261>
 37. Payet B., Vincent D., Delaunay L., Noyel G. Influence of particle size distribution on the initial susceptibility of magnetic fluids in the Brown relaxation range // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 1998. Vol. 186. P. 168–174. URL: [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(98\)00082-1](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(98)00082-1)
 38. Martsenyuk M. A., Raikher Y. L., Shliomis M. I. On the kinetics of magnetization of suspensions of ferromagnetic particles // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 1974. Vol. 65. P. 834–841. URL: http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/dn/e_038_02_0413.pdf

39. Iacob N., Schinteie G., Palade P., Ticos C. M., Kuncser V. Stepped heating procedure for experimental SAR evaluation of ferrofluids // *The European Physical Journal E*. 2015. Vol. 38. P. 57. URL: <https://doi.org/10.1140/epje/i2015-15057-8>
40. Périgo E. A., Hemery G., Sandre O., Ortega D., Teran F. J. Fundamentals and advances in magnetic hyperthermia // *Applied Physics Reviews*. 2015. Vol. 2. P. 041302. URL: <https://doi.org/10.1063/1.4935688>
41. Pimentel B., Caraballo-Vivas R. J., Checca N. R., Zverev V. I., Salakhova R. T., Makarova L. A., Pyatakov A. P., Perov N. S., Tishin A. M., Shtil A. A., Possi A. L., Reis M. S. Threshold heating temperature for magnetic hyperthermia: Controlling the heat exchange with the blocking temperature of magnetic nanoparticles // *Journal of Solid State Chemistry*. 2018. Vol. 260. P. 34–38. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2018.01.001>
42. Wildeboer R. R., Southern P., Pankhurst Q. A. On the reliable measurement of specific absorption rates and intrinsic loss parameters in magnetic hyperthermia materials // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2014. Vol. 47. P. 495003. URL: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/47/49/495003>
43. Rosensweig R. E. Heating magnetic fluid with alternating magnetic field // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2002. Vol. 252. P. 370–374. URL: [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(02\)00706-0](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(02)00706-0)
44. Behdadfar B., Kermanpur A., Sadeghi-Aliabadi H., Mozaffari M. D. P. Synthesis of high intrinsic loss power aqueous ferrofluids of iron oxide nanoparticles by citric acid-assisted hydrothermal-reduction route // *Journal of Solid State Chemistry*. 2012. Vol. 187. P. 20–26. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2011.12.011>

References

1. Hilger I. The role of magnetic hyperthermia in heating-based oncological therapies. *Magnetic materials and Technologies for Medical Applications*. Elsevier, 2021:0128225327.
2. Vasseur S., Duguet E., Portier J., Goglio G., Mornet S., Hadová E., Knížek K., Maryško M., Veverka P., Pollert E. Lanthanum manganese perovskite nanoparticles as possible in vivo mediators for magnetic hyperthermia. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2006;302(2):315–320. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2005.09.026>
3. Thorat N.D., Khot V.M., Salunkhe A.B., Ningthoujam R.S., Pawar S.H. Functionalization of La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃ nanoparticles with polymer: Studies on enhanced hyperthermia and biocompatibility properties for biomedical applications. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*. 2013;104:40–47. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2012.11.028>
4. Hilger I. In vivo applications of magnetic nanoparticle hyperthermia. *International Journal of Hyperthermia*. 2013;29(8):828–834. Available at: <https://doi.org/10.3109/02656736.2013.832815>
5. He S.L., Zhang H.W., Liu Y.H., Sun F., Yu X., Li X.Y., Zhang L., Wang L.Ch., Mao K.Y., Wang G.Sh., Lin Y.J., Han Zh.Ch., Sabirianov R., Zeng H. Magnetic Nanoparticle Hyperthermia: Maximizing Specific Loss Power for Magnetic Hyperthermia by Hard–Soft Mixed Ferrites. *Small*. 2018;14:29. Available at: <https://doi.org/10.1002/smll.201870133>
6. Etemadi H., Plieger P.G. Magnetic Fluid Hyperthermia Based on Magnetic Nanoparticles: Physical Characteristics, Historical Perspective, Clinical Trials, Technological Challenges, and Recent Advances. *Advances in Therapy*. 2020;200006:11–49. Available at: <https://doi.org/10.1002/adtp.202000061>
7. Brezovich I.A. Low frequency hyperthermia: capacitive and ferromagnetic thermoseed methods. *Medical Physics Monograph*. 1988;16:82–111. Available at: <https://scholar.google.com/scholar?hl=en&q=%0A%0AI.+Brezovich%2C+Med.+Phys.+Monogr.+16%2C+82%E2%80%93111+%281988%29.+>

8. Weinberg I.N., Stepanov P.Y., Fricke S.T., Roland P., Mario U., Daniel W., Howard S., Glidden S.C., Alan M.M., Starewicz P.M., Reilly J.P. Increasing the oscillation frequency of strong magnetic fields above 101 kHz significantly raises peripheral nerve excitation thresholds. *Medical Physics*. 2012;39(5):2578–2583. Available at: <https://doi.org/10.1118/1.3702775>
9. Bruggmoser G., Bauchowitz S., Canters R., Crezee H., Ehmann M., Gellermann J., Lamprecht U., Lomax N., Messmer M.B., Ott O., Abdel-Rahman S., Schmidt M., Sauer R., Thomsen A., Wessalowski R., van Rhooon G.; Atzelsberg Research Group European Society for Hyperthermic Oncology. Guideline for the clinical application, documentation and analysis of clinical studies for regional deep hyperthermia. *Strahlentherapie Onkologie*. 2012;188(suppl. 2):198–211. doi:10.1007/s00066-012-0176-2
10. Dobšiček Trefná H., Schmidt M., van Rhooon G.C., Kok H.P., Gordeyev S.S., Lamprecht U., Marder D., Nadobny J., Ghadjar P., Abdel-Rahman S., Kukielka A.M., Strnad V., Hurwitz M.D., Vujaskovic Z., Diederich C.J., Stauffer P.R., Crezee J. Quality assurance guidelines for interstitial hyperthermia. *International Journal of Hyperthermia*. 2019;36(1):276–293. doi:10.1080/02656736.2018.1564155
11. Dutz S., Hergt R. Magnetic particle hyperthermia - a promising tumour therapy? *Nanotechnology*. 2014;25:452001. doi:10.1088/0957-4484/25/45/452001
12. Borrelli N.F., Luderer A.A., Panzarino J.N. Hysteresis heating for the treatment of tumours. *Physics in Medicine and Biology*. 1984;29(5):487–494. doi:10.1088/0031-9155/29/5/001
13. Gneveckow U., Jordan A., Scholz R. The novel hyperthermia- and thermoablation-system MFH@300F for MFH. *Medical Physics*. 2004;31:6. doi:10.1118/1.1748629
14. Johannsen M., Gneveckow U., Taymoorian K., Thiesen B., Waldöfner N., Scholz R., Jung K., Jordan A., Wust P., Loening S.A. Morbidity and quality of life during thermotherapy using magnetic nanoparticles in locally recurrent prostate cancer: results of a prospective phase I trial. *International Journal of Hyperthermia*. 2007;23(3):315–23. doi:10.1080/02656730601175479. PMID: 17523023
15. Maier-Hauff K., Ulrich F., Nestler D., Niehoff H., Wust P., Thiesen B., Orawa H., Budach V., Jordan A. Efficacy and safety of intratumoral thermotherapy using magnetic iron-oxide nanoparticles combined with external beam radiotherapy on patients with recurrent glioblastoma multiforme. *Journal of Neuro-Oncology*. 2011;103(2):317–324. doi:10.1007/s11060-010-0389-0
16. Pavlov A.M., Gabriel S.A., Sukhorukov G.B., Gould D.J. Improved and targeted delivery of bioactive molecules to cells with magnetic layer-by-layer assembled microcapsules. *Nanoscale*. 2015;7:9686–9693. Available at: <https://doi.org/10.1039/C5NR01261A>
17. Heschem S.A., Chiang P.H., Gregurec D., Moon J., Christiansen M.G., Jahanshahi A., Liu H.J., Rosenfeld D., Pralle A., Anikeeva P., Temel Y. Magnetothermal nanoparticle technology alleviates parkinsonian-like symptoms in mice. *Nature Communications*. 2021;12:5569. Available at: <https://doi.org/10.1038/s41467-021-25837-4>
18. Maeng L.Y., Rosenfeld D., Simandl G.J., Koehler F., Senko A.W., Moon J., Varnavides G., Murillo M.F., Reimer A.E., Wald A., Anikeeva P., Widge A.S. Probing Neuro-Endocrine Interactions Through Wireless Magnetothermal Stimulation of Peripheral Organs. *bioRxiv*. 2021:1–22. Available at: <https://doi.org/10.1101/2021.06.24.449506>
19. Thiesen B., Jordan A. Clinical applications of magnetic nanoparticles for hyperthermia. *International Journal of Hyperthermia*. 2008;24(6):467–474. Available at: <https://doi.org/10.1080/02656730802104757>
20. Pradhan P., Giri J., Samanta G., Sarma H.D., Mishra K.P., Bellare J., Banerjee R., Bahadur D. Comparative evaluation of heating ability and biocompatibility of different ferrite-based magnetic fluids for hyperthermia application. *Journal of Biomedical Materials Research Part B: Applied Biomaterials*. 2007;81(1):12–22. Available at: <https://doi.org/10.1002/jbm.b.30630>
21. Liu J., Zhang J., Wang L., Li Y.T., Zhang D.S., Biocompatibility Study of $Mn_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$ Magnetic Nanoparticles. *Key Engineering Materials*. 2011;483:552–558. Available at: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.483.552>

22. Das R., Alonso J., Porshokouh Z.N., Kalappattil V., Torres D., Phan M.H., Garaio E., Garcia J.A., Llamazares J.L.S., Srikanth H., Tunable High Aspect Ratio Iron Oxide Nanorods for Enhanced Hyperthermia. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2016;120:10086–10093. Available at: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b02006>
23. Elkhova T.M., Yakushechkina A.K., Semisalova A.S., Guñko Y.K., Spichkin Y.I., Pyatakov A.P., Kamilov K.I., Perov N.S., Tishin A.M. Heating of Zn-Substituted Manganese Ferrite Magnetic Nanoparticles in Alternating Magnetic Field. *Solid State Phenomena*. 2015;761:233–234. Available at: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.233-234.761>
24. Price P.M., Mahmoud W.E., Al-Ghamdi A.A., Bronstein L.M. Magnetic Drug Delivery: Where the Field Is Going. *Frontiers in Chemistry*. 2018;6:619. Available at: <https://doi.org/10.3389/fchem.2018.00619>
25. Salakhova R.T., Pyatakov A.P., Zverev V.I., Pimentel B., CaraballoVivas R.J., Makarova L.A., Perov N.S., Tishin A.M., Shtil A.A., Reis M.S. The frequency dependence of magnetic heating for La_{0.75}Sr_{0.25}MnO₃ nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2019;470:38–40. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.11.126>
26. Ferreira M.C., Pimentel B., Andrade V., Zverev V., Gimaev R.R., Pomorov A.S., Pyatakov A., Alekhina Y., Komlev A., Makarova L., Perov N., Reis M.S. Understanding the dependence of nanoparticles magnetothermal properties on their size for hyperthermia applications: A case study for la-sr manganites. *Nanomaterials*. 2021;11.7:1826. Available at: <https://doi.org/10.3390/nano11071826>
27. Verde E.L., Landi G.T., Carrião M.S., Drummond A.L., Gomes J.A., Vieira E.D., Sousa M.H., Bakuzis A.F. Field dependent transition to the non-linear regime in magnetic hyperthermia experiments: Comparison between maghemite, copper, zinc, nickel and cobalt ferrite nanoparticles of similar sizes. *AIP Advances*. 2012;2:032120. Available at: <https://doi.org/10.1063/1.4739533>
28. Lee J.H., Jang J.T., Choi J.S., Moon S.H., Noh S.H., Kim J.W., Kim J.G., Park K.I., Cheon J. Exchange-coupled magnetic nanoparticles for efficient heat induction. *Nature Nanotechnology*. 2011;6(7):418–422. doi:10.1038/nnano.2011.95
29. Ahmad F. Pitfalls and Challenges in Nanotoxicology: A Case of Cobalt Ferrite(CoFe₂O₄) Nanocomposites. *Chemical Research in Toxicology*. 2017;30(2):492–507. Available at: <https://doi.org/10.1021/acs.chemrestox.6b00377>
30. Mmesele O.K., Masunga N., Kuvarega A., Nkambule T.T., Mamba B.B., Kefeni K.K. Cobalt ferrite nanoparticles and nanocomposites: Photocatalytic, antimicrobial activity and toxicity in water treatment. *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2021;123:105523. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2020.105523>
31. Yuan Ch.Y., Tang Q.-Sh., Zhang D.Sh. Biocompatibility of Mn_{0.4}Zn_{0.6}Fe₂O₄ Magnetic Nanoparticles and Their Thermotherapy on VX₂-Carcinoma-Induced Liver Tumors. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. 2015;15:74–84. doi:10.1166/jnn.2015.9150
32. Liu N.N., Pyatakov A.P., Zharkov M.N., Pyataev N.A., Sukhorukov G.B., Alekhina Y.A., Perov N.S., Gun'ko Y.K., Tishin A.M. Optimization of Zn–Mn ferrite nanoparticles for low frequency hyperthermia: Exploiting the potential of superquadratic field dependence of magnetothermal response. *Applied Physics Letters*. 2022;120:1–5. doi:10.1063/5.0082857
33. Liu N. N., Pyatakov A. P., Saletsky A. M., Zharkov M. N., Pyataev N. A., Sukhorukov G. B., Gun'ko Y. K., Tishin A. M. The “field or frequency” dilemma in magnetic hyperthermia: The case of Zn single bond Mn ferrite nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2022;555:1–12. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2022.169379>
34. Lyu N.N., Alekhina Yu.A., Pyatakov A.P., Zharkov M.N., Pyataev N.A., Perov N.S., Sukhorukov G.B., Tishin A.M., Interrelation between magnetic and magnetothermal properties of ZnMn ferrite nanoparticles. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Seriya 3*.

- Fizika. Astronomiya = Bulletin of Moscow University. Series 3. Physics. Astronomy.* 2022;(2). (In Russ.)
35. Kannan Y.B., Saravanan R., Srinivasan N., Praveena K., Sadhana K. Synthesis and characterization of some ferrite nanoparticles prepared by co-precipitation method. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics.* 2016;27:12000–12008. Available at: <https://doi.org/10.1007/s10854-016-5347-y>
 36. Edward T.J. Molecular volumes and the stokes-einstein equation. *Journal of Chemical Education.* 1970;47(4):261–270. Available at: <https://doi.org/10.1021/ed047p261>
 37. Payet B., Vincent D., Delaunay L., Noyel G. Influence of particle size distribution on the initial susceptibility of magnetic fluids in the Brown relaxation range. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* 1998;186:168–174. Available at: [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(98\)00082-1](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(98)00082-1)
 38. Martsenyuk M.A., Raikher Y.L., Shliomis M.I. On the kinetics of magnetization of suspensions of ferromagnetic particles. *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* 1974;65:834–841. Available at: http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/dn/e_038_02_0413.pdf
 39. Iacob N., Schinteie G., Palade P., Ticos C.M., Kuncser V. Stepped heating procedure for experimental SAR evaluation of ferrofluids. *The European Physical Journal E.* 2015;38:57. Available at: <https://doi.org/10.1140/epje/i2015-15057-8>
 40. Périgo E.A., Hemery G., Sandre O., Ortega D., Teran F.J. Fundamentals and advances in magnetic hyperthermia. *Applied Physics Reviews.* 2015;2:041302. Available at: <https://doi.org/10.1063/1.4935688>
 41. Pimentel B., Caraballo-Vivas R.J., Checca N.R., Zverev V.I., Salakhova R.T., Makarova L.A., Pyatakov A.P., Perov N.S., Tishin A.M., Shtil A.A., Possi A.L., Reis M.S. Threshold heating temperature for magnetic hyperthermia: Controlling the heat exchange with the blocking temperature of magnetic nanoparticles. *Journal of Solid State Chemistry.* 2018;260:34–38. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2018.01.001>
 42. Wildeboer R.R., Southern P., Pankhurst Q.A. On the reliable measurement of specific absorption rates and intrinsic loss parameters in magnetic hyperthermia materials. *Journal of Physics D: Applied Physics.* 2014;47:495003. Available at: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/47/49/495003>
 43. Rosensweig R.E. Heating magnetic fluid with alternating magnetic field. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* 2002;252:370–374. Available at: [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(02\)00706-0](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(02)00706-0)
 44. Behdadfar B., Kermanpur A., Sadeghi-Aliabadi H., Mozaffari M.D.P. Synthesis of high intrinsic loss power aqueous ferrofluids of iron oxide nanoparticles by citric acid-assisted hydrothermal-reduction route. *Journal of Solid State Chemistry.* 2012;187:20–26. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2011.12.011>

Информация об авторах / Information about the authors

Нань Нань Лю

аспирант, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова (Россия, г. Москва, Ленинские горы, 1)

E-mail: nannan.liu@irlc.msu.ru

Nan Nan Liu

Postgraduate student, Lomonosov Moscow State University (1 Leninskiye Gory street, Moscow, Russia)

Александр Павлович Пятаков

доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики колебаний, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова (Россия, г. Москва, Ленинские горы, 1)

E-mail: pyatakov@physics.msu.ru

Aleksandr P. Pyatakov

Doctor of physical and mathematical sciences, professor of the sub-department of physics of oscillations, Lomonosov Moscow State University (1 Leninskiye Gory street, Moscow, Russia)

Николай Анатольевич Пятаев

доктор медицинских наук, доцент,
заведующий кафедрой анестезиологии
и реаниматологии с курсами валеологии,
безопасности жизнедеятельности
и медицины катастроф, Национальный
исследовательский Мордовский
государственный университет имени
Н. П. Огарева (Россия, г. Саранск,
ул. Большевикская, 68)

E-mail: pyataevna@mail.ru

Nikolay A. Pyataev

Doctor of medical sciences, associate
professor, head of the sub-department
of anesthesiology and resuscitation
with courses in valeology, life safety
and disaster medicine, Orgarev Mordovia
State University (68 Bolshevistskaya
street, Saransk, Russia)

Глеб Борисович Сухоруков

доктор физико-математических наук,
профессор, Сколковский институт науки
и технологий (Россия, г. Москва,
Большой бульвар, 30); Лондонский
университет королевы Марии
(E1 4NS Лондон, Майл Энд Роуд)

E-mail: g.sukhorukov@qmul.ac.uk

Gleb B. Sukhorukov

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, Skolkovo Institute
of Science and Technology (30 Bolshoy
boulevard, Moscow, Russia);
Queen Mary University of London
(Mile End Road London E1 4NS)

Александр Метталинович Тишин

доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры общей
физики и физики конденсированного
состояния, Московский государственный
университет имени М. В. Ломоносова
(Россия, г. Москва, Ленинские горы, 1)

E-mail: tishin@amtc.org

Aleksandr M. Tishin

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, professor
of the sub-department of general
physics and condensed state physics,
Lomonosov Moscow State University
(1 Leninskiye Gory street, Moscow, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 05.06.2022

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 16.06.2022

Принята к публикации / Accepted 07.07.2022

УДК 530.182, 51-71, 51-72
doi:10.21685/2072-3040-2022-2-6

Нелинейные функциональные подстановки и преобразования для нелинейных диффузионных и волновых уравнений

В. М. Журавлев¹, В. М. Морозов²

^{1,2}Самарский национальный исследовательский университет, Самара, Россия

¹Ульяновский государственный университет, Ульяновск, Россия

¹zhvictorm@gmail.com, ²aieler@rambler.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Рассматривается задача построения точных решений нелинейных уравнений волнового и диффузионного типа с помощью метода нелинейных функциональных подстановок. *Материалы и методы.* Основным методом, который используется в работе, является метод нелинейных функциональных подстановок, который является развитием метода функциональных подстановок, примененного ранее для построения решений уравнений типа Бюргера. Метод нелинейных функциональных подстановок применим к более широкому кругу задач, в том числе к нелинейным волновым уравнениям и нелинейным уравнениям параболического типа. *Результаты.* Развита общая схема метода и приведены конкретные примеры его применения к вычислению преобразований Бэклунда, а также построения точных решений для широкого круга уравнений нелинейной диффузии. Найдены новые точные решения уравнений диффузионного типа и указана методология применения метода на практике. *Выводы.* Разработанный подход демонстрирует свою универсальность и эффективность для решения и анализа нелинейных задач в волновой динамике и разнообразных диффузионных процессах.

Ключевые слова: метод функциональных подстановок, точные решения нелинейных волновых и диффузионных уравнений, нелинейные диффузионные процессы и модели

Финансирование: работа выполнена в рамках проекта FSSS-2020-0018, финансируемого из средств государственного задания победителям конкурса научных лабораторий образовательных организаций высшего образования, подведомственных Минобрнауки России, а также при поддержке фонда РФФИ, проект: 20-02-00280.

Для цитирования: Журавлев В. М., Морозов В. М. Нелинейные функциональные подстановки и преобразования для нелинейных диффузионных и волновых уравнений // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2022. № 2. С. 81–98. doi:10.21685/2072-3040-2022-2-6

Nonlinear functional substitutions and transformations for nonlinear diffusion and wave equations

V.M. Zhuravlev¹, V.M. Morozov²

^{1,2}Samara National Research University, Samara, Russia

¹Ulyanovsk State University, Ulyanovsk, Russia

¹zhvictorm@gmail.com, ²aieler@rambler.ru

Abstract. *Background.* The research considers the problem of constructing exact solutions of nonlinear wave equations and diffusion type using the method of nonlinear functional substitutions. *Materials and methods.* The main method used in the work is the method of

non-linear functional substitutions, which is a development of the method of functional substitutions, which was previously used to construct solutions to Burgers-type equations. The method of non-linear functional substitutions is applicable to a wider range of problems, including non-linear wave equations and non-linear equations of parabolic type. *Results.* The study develops the general scheme of the method and gives specific examples of its application to the calculation of the Bäcklund transformations, as well as the construction of exact solutions for a wide range of nonlinear diffusion equations. New exact solutions of equations of the diffusion type are found and the methodology for applying the method in practice is indicated. *Conclusions.* The developed approach demonstrates its versatility and efficiency for solving and analyzing nonlinear problems in wave dynamics and various diffusion processes.

Keywords: Functional substitution method, exact solutions of nonlinear wave and diffusion equations, nonlinear diffusion processes and models

For citation: Zhuravlev V.M., Morozov V.M. Nonlinear functional substitutions and transformations for nonlinear diffusion and wave equations. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2022;(2):81–98. (In Russ.). doi:10.21685/2072-3040-2022-2-6

Введение

Метод функциональных подстановок (МФП), развитый в работах [1–4], оказался полезным для построения точных решений целого ряда нелинейных моделей различных физических процессов. Этот факт вместе с изложением самого метода с примерами обсуждается достаточно подробно в монографии [5]. Основой МФП является возможность превращать линейные уравнения в частных производных с помощью набора простых линейных соотношений, которые называются базовыми, в нелинейные уравнения относительно некоторых вспомогательных функций. В результате такой процедуры можно строить точные решения нелинейных уравнений, исходя из решений линейных. При реализации МФП на практике можно исходить из линейных уравнений достаточно общего вида, но при этом множество получающихся нелинейных уравнений в большинстве своем не встречается в реальных прикладных задачах. Для множества же интересных с точки зрения практики задач МФП не применим. Однако этот метод может быть расширен включением в его рамки не только линейных базовых соотношений, но и нелинейных по своей сути. Такой подход, например, оказался пригодным для вычисления новых уравнений, которые обладают представлением Лакса [6]. Однако его возможности могут быть распространены на гораздо более широкий класс уравнений, включая диффузионные уравнения.

В настоящей работе предлагается расширение МФП, которое включает нелинейные базовые соотношения, более общие, чем те, которые рассматривались в [6]. Это позволяет получить новые способы построения точных решений уравнений или хотя бы понизить их порядок, сведя задачу к решению дифференциальных уравнений первого порядка. Такой подход можно назвать методом нелинейных функциональных подстановок (методом НФП). Целью данной работы является изложение общей идеологии метода НФП и применение его к некоторым задачам нелинейной волновой динамики, а также к решению ряда общих и частных задач теории нелинейных диффузионных процессов.

1. Общая идеология метода нелинейных функциональных подстановок

Рассмотрим нелинейные уравнения следующего общего вида:

$$F(T, T_x, T_t, T_{xx}, T_{xt}, T_{tt}, \dots, x, t) = 0. \quad (1)$$

Будем искать решение всех таких уравнений, полагая, что в случае, если $T(x, t)$ удовлетворяет исходному уравнению (1), существуют такие две функции $u(T, x, t)$ и $v(T, x, t)$, для которых выполняются соотношения:

$$T_x = u(T, x, t), \quad T_t = v(T, x, t). \quad (2)$$

Эти соотношения будем называть **нелинейными базовыми соотношениями**. Условие совместности соотношений (2) можно записать в таком виде:

$$u_t + vu_T = v_x + uv_T. \quad (3)$$

Подставляя (2) в исходное уравнение (1), получаем его представление в виде уравнения относительно u и v :

$$F(T, u, v, u_x + uu_T, v_t + vv_T, u_t + vu_T, \dots, x, t) = 0, \quad (4)$$

как функций трех переменных x, t, T .

По построению совокупность уравнений (3) и (4) эквивалентна исходному уравнению.

Задача построения решений систем уравнений (3) и (4) в общем случае оказывается не менее сложной, чем задача отыскания решений исходного уравнения (1). Однако за счет зависимости функций $u(T, x, t)$ и $v(T, x, t)$ от T повышается координатная размерность исходной задачи. В новом координатном пространстве почти каждому решению исходного уравнения соответствует определенная зависимость $u(T, x, t)$ и $v(T, x, t)$ от T . Поэтому, задавая такую зависимость определенным образом, можно получать частные решения исходных уравнений, сводя процедуру отыскания решений к интегрированию системы базовых соотношений (3).

Эта общая процедура имеет множество разновидностей, которые определяются типом зависимости $u(T, x, t)$ и $v(T, x, t)$ от T . Например, в качестве такого выбора можно использовать полиномиальные подстановки общего вида:

$$u(T, x, t) = \sum_{k=0}^M U_k(x, t) T^k, \quad v(T, x, t) = \sum_{k=0}^M V_k(x, t) T^k. \quad (5)$$

В этом случае подстановка соотношений (5) в (3) и (4) часто приводит к совокупности уравнений для функций $U_k(x, t)$, $V_k(x, t)$, интегрирование которых оказывается простым. В других ситуациях совокупность уравнений для $U_k(x, t)$, $V_k(x, t)$ представляет замкнутую систему новых нелинейных уравнений. Это означает, что получено одно из преобразований Бэклунда исходного уравнения относительно T в новые уравнения относительно

$U_k(x, t), V_k(x, t)$. Важным является то, что выбор функциональной формы $u(T, x, t)$ и $v(T, x, t)$ изначально не ограничен, что позволяет применять его и к волновым, и диффузионным уравнениям.

2. Преобразования Бэклунда для уравнений Клейна – Гордона

Если сравнить (2) с классическими преобразованиями Бэклунда [7–9], то можно увидеть, что они в действительности представляют собой частную форму таких соотношений. Поэтому для демонстрации работоспособности данного метода рассмотрим два примера, которые касаются уравнений Клейна – Гордона

$$T_{xt} = F(T) \quad (6)$$

для двух вариантов выбора функции $F(T)$. Это хорошо известные уравнения Sin – Gordon ($F = a \sin(2T)$) и Лиувилля ($F = ae^{2T}$). Покажем, что метод НФП позволяет вычислить преобразования Бэклунда для указанных типов волновых уравнений в обобщенном виде в несколько более общем виде, чем, например, в [9].

2.1. Уравнение Sin – Gordon

Рассмотрим уравнение Sin – Gordon в следующей форме:

$$T_{tt} - T_{xx} = a \sin(T) \cos(T). \quad (7)$$

Используя подстановки (2), преобразуем уравнение (7) относительно вспомогательной функции $T(x, t)$ к уравнению относительно функций $u(x, t)$ и $v(x, t)$. В результате находим:

$$v_t + vv_T - u_x - uu_T = a \sin(T) \cos(T). \quad (8)$$

Будем искать решение этого уравнения и уравнения совместности (3) в следующей форме:

$$u = U_0(x, t) + U_1(x, t) \sin(T) + U_2(x, t) \cos(T),$$

$$v = V_0(x, t) + V_1(x, t) \sin(T) + V_2(x, t) \cos(T).$$

Подставляя эти соотношения в уравнения (8) и (3) и приравнивая нулю коэффициенты при $\sin(T)$ и $\cos(T)$, приходим к системе из семи уравнений относительно шести функций $U_i, V_i, i = 0, 1, 2$:

$$V_{1,t} - U_{1,x} + U_0 U_2 - V_0 V_2 = 0, \quad V_{2,t} - U_{2,x} + V_0 V_1 - U_0 U_1 = 0,$$

$$U_{1,t} - V_{1,x} + V_2 U_0 - U_2 V_0 = 0, \quad U_{2,t} - V_{2,x} + V_0 U_1 - U_0 V_1 = 0,$$

$$U_{0,t} - V_{0,x} + V_2 U_1 - U_2 V_1 = 0, \quad V_{0,t} - U_{0,x} + U_2 U_1 - V_2 V_1 = 0,$$

$$U_2^2 - U_1^2 + V_1^2 - V_2^2 - 2a = 0.$$

Эта система имеет, по крайней мере, одно решение:

$$\begin{aligned} U_0 &= \phi_t, \quad U_1 = A \cos(\phi(x,t)), \quad U_2 = Ap_0 \sin(\phi(x,t)), \\ V_0 &= \phi_x, \quad V_1 = Ap_0 \cos(\phi(x,t)), \quad V_2 = A \sin(\phi(x,t)). \end{aligned}$$

При этом уравнение совместности преобразуется в уравнение для функции $\phi(x,t)$:

$$\phi_{tt} - \phi_{xx} = 2a \sin(\phi(x,t)) \cos(\phi(x,t)), \quad (9)$$

здесь p_0 – произвольный параметр;

$$A = \sqrt{2} \sqrt{\frac{a}{p_0^2 - 1}}.$$

Функции $u(x,t,T)$ и $v(x,t,T)$ принимают следующий вид:

$$u = \phi_t + \sqrt{2} \sqrt{\frac{a}{p_0^2 - 1}} (\cos(\phi(x,t)) \sin(T) + p_0 \sin(\phi(x,t)) \cos(T)), \quad (10)$$

$$v = \phi_x + \sqrt{2} \sqrt{\frac{a}{p_0^2 - 1}} (p_0 \cos(\phi(x,t)) \sin(T) + \sin(\phi(x,t)) \cos(T)). \quad (11)$$

Соотношения, связывающие функции $\phi(x,t)$ и $T(x,t)$, которые удовлетворяют одному и тому же уравнению Sin – Gordon:

$$T_x = \phi_t + \sqrt{2} \sqrt{\frac{a}{p_0^2 - 1}} (\cos(\phi(x,t)) \sin(T) + p_0 \sin(\phi(x,t)) \cos(T)),$$

$$T_t = \phi_x + \sqrt{2} \sqrt{\frac{a}{p_0^2 - 1}} (p_0 \cos(\phi(x,t)) \sin(T) + \sin(\phi(x,t)) \cos(T)),$$

представляют собой преобразования Бэклунда уравнения Sin – Gordon. Отличием полученного здесь преобразования от классического [9] является наличие в соотношениях (11) дополнительного параметра p_0 , что обобщает указанный известный результат.

2.2. Уравнение Лиувилля

Вторым примером служит уравнение Лиувилля, записанное в следующем виде:

$$T_{xt} = ae^{2T}, \quad (12)$$

здесь a – некоторая вещественная постоянная.

В общем случае для уравнений Клейна – Гордона (6) функция $v(T, x, t)$ должна иметь вид

$$v = \frac{1}{u_T} (F(T) - u_t). \quad (13)$$

В этом случае уравнение совместности (3) будет уравнением относительно одной функции $u(T, x, t)$. Если найдено некоторое решение этого уравнения для заданной функции $F(T)$, то, интегрируя базовые соотношения, можно найти решение для $T(x, t)$.

Для уравнения Лиувилля функцию $u(T, x, t)$ следует искать в такой форме:

$$u = U_0(x, t) + U_1(x, t)e^T + U_2(x, t)e^{-T}. \quad (14)$$

При этом функция $v(T, x, t)$ может быть также представлена в аналогичной форме:

$$v = V_0(x, t) + V_1(x, t)e^T + V_2(x, t)e^{-T}.$$

Подставляя эти соотношения в (3) и (13), приходим к следующим соотношениям для выбора коэффициентов $U_i, V_i, i = 0, 1, 2$:

$$V_0 = \theta_x(x, t), \quad V_1 = e^{\theta(x, t)}, \quad V_2 = 0; \quad U_0 = -\theta_x, \quad U_1 = ae^{-\theta(x, t)}.$$

Если выбрать коэффициент $U_2(x, t)$ в такой форме:

$$U_2 = ce^{\theta(x, t)},$$

где c – произвольная постоянная, отличная от нуля, то функция $\theta(x, t)$ будет удовлетворять исходному уравнению Лиувилля:

$$\theta_{xt} = ae^{2\theta}.$$

Соответствующие этой подстановке базовые соотношения (3) выглядят следующим образом:

$$T_x = -\theta_x + ae^{-\theta+T} - ce^{-T+\theta}, \quad T_t = \theta_t + e^{T+\theta}.$$

Этот вариант соответствует классическому преобразованию Бэклунда для уравнения Лиувилля с дополнительным произвольным параметром c [9].

Если функцию $U_2(x, t)$ выбрать в таком виде:

$$U_2 = ae^{-\theta}\theta_{xt},$$

то функция $\theta(x, t)$ будет удовлетворять уравнению

$$2\theta_t\theta_{xt} - \theta_{xtt} = 0,$$

которое интегрированием по x и с помощью замены $\theta = -\ln(\chi(x, t))$ сводится к уравнению

$$\chi_{tt} = p(t)\chi,$$

где $p(t)$ – произвольная интегрируемая функция одной переменной t . Для этого выбора функции $U_2(x, t)$ имеем

$$T_x = -\theta_x + ae^{-\theta+T} - e^{-T-\theta}\theta_{x,t}, \quad T_t = \theta_t + e^{T+\theta}.$$

3. Нелинейные диффузионные уравнения общего вида

Общим классом моделей в теории диффузионных процессов, включая процессы с обострением [10–12] и процессы формирования регулярных структур в среде [13], являются модели, основанные на уравнениях:

$$T_t - \frac{\partial}{\partial x}(D(T)T_x) + J(T_x, T) = 0. \quad (15)$$

Применение метода НФП для уравнений этого типа позволяет строить некоторое множество точных решений, которые, хотя и образуют ограниченные классы, тем не менее дают возможность представить общие свойства эволюции возмущений в таких средах. Метод НФП варьируется по виду базовых соотношений от задачи к задаче. Поэтому здесь будут приведены несколько примеров, позволяющих получать частные точные решения для ряда уравнений с конкретными нелинейными коэффициентами диффузии и нелинейными источниками.

В качестве первого примера рассмотрим уравнения общего вида (15), решения которых удовлетворяют следующим базовым соотношениям:

$$T_x = g(x, t)U(T) = u(T, x, t), \quad T_t = f(x, t)V(T) + W(T) = v(T, x, t). \quad (16)$$

Подставляя эти соотношения в уравнение (15), находим:

$$f(x, t)V(T) + W(T) = g_x(x, t)R(T) + g^2(x, t)R'(T)U(T) + J(T). \quad (17)$$

Здесь введено обозначение: $R = D(T)U(T)$. Уравнение совместности (3) в данном случае примет вид

$$g_t(x, t)U(T) - f_x(x, t)V(T) + f(x, t)g(x, t)[U, V] + g[U, W] = 0. \quad (18)$$

Для сокращения записи введено обозначение

$$[U, V] = U'(T)V(T) - U(T)V'(T).$$

В уравнениях (17) и (18) для построения решений необходимо провести разделение переменных. Рассмотрим два варианта разделения переменных, которые приводят к различным классам решений для уравнений (15).

3.1. Класс решений I

Первый класс решений соответствует выбору функций $g(x, t)$ и $f(x, t)$ в следующей форме: $g = g(x)$, $f = f(x)$, с условиями:

$$g_x = \lambda + \mu g^2, \quad f = \beta + \alpha g^2. \quad (19)$$

В этом случае из (17) следуют соотношения:

$$\mu R + R'U = \alpha V, \quad J + \lambda R = \beta V. \quad (20)$$

Из уравнения совместности находим следующие дополнительные условия:

$$\gamma V = [U, V], \quad [U, W] = 0, \quad \lambda = \gamma\beta / (2\alpha), \quad \mu = \gamma / 2. \quad (21)$$

Система уравнений для R , J , U и V состоит из трех уравнений, при этом одна функция остается произвольной, что позволяет, задавая одну из функций, получать точные решения множества уравнений общего вида (15). В качестве произвольной функции удобно задавать в данном варианте функцию $V(T)$. В этом случае функцию $U(T)$ можно представить в виде

$$U = V(T)P(T).$$

Из условий (21) находим:

$$P(T) = \gamma \int \frac{dT}{V(T)}, \quad W = \sigma U, \quad (22)$$

где σ – произвольная вещественная постоянная. В результате уравнение для R примет вид

$$R' + \frac{\mu}{VP} R = \frac{\alpha}{P},$$

отсюда получаем

$$R = D(T)U(T) = C(T)e^{-\Theta(T)}, \quad \Theta(T) = \int \frac{dT}{V(T)P(T)}.$$

Для функции $C(T)$ получаем следующее соотношение:

$$C(T) = C_0 + \alpha \int \frac{e^{\Theta(T)} dT}{P(T)}.$$

Для $J(T)$ получаем:

$$J(T) = \beta V - \lambda R + W = \beta V(T) - \lambda \left(C_0 + \alpha \int \frac{e^{\Theta(T)} dT}{P(T)} \right) e^{-\Theta(T)} + \sigma U(T).$$

Уравнение (19) относительно функции g интегрируется с помощью замены:

$$g = -\frac{1}{\mu} \frac{\partial \ln \chi}{\partial x}. \quad (23)$$

Функция $\chi(x)$ при этом удовлетворяет уравнению:

$$\chi'' + k^2 \chi = 0, \quad (24)$$

где $k^2 = \gamma^2 \beta / (4\alpha)$. Это уравнение может иметь как периодические тригонометрические решения при $k^2 > 0$, так и гиперболические $k^2 < 0$. Отсюда следует, что для всех типов уравнений с заданным $V(T)$ могут существовать пространственно периодические решения, указывающие на формирование регулярных структур в средах с нелинейной диффузией и нелинейным источником общего вида.

Непосредственно решение для функции T , играющей роль концентрации, должно находиться из уравнений:

$$T_x = g(x)V(T)P(T), \quad T_t = f(x)V(T).$$

При условии (22) и выполнении уравнений (19) эти уравнения совместны. Интегрируя первое уравнение, находим:

$$\int \frac{dT}{VP} = \Theta(T) = \int g(x)dx + \xi(t) = \zeta(x,t).$$

Из этого соотношения следует, что общий вид функции T следующий:

$$T = H(\zeta(x,t)), \quad (25)$$

где функция $H(\zeta)$ является обратной к функции $\Theta(T)$. Для того чтобы это решение было также решением второго базового уравнения, достаточно подобрать подходящим образом только функцию $\xi(t)$. Подстановка (25) во второе базовое соотношение приводит к соотношению для $\xi(t)$ следующего вида:

$$\dot{\xi} = \frac{1}{H'(\zeta)} (f(x)V(H(\zeta)) + \sigma U(H(\zeta))).$$

Правая часть этого соотношения по построению должна представлять собой либо некоторую функцию времени, либо постоянную, которые зависят от выбора функций $V(T)$ и $F(U)$.

Как следует из (25), полученные решения для произвольного выбора $V(T)$ и $F(U)$ приводят к автомодельным решениям с автомодельной переменной $\zeta(x,t)$, которая в случае периодических решений для $\chi = a \cos(kx + \phi_0)$ имеет вид

$$\zeta = -\frac{2}{\gamma} \ln(\cos(kx + \phi_0)) + \xi(t).$$

Хотя эта переменная и имеет периодически расположенные сингулярности, тем не менее само решение для $T(x,t)$ может быть несингулярным. Такие случаи интересны с точки зрения отыскания моделей, описывающих возникновение периодических структур в диффузионной среде.

В качестве частного примера рассмотрим случай $V(T) = T^{-m}$, где m – некоторое число, отличное от -1 : $m \neq -1$. В результате имеем:

$$P = \gamma \int \frac{dT}{V} = \frac{\gamma}{m+1} (T^{m+1} + P_0),$$

соответственно получаем:

$$U = V(T)P(T) = \frac{\gamma}{m+1} (T + P_0 T^{-m}),$$

$$\Theta = \mu \int \frac{dT}{VP} = \frac{\mu(m+1)}{\gamma} \int \frac{dT}{T + P_0 T^{-m}} = \frac{\mu}{\gamma} \ln(T^{m+1} + P_0),$$

$$D = \frac{(m+1)^{3/2}}{\gamma^2} T^m (T^{m+1} + P_0)^{-3/2} (C_0 \gamma + \alpha(m+1)^{1/2} \int (T^{m+1} + P_0)^{-1/2} dT).$$

Полагая $P_0 = C_0 = 0$, получаем коэффициент диффузии и источник со степенной зависимостью от T следующего вида:

$$D = -\frac{2\alpha(m+1)^2}{\gamma^2(m-1)} T^{-m-1}, \quad J = -\frac{2\beta m}{m-1} T^{-m} + \sigma \frac{\gamma}{m+1} T.$$

3.2. Класс решений II

Второй класс решений получается с помощью выбора следующих соотношений для функций g и f : $g = g(t)$, $f = f(t)$. Соответствующие уравнения для этих функций будут иметь вид

$$\dot{g} = -\gamma g (\alpha g^2 + \beta), \quad f = \beta + \alpha g^2. \quad (26)$$

Условия разделения переменных теперь приводят к следующим соотношениям:

$$R'U = \alpha V, \quad J = W + \beta V, \quad [U, V] = -\gamma U, \quad [U, W] = 0.$$

Теперь в качестве произвольной функции удобно выбрать $U(T)$. Интегрируя последнюю систему уравнений, находим:

$$V = U(T)Q(T), \quad Q = \gamma \int \frac{dT}{U(T)}, \quad W = F(U),$$

$$D = \frac{\alpha}{U} \int Q(T) dT, \quad J = \beta U(T)Q(T) + \sigma U(T).$$

Как и в предыдущем случае, решение для T находится из системы:

$$T_x = g(t)U(T), \quad T_t = (\beta + \alpha g^2(t))U(T)Q(T) + \sigma U(T).$$

Из первого уравнения находим, что в общем случае решения для T можно записать в автомодельном виде:

$$T = G(\zeta), \quad \zeta = g(t)x + \xi(t). \quad (27)$$

Функция $\xi(t)$ в этом случае должна вычисляться, исходя из подстановки (27) во второе базовое соотношение, которое принимает для $\xi(t)$ следующий вид:

$$\dot{\xi} = (\beta + \alpha g^2(t)) \frac{V(G(\xi))}{G'(\xi)} - \dot{g}x.$$

Как следует из (27), решения этого типа представляют собой также автомодельные решения с автомодельной переменной ζ . Эти решения теперь могут представлять собой осциллирующие по времени решения в зависимости от выбора параметров уравнения (26). Для данного варианта можно также получить частные решения при конкретном выборе $V(T)$, как это было сделано в предыдущем разделе.

В конце данного раздела заметим, что вид базовых соотношений (16) может быть расширен, что позволяет рассматривать и другие типы решений уравнений типа (15). Здесь приведены самые простые типы представлений для $u(T, x, t)$ и $v(T, x, t)$. Для более конкретных задач данный подход может дать частные решения более сложного вида, связанные с более сложной зависимостью $u(T, x, t)$ и $v(T, x, t)$ от T .

4. Некоторые другие примеры диффузионных уравнений

4.1. Линейный по T коэффициент диффузии

Следующий пример связан с диффузионным уравнением:

$$T_t = \beta T_{xx} T + kT, \quad (28)$$

который является частным случаем уравнений (15). В качестве нелинейной подстановки для него рассмотрим следующее соотношение:

$$u(T, x, t) = \phi(x, t) \ln(T) + \psi(x, t).$$

Исходное уравнение в результате такой подстановки превращается в следующее соотношение:

$$v(T, x, t) = \beta(\phi_x T \ln T + \psi_x T + \phi(\phi \ln T + \psi)) + kT.$$

Подставляя это соотношение в условие совместности, приходим к ограничениям для функций ϕ и ψ , имеющих следующий вид:

$$\phi = p(t), \quad \psi = r(t)x + n(t). \quad (29)$$

Функции $c(t)$, $b(t)$, $q(t)$ при этом должны удовлетворять следующим уравнениям:

$$\frac{dr}{dt} - \beta r^2 - kr = 0, \quad \frac{dp}{dt} - \beta rp - kp = 0, \quad \frac{dn}{dt} - (k + \beta r)n + kp = 0,$$

общее решение которых можно записать так:

$$r = k(C_1 k e^{-kt} - \beta)^{-1}, \quad p = C_2(C_1 k e^{-kt} - \beta)^{-1}, \quad n = (C_3 - C_2 k t)(C_1 k e^{-kt} - \beta)^{-1}.$$

В результате уравнения (2) примут вид

$$T_x = p(t) \ln T + r(t)x + n(t), \quad (30)$$

$$T_t = \beta p(t) (p(t) \ln T + (r(t)x + n(t))) + T(\beta r(t) + k). \quad (31)$$

Эта система первого порядка совместна по построению, но не интегрируется точно. Поэтому для построения ее решения приходится прибегать к численному решению одного из уравнений системы (30)–(31).

Следует особо подчеркнуть, что приведенный пример демонстрирует специфическую возможность метода НФП получать решения в виде упрощенных уравнений первого порядка, которые в определенном смысле можно рассматривать как обыкновенные дифференциальные уравнения. Такой способ представления решений можно назвать **полуточным**.

Заметим, что исходное уравнение можно представить с помощью замены $n = \ln T$ в виде уравнения диффузии

$$n_t = \beta \frac{\partial}{\partial x} (e^n n_x) + k$$

с коэффициентом диффузии $D(n) = e^n$ и постоянным внешним источником с интенсивностью $J = k$. Такое представление интересно для моделей диффузии дефектов в задачах с рождением дефектов от внешнего источника излучения.

4.2. Уравнение быстрой диффузии. Автоволны

Уравнение быстрой диффузии встречается в целом ряде направлений исследований [14, 15], одним из которых является задача образования когерентных структур в средах с нелинейной диффузией. Под уравнением быстрой диффузии в самом общем виде можно понимать диффузионные уравнения с нелинейной зависимостью коэффициента диффузии вида $D(T) = D_0(T + T_0)^{-1}$.

Рассмотрим уравнение общего вида:

$$(T_t + CT_x + QT)(T_x + KT) = (T_{xx} + PT_x + ST_t + RT)T. \quad (32)$$

Это уравнение при определенном подборе коэффициентов $C(x, t)$, $Q(x, t)$, $K(x, t)$, $P(x, t)$, $S(x, t)$, $R(x, t)$ сводится к уравнению быстрой диффузии. С помощью базовых соотношений это уравнение приводится к следующему виду:

$$T(u_x + uu_T) - uv - Cu^2 - MuT - ZT^2 - HvT = 0, \quad (33)$$

где

$$M = Q(x, t) - C(x, t)K(x, t) - P(x, t),$$

$$Z = K(x,t)Q(x,t) - R(x,t), \quad H = K(x,t) - S(x,t).$$

Будем искать решение уравнения (33) и уравнения совместности базовых соотношений в виде

$$u = U_1(x,t)T + U_N(x,t)T^N, \quad v = V_1(x,t)T + V_N(x,t)T^N, \quad (34)$$

здесь N – некоторый, вообще говоря, вещественный параметр.

Коэффициенты представления (34) запишем следующим образом:

$$U_1 = \phi_x, \quad V_1 = \phi_t, \quad U_N = e^\theta, \quad V_N = (N - C)e^\theta.$$

После подстановки этих соотношений в уравнения получаем систему уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi - (N - C) \frac{\partial}{\partial x} \Psi + C_x = 0, \quad \Psi = \theta + (N - 1)\phi,$$

$$M = -(N - C)H - \phi_t - (C - 1)\phi_x + \theta_x,$$

$$Z = \phi_{xx} - H(\phi_t - (N - C)\phi_x) - \phi_x \theta_x.$$

Разрешая уравнение $T_x = u(x, t, T)$ относительно T , находим:

$$T = e^\phi \left[(1 - N) \left(\int e^\Psi dx + c_0 \right) \right]^{1/(1-N)}, \quad (35)$$

где c_0 – произвольная постоянная.

Для перехода к уравнению быстрой диффузии введем функцию $n(x, t)$:

$$n = \frac{T_x}{T} + w - \phi_x,$$

где $w = H(x, t) + \phi_x$.

В результате находим, что функция $n(x, t)$

$$n = \frac{1}{1 - N} \frac{\partial}{\partial x} \ln \left(\int e^{\Psi(x,t)} dx + c_0 \right) + w(x, t) \quad (36)$$

удовлетворяет уравнению:

$$\begin{aligned} n_t &= \frac{\partial^2 \ln n}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - C)n + (C + N - 2)w \right] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{w\Psi_x - (N - 1)w^2 - w_x}{n} \right] + w_t - \Psi_{xx}. \end{aligned} \quad (37)$$

Рассмотрим случай, когда $C = \text{const}$:

$$\Psi = \Psi(x + pt), \quad p = (N - C),$$

$$n = \frac{1}{1-N} \frac{\partial}{\partial x} \ln \left(\int e^{\Psi(x+pt)} dx + c_0 \right) + w(x,t). \quad (38)$$

Кроме этого, потребуем равенства нулю слагаемых в правой части (37), что эквивалентно следующим дополнительным уравнениям:

$$w_t + qw_x - \Psi_{xx} = 0, \quad w\Psi_x - (N-1)w^2 - w_x = 0, \quad q = C + N - 2. \quad (39)$$

Из первого уравнения этой системы находим:

$$w = \eta_x, \quad q\eta_x - \Psi_x = -\eta_t,$$

откуда получаем

$$\eta = f(x-qt) + \frac{1}{2(N-1)} \Psi(x+pt).$$

Решения второго уравнения системы (39) можно записать так:

$$f = \frac{1}{N-1} \ln \sigma(x-qt), \quad \Psi = -2 \ln \varepsilon(x+pt).$$

Это позволяет вычислить функции σ и ε :

$$\sigma(Z) = \sigma_{01} e^{\sqrt{(N-1)\lambda}Z} + \sigma_{02} e^{-\sqrt{(N-1)\lambda}Z},$$

$$\varepsilon(Z) = \varepsilon_{01} e^{\sqrt{(N-1)\lambda}Z} + \varepsilon_{02} e^{-\sqrt{(N-1)\lambda}Z}.$$

Редукции (39) приводят решение для n к следующему виду:

$$n = \frac{1}{1-N} \frac{\partial}{\partial x} \ln \left(\int \frac{dx}{\varepsilon^2(x+pt)} + c_0 \right) + f'(x-qt) + \frac{1}{2(N-1)} \Psi'(x+pt). \quad (40)$$

Полученное решение описывает две бегущие волны, распространяющиеся с различными скоростями p и q . При этом уравнение

$$n_t = \frac{\partial^2 \ln n}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} [(1-C)n], \quad (41)$$

которому удовлетворяет полученное решение, не содержит в правой части источника. Последнее означает, что процесс, соответствующий (41), представляет собой автоволны, для существования которых не требуется внешнего источника, хотя среда, в которой распространяются волны, является диффузионной, т.е. по классическому определению – диссипативной. Отметим также, что последнее уравнение представляет собой классическое уравнение быстрой диффузии [14, 15], а полученные решения – новым классом решений этого уравнения.

4.3. Уравнение быстрой диффузии. Формирование структуры

Еще одним примером уравнения с коэффициентом диффузии $D = 1/n$ является уравнение следующего вида:

$$T_t = T^{-1}(T_{xx} + rT_x) + kT + p, \quad (42)$$

где k, p, r – постоянные. Используя нелинейные подстановки (2), находим выражение для функции $v(T, x, t)$:

$$v = (u_x + uu_T + ru) / T + kT + p. \quad (43)$$

Будем искать решение уравнения совместности для функции $u(T, x, t)$ в виде расширенной линейной подстановки:

$$u(T, x, t) = A(x, t) + B(x, t)T.$$

В результате уравнение совместности сведется к уравнению для функции $B = B(x)$ третьего порядка:

$$B''' + (r + B')B'' - r(B')^2 - (B')^3 - pB' + gke^{-B(x)-rx} = 0.$$

Функция $A(x, t)$ в этом случае будет иметь такой вид:

$$A = (A_0 e^{kt} + g) e^{-B(x)-rx},$$

здесь A_0 и g – произвольные постоянные. Решение исходного нелинейного уравнения в этом случае будет иметь вид

$$T(x, t) = e^{kt} Z(x) - \frac{1}{k} (B'' + (B')^2 + rB' + p), \quad (44)$$

где функция $Z(x)$ связана с $B(x)$ соотношением:

$$Z(x) = (C_1 + C_2 \int e^{-rx-2B(x)} dx) e^{B(x)},$$

здесь C_1 и C_2 – постоянные интегрирования. В частности, данное решение демонстрирует в случае $k < 0$ возникновение статической структуры в распределении элементов среды при $t \rightarrow \infty$. Возникающая статическая структура описывается функцией

$$T(x, \infty) = -\frac{1}{k} (B'' + (B')^2 + rB' + p).$$

Заметим, что исходное уравнение можно представить двумя другими способами. Первый сводится к простой модификации первого слагаемого, что приводит к уравнению

$$T_t = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{T_x}{T} \right) + \left(\frac{T_x}{T} \right)^2 + r \frac{T_x}{T} + kT + p \quad (45)$$

с коэффициентом диффузии $D(T) = T^{-1}$ и нелинейным источником:

$$J = \left(\frac{T_x}{T} \right)^2 + kT + p.$$

Вторая модификация уравнения связана с заменой $n = T^2$. Это приводит к уравнению

$$n_t = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\sqrt{n}} n_x \right) + r \frac{1}{\sqrt{n}} n_x + 2kn + 2p\sqrt{n}$$

с коэффициентом диффузии вида $D(n) = n^{-1/2}$ и нелинейным источником:

$$J = r \frac{1}{\sqrt{n}} n_x + 2kn + 2p\sqrt{n}.$$

Заключение

Приведенные примеры дают общее представление о методе нелинейных функциональных подстановок. Вместе с теми возможностями, которые были описаны в [6], приведенные в данной работе примеры указывают на эффективность метода НФП при решении общих задач отыскания интегрируемых тем или иным способом уравнений. Если вариант метода НФП, приведенный в [6], связан с методом обратной задачи, то примеры, связанные с уравнениями Sin – Gordon и Лиувилля, приведенные в данной работе, демонстрируют, что такой подход дает реальный способ искать преобразования Бэклунда для уравнений более общего вида.

Важным достоинством данного метода является возможность с его помощью получать новые частные точные решения в тех случаях, когда уравнение не интегрируется другими способами. Среди примеров, рассмотренных в данной работе, имеются ситуации, когда построение решения уравнения в частных производных сводится к решению системы связанных дифференциальных уравнений первого порядка, которые не обязательно интегрируются точно. В этих случаях понижение порядка до первого по каждой из координатных переменных упрощает дальнейший анализ задачи на основе численных расчетов.

В целом можно констатировать, что метод НФП представляет собой достаточно универсальный и эффективный инструмент работы с нелинейными задачами различного типа, который найдет применение в дальнейшем для широкого круга задач.

Список литературы

1. Журавлев В. М. Метод обобщенных подстановок Коула – Хопфа и новые примеры линеаризуемых нелинейных эволюционных уравнений // Теоретическая и математическая физика. 2009. Т. 158, № 1. С. 58–71.
2. Журавлев В. М., Зиновьев Д. А. Метод обобщенных подстановок Коула – Хопфа в размерности 1+2 и интегрируемые модели двумерных течений сжимаемой жидкости // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2008. Т. 88, № 3. С. 194–197.
3. Zhuravlev V. M., Zinov'ev D. A. The Application of Generalized Cole-Hopf Substitutions in Compressible-Fluid Hydrodynamics // Physics of Wave Phenomena. 2010. Vol. 18, № 4. P. 245–250.

4. Журавлев В. М. Многофункциональные подстановки и солитонные решения интегрируемых нелинейных уравнений // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2019. № 3. С. 93–119.
5. Журавлев В. М. Нелинейные интегрируемые модели физических процессов. Метод функциональных подстановок. Ульяновск : Изд-во УлГУ, 2020. 181 с.
6. Журавлев В. М., Морозов В. М. Представление Лакса с операторами первого порядка для новых нелинейных уравнений типа Кортевега – де Фриза // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2021. № 4. С. 178–191.
7. Lamb G. R. Backlund transformations at the turn of century // Lecture Notes in Mathematics / ed. by R. M. Miura. Springer, 1976. 515 p.
8. Лэм Дж. Л. Введение в теорию солитонов. М. : Мир, 1983. 294 с.
9. Солитоны. Сборник / под ред. Р. Буллафа, Ф. М. Кодри. М., 1983. 408 с.
10. Самарский А. А., Галактионов В. А., Курдюмов С. П., Михайлов А. П. Режимы с обострением в задачах для квазилинейных параболических уравнений. М. : Наука, 1987. 480 с.
11. Курдюмов С. П., Куркина Е. С., Тельковская О. В. Режимы с обострением в двухкомпонентных средах // Математическое моделирование. 1989. Т. 1, № 1. С. 34–50.
12. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование (Идеи. Методы. Примеры). М. : Наука, 1997. 320 с.
13. Журавлев В. М., Золотовский И. О., Морозов В. М. Об условиях возникновения регулярных структур в конденсированных средах под действием внешнего излучения // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2015. № 3. С. 144–162.
14. Семенов Э. И. Свойства уравнения быстрой диффузии и его многомерные точные решения // Сибирский математический журнал. 2003. Т. 44, № 4. С. 863–869.
15. Аристов С. Н. Периодические и локализованные точные решения уравнения $h_t = \Delta \ln h_t$ // Прикладная механика и техническая физика. 1999. Т. 40, № 1. С. 22–29.

References

1. Zhuravlev V.M. Generalized Cole–Hopf substitution method and new examples of linearizable nonlinear evolution equations. *Teoreticheskaya i matematicheskaya fizika = Theoretical and mathematical physics*. 2009;158(1):58–71. (In Russ.)
2. Zhuravlev V.M., Zinov'ev D.A. The method of generalized Cole-Hopf substitutions in 1+2 dimensions and integrable models of two-dimensional compressible fluid flows. *Pis'ma v Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki = Letters to the Journal of experimental and theoretical physics*. 2008;88(3):194–197. (In Russ.)
3. Zhuravlev V.M., Zinov'ev D.A. The Application of Generalized Cole-Hopf Substitutions in Compressible-Fluid Hydrodynamics. *Physics of Wave Phenomena*. 2010;18(4):245–250.
4. Zhuravlev V.M. Multifunctional substitutions and soliton solutions of integrable nonlinear equations. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Po-volzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2019;(3):93–119. (In Russ.)
5. Zhuravlev V.M. *Nelineynye integriruemye modeli fizicheskikh protsessov. Metod funktsional'nykh podstanovok = Nonlinear integrable models of physical processes. Functional substitution method*. Ulyanovsk: Izd-vo UIGU, 2020:181. (In Russ.)
6. Zhuravlev V.M., Morozov V.M. Lax representation with first-order operators for new nonlinear equations of the Korteweg-de Vries type. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki. = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2021;(4):178–191. (In Russ.)

7. Lamb G.R. Becklund transformations at the turn of century. *Lecture Notes in Mathematics*. Springer, 1976:515.
8. Lem Dzh.L. *Vvedenie v teoriyu solitonov = Introduction to the theory of solitons*. Moscow: Mir, 1983:294. (In Russ.)
9. Bullafa R., Kodri M. (eds.). *Solitony. Sbornik = Solitons. Collection*. Moscow, 1983:408. (In Russ.)
10. Samarskiy A.A., Galaktionov V.A., Kurdyumov S.P., Mikhaylov A.P. *Rezhimy s obostreniem v zadachakh dlya kvazilineynykh parabolicheskikh uravneniy = Blow-up regimes in problems for quasilinear parabolic equations*. Moscow: Nauka, 1987:480. (In Russ.)
11. Kurdyumov S.P., Kurkina E.S., Tel'kovskaya O.V. Blow-up regimes in two-component media. *Matematicheskoe modelirovanie = Math modeling*. 1989;1(1):34–50. (In Russ.)
12. Samarskiy A.A., Mikhaylov A.P. *Matematicheskoe modelirovanie (Idei. Metody. Primery) = Math modeling (Ideas. Methods. Examples)*. Moscow: Nauka, 1997:320. (In Russ.)
13. Zhuravlev V.M., Zolotovskiy I.O., Morozov V.M. On the conditions for the appearance of regular structures in condensed media under the action of external radiation. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2015;(3):144–162. (In Russ.)
14. Semenov E.I. Properties of the fast diffusion equation and its multidimensional exact solutions. *Sibirskiy matematicheskij zhurnal = Siberian mathematical journal*. 2003;44(4):863–869. (In Russ.)
15. Aristov S.N. Periodic and localized exact solutions of the equation $h_t = \Delta \ln h_t$. *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika = Applied mechanics and engineering physics*. 1999;40(1):22–29. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Виктор Михайлович Журавлев

доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Самарский национальный исследовательский университет (Россия, г. Самара, Московское шоссе, 34); профессор кафедры теоретической физики, Ульяновский государственный университет (Россия, г. Ульяновск, ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: zhvictorm@gmail.com

Viktor M. Zhuravlev

Doctor of physical and mathematical sciences, leading researcher, Samara National Research University (34 Moskovskoye highway, Samara, Russia); professor of the sub-department of theoretical physics, Ulyanovsk State University (42 L'va Tolstogo street, Ulyanovsk, Russia)

Виталий Михайлович Морозов

младший научный сотрудник, Самарский национальный исследовательский университет (Россия, г. Самара, Московское шоссе, 34)

E-mail: aieler@rambler.ru

Vitaliy M. Morozov

Junior researcher, Samara National Research University (34 Moskovskoye highway, Samara, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 19.05.2022

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 15.06.2022

Принята к публикации / Accepted 27.06.2022

УДК 517.925.5, 537.611.44, 51-73
doi:10.21685/2072-3040-2022-2-7

Модель радиационно-стимулированного роста когерентных структур в кристаллической среде с быстрой релаксацией и медленной диффузией

В. М. Морозов

Самарский национальный исследовательский университет, Самара, Россия
aieler@rambler.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Строится модель радиационно-стимулированного роста когерентных структур на основе нелинейной диффузии точечных дефектов в кристаллической среде. Полученные на ее основе соответствующие критерии роста могут быть использованы в прикладных задачах по получению новых материалов. *Материалы и методы.* Основные результаты получены с помощью метода многомасштабных разложений и качественной теории дифференциальных уравнений. *Результаты.* Сформулирована модель нелинейной диффузии точечных дефектов с ограниченным источником. Выявлены режимы роста когерентных структур в среде с нелинейной диффузией. Получены условия образования периодической макроструктуры и условия роста амплитуды начального периодического распределения дефектов. *Выводы.* Учет влияния дефектов на процесс их генерации в модели облучения кристаллического материала пучком частиц с высокими энергиями и плотностью приводит к описанию роста когерентных структур. При этом существуют два режима роста, отвечающие начальной стадии облучения – релаксационный, связанный с увеличением амплитуды начального распределения дефектов, и асимптотический – когда структура сохраняется при установлении динамического равновесия.

Ключевые слова: радиационно-стимулированная диффузия, нелинейная диффузия, когерентные структуры, метод многомасштабных разложений

Благодарности: автор выражает благодарность д.ф.-м.н., профессору В. М. Журавлеву за обсуждение и ценные замечания при работе над данной статьей.

Финансирование: работа выполнена в рамках проекта 0777-2020-0018, финансируемого из средств государственного задания победителям конкурса научных лабораторий образовательных организаций высшего образования.

Для цитирования: Морозов В. М. Модель радиационно-стимулированного роста когерентных структур в кристаллической среде с быстрой релаксацией и медленной диффузией // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2022. № 2. С. 99–133. doi:10.21685/2072-3040-2022-2-7

Model of radiation-stimulated growth of coherent structures in a crystalline medium with fast relaxation and slow diffusion

V.M. Morozov

Samara National Research University, Samara, Russia
aieler@rambler.ru

Abstract. *Background.* In this research constructed a model for the radiation-stimulated growth of coherent structures based on the nonlinear diffusion of point defects in a crystal-

line medium. *Materials and methods.* The main results were obtained with using the method of multiscale expansions and the qualitative theory of differential equations. *Results.* A model of nonlinear diffusion of point defects with a limited source were formulated. Regimes of growth of coherent structures in a medium with nonlinear diffusion were revealed. Conditions for the formation of a periodic macrostructure and conditions for amplification of the amplitude of the initial periodic distribution of defects were obtained. *Conclusions.* Accounting for the influence of defects on the process of their generation in the model of irradiation of a crystalline material with a high-energy and high-density particle beam leads to a description of the growth of coherent structures. In this case, there are two modes of growth corresponding to the initial stage of irradiation—relaxation, associated with an increase in the amplitude of the initial distribution of defects, and asymptotic, when the structure is preserved when dynamic equilibrium is established.

Keywords: radiation-stimulated diffusion, nonlinear diffusion, coherent structures, multiscale decomposition method

Acknowledgments: the research was financed by the state assignment to the winners of the competition of scientific laboratories of educational institutions of higher education subordinate to the Ministry of Education and Science of Russia within the project 0777-2020-0018. The author extends gratitude to the doctor of physical and mathematical sciences V. M. Zhuravlev for discussion and useful remarks working on this research.

For citation: Morozov V.M. Model of radiation-stimulated growth of coherent structures in a crystalline medium with fast relaxation and slow diffusion. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2022;(2):99–133. (In Russ.). doi:10.21685/2072-3040-2022-2-7

Введение

Одним из способов модификации кристаллических материалов с целью получения заданных свойств является облучение их радиационным или лазерным излучением. При этом на их поверхности или в объеме могут возникать упорядоченные структуры – сверхрешетки кластеров точечных дефектов [1–6], наличие которых приводит к изменению механических [7, 8], электрических [9] и других свойств материала. В основе образования этих структур лежат процессы генерации пар точечных дефектов кристаллической решетки – вакансий и межузлий, их взаимодействие и диффузия.

Существует множество моделей [1], описывающих рост сверхрешеток, основанных на системах уравнений, описывающих динамику точечных дефектов в среде с диффузией. Один из подходов, позволяющий описать пространственное упорядочение дефектов, основан на уравнениях нелинейной диффузии в кристаллической среде. В настоящей работе, являющейся продолжением исследований, начатых в работах [4–6], развивается идея, что основным фактором, приводящим к росту упорядоченных структур, является нелинейная диффузия. В основу модели кладутся уравнения диффузии, содержащие произвольную зависимость коэффициента диффузии от концентрации.

Для анализа системы дифференциальных уравнений модели применяется метод многомасштабных разложений. Выбор данного подхода обосновывается тем, что в экспериментах наблюдается разделение пространственных и временных масштабов, отвечающих разным процессам [1]. Процессам релаксации отвечают «быстрые» переменные, а за образование крупномасштабной структуры отвечает диффузия в пространстве «медленных» переменных.

Главное отличие предлагаемой модели заключается во введении в уравнения источника дефектов, учитывающего процесс насыщения их генерации, что позволяет провести анализ на всем интервале времени облучения. Как правило, источник дефектов отождествляют с внешним источником излучения и полагают равным некоторой постоянной, в более общем случае, задают зависимость источника от координаты, направленной в глубь материала, и таким образом учитывают затухание излучения в среде. Однако в реальности источником дефектов выступает сама кристаллическая решетка, откуда следует, что количество дефектов, которое может быть сгенерировано, ограничено, а их наличие влияет на скорость генерации. Таким образом, для описания радиационно-стимулированной диффузии в кристаллической среде необходимо сформулировать новую модель на основе предложенных ранее уравнений нелинейной диффузии, в которой частицы излучения рассматриваются в качестве одной из компонент динамической системы, взаимодействующей с занятыми узлами решетки. Это должно приводить к описанию насыщения концентрации, т.е. к ограниченному росту решений со временем, и позволять получать условия образования когерентных структур в различных временных режимах облучения материала.

1. Модель «быстрая релаксация – медленная диффузия»

При облучении кристаллических материалов высокоэнергетическим излучением образуются пары точечных дефектов в результате взаимодействия узлов решетки с налетающими частицами. Это означает, что источником дефектов выступает сама решетка. При этом вероятность образования дефектов зависит от числа занятых узлов решетки. Будем рассматривать модель с двумя типами дефектов – вакансиями и межузлиями. Обозначим их концентрации соответственно n_v и n_i . Равновесную концентрацию занятых узлов решетки обозначим N_c . Тогда в любой момент времени концентрация занятых узлов решетки равна $(N_c - n_v)$. При облучении материала внешним потоком частиц с концентрацией их в среде g вероятность встречи налетающей частицы с занятым узлом решетки равна $(N_c - n_v)g$. Если при взаимодействии налетающей частицы с узлом решетки с вероятностью $\tilde{\lambda}_c$ образуется пара дефектов вакансия-межузлие, то источник для обоих типов дефектов имеет вид $\tilde{\lambda}_c(N_c - n_v)g$. Межузлия с некоторой вероятностью $\tilde{\lambda}_i$ взаимодействуют с налетающими частицами, что приводит к потере энергии частиц излучения и выбыванию их из процесса генерации. Записывая закон сохранения налетающих частиц с учетом их взаимодействия с решеткой и дефектами, получаем следующее уравнение:

$$g_\tau = -\frac{\partial I}{\partial z_3} - \tilde{\lambda}_c(N_c - n_v)g - \tilde{\lambda}_i n_i g - \tilde{\kappa}g, \quad (1)$$

где $I(z_3, \tau)$ – интенсивность внешнего излучения в среде (предполагается, что излучение падает на границу $z_3 = 0$ в трехмерном пространстве с координатами в нем (z_1, z_2, z_3)), а слагаемое $\tilde{\kappa}g$ учитывает выбывание налетающих частиц за счет процессов, не связанных с образованием дефектов. Для

определения интенсивности налетающих частиц I будем использовать стандартную формулу, связывающую ее с концентрацией g : $I = \sigma_r g$, где σ_r – скорость движения налетающих частиц. Используя эту формулу в уравнениях, мы предполагаем, что налетающая частица только единожды может взаимодействовать с атомом решетки с образованием дефекта, и пренебрегаем изменением скорости частицы при прохождении материала.

Диффузия точечных дефектов в данной работе описывается системой уравнений, аналогичной предложенной в [4], с добавлением уравнения (1) для концентрации налетающих частиц:

$$\frac{\partial n_v}{\partial \tau} = \tilde{\lambda}_c (N_c - n_v) g + \tilde{\lambda}_i (N_c - n_v) n_i - \tilde{\gamma} n_v n_i - \tilde{\mu}_v n_v + \nabla [D_v (n_i, n_v) \nabla n_v],$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial \tau} = -\tilde{\sigma}_i \frac{\partial n_i}{\partial z_3} + \tilde{\lambda}_c (N_c - n_v) g + \tilde{\lambda}_i (N_c - n_v) n_i - \tilde{\gamma} n_v n_i - \tilde{\mu}_i n_i + \nabla [D_i (n_i, n_v) \nabla n_i],$$

где $\tilde{\lambda}_i$ – интенсивность взаимодействия выбитых атомов с узлами решетки, приводящего к рождению пары дефектов; слагаемое $-\tilde{\sigma}_i \frac{\partial n_i}{\partial z}$ учитывает перенос выбитых атомов за счет энергии, получаемой от налетающих частиц; $\tilde{\gamma}$ – коэффициент взаимной рекомбинации; $\tilde{\mu}_{v,i}$ учитывают выход дефектов на различные стоки с постоянной концентрацией; $D_{v,i}$ – коэффициенты диффузии; ∇ – градиент в декартовых переменных (z_1, z_2, z_3) .

Для удобства выделим размерный «обычный» коэффициент диффузии D_0 : $D_{v,i}(n_v, n_i) = D_0 D_{v,i}(n_v, n_i)$. Переходя к безразмерным переменным, с помощью соотношений $\tau = t_0 t$, $(z_1, z_2, z_3) = x_0 (x, y, z)$, $n_v = N_0 \tilde{v}$, $n_i = N_0 \tilde{u}$, $g = N_0 h$ запишем систему уравнений в следующем виде:

$$h_t = -\frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial h}{\partial z} - (1 - \tilde{v}) h - \lambda_r \tilde{u} h - \varepsilon \kappa h,$$

$$\tilde{v}_t = (1 - \tilde{v}) \tilde{h} + \lambda_s (1 - \tilde{v}) \tilde{u} - \gamma \tilde{u} \tilde{v} - \varepsilon \mu_v \tilde{v} + \nabla [D_v (N_c \tilde{u}, N_c \tilde{v}) \nabla \tilde{v}],$$

$$\tilde{u}_t = -\sqrt{\varepsilon} \sigma_i \frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} + (1 - \tilde{v}) \tilde{h} + \lambda_s (1 - \tilde{v}) \tilde{u} - \gamma \tilde{u} \tilde{v} - \varepsilon \mu_i \tilde{u} + \nabla [D_i (N_c \tilde{u}, N_c \tilde{v}) \nabla \tilde{u}],$$

где \tilde{v} , \tilde{u} , h – безразмерные концентрации вакансий, межузлий и налетающих частиц. Коэффициенты в уравнении имеют следующий вид:

$$\varepsilon = (D_0 \tilde{\lambda}_c N_c)^{1/4} / \sqrt{\sigma_r}, \quad \lambda_{r,i} = \tilde{\lambda}_{r,i} / \tilde{\lambda}_c, \quad \varepsilon \kappa = \tilde{\kappa} / (\tilde{\lambda}_c N_c),$$

$$\gamma = \tilde{\gamma} / \tilde{\lambda}_c, \quad \varepsilon \mu_{v,i} = \tilde{\mu}_{v,i} / (\tilde{\lambda}_c N_c), \quad \sqrt{\varepsilon} \sigma_i = \tilde{\sigma}_i / \sqrt{D_0 \tilde{\lambda}_c N_c}.$$

Параметры обезразмеривания связаны с размерными коэффициентами следующим образом:

$$N_0 = N_c, \quad t_0 = 1 / (\tilde{\lambda}_c N_c), \quad x_0 = \sqrt{D_0 / (\tilde{\lambda}_c N_c)}.$$

Будем считать безразмерный параметр ε малой положительной величиной, определяющей масштаб когерентной структуры. Чтобы выяснить, каким условиям отвечает $\varepsilon \ll 1$, представим его в виде

$$\varepsilon^4 = \frac{D_0 \tilde{\lambda}_c Nc}{\sigma_r^2} = \frac{D_0}{\sigma_r} \frac{1}{\sigma_r \tau_d} \frac{\tau_d (\dot{g})_{abs}}{I / \sigma_r} = e_0 \frac{\langle v \rangle \langle l \rangle}{\sigma_r \langle l_i \rangle} \frac{(\delta g)_{abs}}{g_{irr}} \ll 1,$$

здесь τ_d – характерное время диффузии в необлученном кристалле; $(\dot{g})_{abs} = \tilde{\lambda}_c (Nc - 0) g_0$ – вклад в изменение концентрации налетающих частиц, обусловленный только поглощением неповрежденной решеткой; $(\delta g)_{abs}$ – изменение концентрации налетающих частиц за время τ_d , обусловленное только поглощением; g_{irr} – концентрация частиц в падающем пучке; $\langle v \rangle$ – средняя «тепловая» скорость частиц вещества; e_0 – числовой коэффициент, зависящий от типа кристаллической решетки; $\langle l \rangle$ – средняя длина свободного пробега частиц вещества в необлученном кристалле; $\langle l_i \rangle = \sigma_r \tau_d$ – расстояние, которое проходят без столкновения частицы излучения за то же время.

Таким образом, малость параметра ε определяется малым соотношением длин пробегов частиц в решетке (высокой, относительно тепловой энергии частиц вещества, энергией налетающих частиц) и малым соотношением потоков излучения внутри среды и вне ее (слабое поглощение).

Для дальнейших вычислений удобно сделать такие замены переменных:

$$\tilde{v}(\mathbf{x}, t) = \alpha_0 + \alpha_1 v(\mathbf{x}, t), \quad \tilde{u}(\mathbf{x}, t) = \alpha_1 u(\mathbf{x}, t),$$

где

$$\alpha_0 = \frac{\lambda_i}{\lambda_i + \gamma}, \quad \alpha_1 = \frac{\gamma}{\lambda_i + \gamma}.$$

Тогда уравнения примут вид

$$h_t = -\frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial h}{\partial z} - \alpha_1 (1 - v) h - \alpha_1 \lambda_r u h - \varepsilon k h,$$

$$v_t = (1 - v) h - \gamma u v - \varepsilon \mu_v \tilde{v} + \nabla [D_v (N_c \alpha_1 u, N_c \alpha_1 v + N_c \alpha_0) \nabla v] - \varepsilon \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma},$$

$$u_t = -\sqrt{\varepsilon} \sigma_i \frac{\partial u}{\partial z} + (1 - v) h - \gamma u v - \varepsilon \mu_v \tilde{v} + \nabla [D_v (N_c \alpha_1 u, N_c \alpha_1 v + N_c \alpha_0) \nabla u].$$

Из экспериментов по росту периодических структур (сверхрешеток) [1] известно, что период этих структур значительно превышает межатомные расстояния, а рост происходит медленнее процессов генерации и рекомбинации. То есть наблюдается разделение пространственных и временных масштабов на «малые/быстрые» и «большие/медленные». Для того чтобы это учесть, введем наряду с обычными «быстрыми» переменными «медленные»: $T = \varepsilon t$,

$X = \sqrt{\varepsilon}x$, $Y = \sqrt{\varepsilon}y$, $Z = \sqrt{\varepsilon}z$. Поскольку пространственные масштабы когерентных структур велики, то можно считать, что концентрации являются функциями только «медленных» координат $\mathbf{X} = (X, Y, Z)$. С учетом сделанных предположений рассматриваемые функции будут иметь вид

$$v(\mathbf{x}, t) = V(\mathbf{X}, t, T), \quad u(\mathbf{x}, t) = U(\mathbf{X}, t, T), \quad h(\mathbf{x}, t) = G(\mathbf{X}, t, T).$$

Наряду с введенными медленными переменными можно было бы также рассматривать зависимость функций от переменных $T_1 = \varepsilon^2 t$, $X_1 = \varepsilon x, \dots$, но она не учитывается, поскольку в данной работе мы ограничиваемся рассмотрением только первых двух порядков разложения по малому параметру ε .

Приведем используемые формулы дифференцирования на примере функции $u(\mathbf{x}, t) = U(\mathbf{X}, t, T)$: $u_t = U_t + \varepsilon U_T$, $u_x = \sqrt{\varepsilon} U_X$.

С учетом приведенных выше замечаний получаем следующую систему уравнений:

$$G_t + \varepsilon G_T = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial G}{\partial Z} - r(1-V)G - r\lambda_r UG - \varepsilon \kappa G,$$

$$V_t + \varepsilon V_T = (1-V)G - \gamma UV - \varepsilon \mu_v V + \varepsilon \Delta_s F_v(U, V) - \varepsilon \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma},$$

$$U_t + \varepsilon U_T = (1-V)G - \gamma UV - \varepsilon \mu_i U + \varepsilon \Delta_s F_i(U, V) - \varepsilon \sigma_i U_Z,$$

где для более компактной записи диффузионного члена введены вспомогательные функции:

$$\begin{aligned} F_v(U, V) &= \alpha_1 \int D_v(N_c \alpha_1 U - N_c \alpha_1 \xi + N_c \alpha) d\xi, \quad F_i(U, V) = \\ &= \alpha_1 \int D_i(N_c \alpha_1 \xi, N_c \alpha_1 v + N_c \alpha) d\xi, \end{aligned} \quad (2)$$

Δ_s – оператор Лапласа в медленных координатах.

2. Уравнения релаксации

Применение метода многомасштабных разложений позволяет разделить систему на уравнения в нулевом порядке, содержащие только релаксационные члены и уравнения следующих порядков, описывающие медленное пространственное распределение.

В нулевом порядке уравнения выглядят следующим образом:

$$G_{0,Z} = 0,$$

$$V_{0,t} = (1-V_0)G_0 - \gamma U_0 V_0, \quad (3)$$

$$U_{0,t} = (1-V_0)G_0 - \gamma U_0 V_0.$$

Уравнения же в первом порядке, учитывающие процесс медленной диффузии, будут иметь вид

$$G_{1,Z} = -G_{0,t} - rG_0(1-V_0 + \lambda_r U_0),$$

$$V_{1,t} + G_0 V_1 - (1 - V_0) G_1 + \gamma(U_0 V_1 + V_0 U_1) = -V_{0,T} + \Delta_s F_v(U_0, V_0) - \mu_v V_0 - \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma},$$

$$U_{1,t} + G_0 U_1 - (1 - V_0) G_1 + \gamma(U_0 V_1 + V_0 U_1) = -U_{0,T} + \Delta_s F_i(U_0, V_0) - \mu_i U_0 - \sigma_i U_{0,Z}.$$

В нулевом порядке решение для концентрации частиц излучения зависит только от медленных переменных и быстрого времени: $G_0 = G_0(X, Y, t, T)$. Эта зависимость определяется интенсивностью на внешней границе среды. Поэтому самый простой вариант модели соответствует случаю однородного и стационарного распределения налетающих частиц: $G_0 = g_0 = \text{const}$.

Предположим вначале, что параметр взаимной рекомбинации равен нулю. В этом случае решение для концентрации вакансий и межузлий в нулевом порядке можно записать так:

$$V_0 = 1 - B e^{-G_0 t}, \quad U_0 = A - B e^{-G_0 t},$$

где $A = A(X, T)$, $B = B(X, T)$ – «постоянные» интегрирования, зависящие от медленных переменных. Из полученных решений видно, что при $t \rightarrow \infty$ концентрация вакансий стремится к максимально возможному значению $V_0 = 1$, а концентрация межузлий – к амплитудному фактору $A(X, T)$. Это означает, что в отсутствие рекомбинации в нулевом порядке кристаллическая решетка разрушается и образования периодической структуры не происходит.

Пусть теперь $\gamma \neq 0$. Тогда решения уравнений релаксации можно записать в таком виде:

$$V_0 = b + \frac{a}{1 - B e^{-a\gamma t}}, \quad U_0 = V_0 + \frac{v^2 - A^2(X, T)}{A(X, T)} - v^2, \quad (4)$$

где

$$v = \sqrt{\frac{g_0}{\gamma}}, \quad a = \frac{v^2 + A^2(X, T)}{A(X, T)}, \quad b = -\frac{v^2}{A(X, T)}.$$

Следуя предложенной в [4] схеме решения, функцию $B(X, T)$ будем называть «амплитудный фактор» (АФ). Как будет показано далее, эта функция при определенных условиях описывает рост начального периодического распределения концентрации. Из (4) видно, что при $t \rightarrow \infty$ в среде возникает структура, связанная с функцией $A(X, T)$. При этом поведение решения определяется знаком этой функции, так как он определяет знак экспоненты в знаменателе V_0 . Поскольку в знаменателе стоит разность двух слагаемых, то на значения функции $B(X, T)$ нужно наложить ограничения, связанные с требованием, чтобы знаменатель не обращался в ноль ни в какой момент времени. Это приводит к таким условиям:

$$B(X, T) \in \begin{cases} [-\infty, 1), & A(X, T) > 0, \\ (1, \infty], & A(X, T) < 0. \end{cases}$$

Таким образом, получаем:

$$A > 0: \quad \lim_{t \rightarrow \infty} V_0 = A(\mathbf{X}, T), \quad \lim_{t \rightarrow \infty} U_0 = \frac{v^2}{A(\mathbf{X}, T)} - v^2; \quad (5)$$

$$A < 0: \quad \lim_{t \rightarrow \infty} V_0 = \frac{v^2}{|A(\mathbf{X}, T)|}, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} U_0 = |A(\mathbf{X}, T)| - v^2.$$

Требование, чтобы концентрации в нулевом порядке изменялись в пределах от нуля до единицы, накладывает следующие ограничения на значения функции $A(\mathbf{X}, T)$:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} A(\mathbf{X}, T) \in \left[-\frac{1}{\alpha_1} - v^2, -v^2 \right] \cup \left[\frac{\alpha_1 v^2}{1 + \alpha_1 v^2}, 1 \right], \quad (6)$$

откуда следует, что при больших временах $A(\mathbf{X}, T)$ не должна менять знак. Следовательно, реализуется только один из вариантов (5) асимптотики решения.

Отметим, что в рассматриваемой модели рекомбинация не приводит к подавлению роста макроструктуры, как это было в [4–6], а наоборот, является необходимым диссипативным фактором, который наряду с нелинейностью приводит к образованию когерентной структуры.

Решение для концентрации частиц излучения в первом порядке

Уравнение для G_1 имеет вид

$$G_{1,Z} = -G_{0,t} - rG_0(1 - V_0 + \lambda_r U_0), \quad (7)$$

или, учитывая, что $G_0 = g_0 = \text{const}$, $U_0 = V_0 + q$:

$$G_{1,Z} = -rg_0(1 + \lambda_r q) - rg_0(\lambda_r - 1)V_0,$$

откуда находим:

$$G_1 = g_1 - rg_0(1 + \lambda_r q)Z + rg_0(1 - \lambda_r) \int_0^Z V_0(\mathbf{X}, Y, Z', t, T) dZ'. \quad (8)$$

Решение (8) удовлетворяет граничному условию: $G|_{Z=0} = g_1 = \text{const}$, так как интенсивность $I = \sigma_r g$ пропорциональна концентрации.

3. Вывод уравнений для асимптотики концентраций и амплитудного фактора

3.1. Уравнение асимптотики концентрации

Для интегрирования системы уравнений для концентраций в первом порядке сначала вычтем уравнения друг из друга. В результате получается:

$$\frac{\partial}{\partial t}(U_1 - V_1) = (V_0 - U_0)_T + \Delta_s [F_i(U_0, V_0) - F_v(U_0, V_0)] +$$

$$+\mu_v V_0 - \mu_i U_0 + \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma} - \sigma_i U_{0,Z},$$

откуда находим:

$$U_1 - V_1 = \left[\left(A - \frac{v^2}{A} \right)_T - \mu_i \left(\frac{v^2}{A} - A - v^2 \right) + \sigma_i \left(A - \frac{v^2}{A} \right)_Z + \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma} \right] t +$$

$$+(\mu_v - \mu_i) I_1 - \sigma_i \frac{\partial I_1}{\partial Z} + \Delta_s \int [F_i(U_0, V_0) - F_v(U_0, V_0)] dt + A_1(\mathbf{X}, T).$$

С учетом выкладок, приведенных в приложении 1, приравнивая нулю коэффициенты в линейных по t слагаемых, получаем уравнение для асимптотики концентрации вакансий:

$$\left(A - \frac{v^2}{A} \right)_T + \sigma_i \frac{v^2}{A^2} A_Z = -\Delta_s \delta F(q + A, A) - \mu_v A + \mu_i \frac{v^2}{A} - \mu_i v^2 - \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma}, \quad (9)$$

а решение исходного уравнения имеет вид

$$U_1 = V_1 + f(\mathbf{X}, t, T), \quad (10)$$

здесь

$$f(\mathbf{X}, t, T) = (\mu_v - \mu_i) R_1(\mathbf{X}, t, T) + \Delta_s \delta W(\mathbf{X}, t, T) - \sigma_i \frac{\partial}{\partial Z} R_1(\mathbf{X}, t, T) + A_1(\mathbf{X}, T),$$

где $A_1(\mathbf{X}, T)$ – постоянная интегрирования.

Выражения для $R_1(\mathbf{X}, t, T)$ и $\delta W(\mathbf{X}, t, T)$ приведены в приложении 1.

3.2. Уравнение для $A\Phi$

С учетом выражения (10) уравнение для $V_1(\mathbf{X}, t, T)$ имеет следующий вид:

$$V_{1,t} + (g_0 + 2\gamma V_0 + \gamma q) V_1 = -\gamma V_0 f + (1 - V_0) G_1 - V_{0,T} + \Delta_s F_v - \mu_v V_0. \quad (11)$$

Далее выполним в (11) замену переменной $\zeta = e^{-\gamma a t}$:

$$\zeta V_{1,\zeta} + \left(1 - \frac{2}{1 - B\zeta} \right) V_1 = -\frac{1}{\gamma a} F(\zeta), \quad (12)$$

где

$$F(\zeta) = -\gamma V_0(\zeta) f(\zeta) + (1 - V_0(\zeta)) G_1(\zeta) - V_{0,T}(\zeta) +$$

$$+\Delta_s F_v(U_0(\zeta), V_0(\zeta)) - \mu_v V_0(\zeta).$$

Здесь и далее зависимость функций от переменной \mathbf{X} опущена для простоты записи. Линейные по t слагаемые теперь соответствуют слагаемым с множителем $\ln \zeta$.

Общее решение однородного уравнения (12) стремится к нулю при $t \rightarrow \infty$, решение же неоднородного уравнения может содержать растущие со временем члены:

$$V_1 = B_1(X, T) \frac{\zeta}{(1 - B\zeta)^2} - \frac{1}{\gamma a} \frac{\zeta}{(1 - B\zeta)^2} \int_0^\zeta \frac{(1 - B\zeta')^2}{\zeta'^2} F(\zeta') d\zeta'. \quad (13)$$

Функция медленных переменных $B_1(X, T)$ – постоянная интегрирования в первом порядке.

Окончательно получаем выражение для F :

$$F = K_0 + K_1 V_0 + \Delta_s F_v(U_0, V_0) - \frac{\partial V_0}{\partial T} + \sigma_i V_0 \frac{\partial}{\partial Z} \ln|V_0 - b| - K_2 V_0 \ln|V_0 - b| - \\ - V_0 \Delta_s [K_3 \ln|V_0 - b|] - \gamma V_0 \Delta_s \hat{S}_1 V_0^{s+1} + \gamma V_0 \Delta_s \hat{S}_0 V_0^{i+j+1+1} + \\ + r g_0 (1 - \lambda_r) (1 - V_0) \int_0^Z V_0(X, Y, Z', t, T) dZ',$$

где

$$K_1(X, T) = -\mu_v - g_1 + r g_0 (1 + \lambda_r q(X, T)) Z - \gamma \Delta_s (w_0 \ln B) + \\ + \frac{A}{a} (\mu_v - \mu_i) \ln B - \sigma_i \frac{A}{a} \frac{\partial}{\partial Z} \ln B - \gamma A_1,$$

$$K_0(X, T) = g_1 - r g_0 (1 + \lambda_r q(X, T)) Z, \quad K_2 = \mu_v - \mu_i, \quad K_3(X, T) = \gamma w_1(X, T).$$

Вычисление интегралов в (13) приведено в приложении 2 (в общих формулах для интегралов пределы и штрих у ζ опущены, также для краткости не пишется переменная T , не участвующая в интегрировании). В итоге получается уравнение для АФ:

$$a B_T = \bar{D} \Delta_s (\bar{M} B) + (c_0 + c_1 Z) B + c_2 \int_0^Z a(X', T) B(X', T) dZ' + \\ + c_3 B \ln|B| + B \Delta_s (c_4 \ln|B|) + c_5 \frac{\partial}{\partial Z} B + c_6 B \frac{\partial}{\partial Z} \ln|B|,$$

коэффициенты которого имеют следующий вид:

$$\bar{D} = (1, -A, -A, A),$$

$$\bar{M} = \left(a \frac{\partial}{\partial A} F_v(q + A, A), \frac{\delta F(q + A, A) - \delta F(q + b, b)}{a} \right),$$

$$\frac{\delta F(q + A, A) - \delta F(q + b, b)}{a} - \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial A} (A \delta F(q + A, A)), (b^{-1} - A^{-1}) \delta F(q + A, A),$$

$$\begin{aligned}
 c_0 = & -2g_1 - [\mu_v + g_1 + \gamma A_1(\mathbf{X}, T)](a - 2A) - 2\Delta_s F_v(q + A, A) + (A + b)_T - \\
 & - (\mu_v - \mu_i)A + (A + b)[(\mu_v - \mu_i)\ln a + \Delta_s(\gamma w_1 \ln a)] - \sigma_i(b + A) \frac{\partial}{\partial Z} \ln a + \\
 & + (b + A)\Delta_s \left[\frac{1}{a} \int \frac{\delta F(q + b, b) - \delta F(q + A, A)}{b - A} dA - \right. \\
 & \left. - \int \frac{\delta F(q + A, A) - \delta F(q + A\xi, A\xi)}{a(1 - \xi)} d\xi \Big|_{\xi=1} \right] - \\
 & - (b + A)\Delta_s \left[\frac{b^{-1} - A^{-1}}{a} \int \delta F(q + A, A) dA \right] + rg_0(1 - \lambda_r)(A + b - 2) \int AdZ', \\
 c_1 = & rg_0(2 + a - 2A)(1 + \lambda_r q), \\
 c_2 = & rg_0(1 - \lambda_r)(1 - A), \quad c_3 = (a - 2A) \frac{\mu_v - \mu_i}{a} A, \\
 c_4 = & (a - 2A) \frac{\gamma}{a} \delta F(q + A, A), \quad c_5 = \sigma_i A, \quad c_6 = 2\sigma_i \frac{A^2}{a}.
 \end{aligned}$$

В общем случае, когда $A = A(\mathbf{X}, T)$, $g_1 = g_1(\mathbf{X}, T)$, $A_1 = A_1(\mathbf{X}, T)$, коэффициенты являются функциями \mathbf{X} , T .

3.3. Вычисление функции $A_1(\mathbf{X}, T)$

Уравнение для АФ $B(\mathbf{X}, T)$, приведенное выше, содержит в коэффициенте c_0 функцию медленных переменных $A_1(\mathbf{X}, T)$, которая должна быть определена из условия отсутствия растущих (секулярных) слагаемых в решениях во втором порядке.

Для нахождения условия отсутствия секулярных членов поступим как и при нахождении функции $A(\mathbf{X}, T)$ – вычтем из уравнения для $U(\mathbf{X}, t, T)$ уравнение для $V(\mathbf{X}, t, T)$ и приравняем нулю коэффициент при ε^2 в разложении по малому параметру ε :

$$\begin{aligned}
 (U - V)_t = & \varepsilon \left[-(U - V)_T + \mu_v V - \mu_i U + \Delta_s \delta F(U, V) - \sigma_i U_Z + \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma} \right]; \quad (14) \\
 (U_2 - V_2)_t = & -(U_1 - V_1)_T + \mu_v V_1 - \mu_i U_1 + \\
 & + \Delta_s \left[\delta F^{[1,0]}(U_0, V_0) U_1 + \delta F^{[0,1]}(U_0, V_0) V_1 \right] - \sigma_i \frac{\partial U_1}{\partial Z}.
 \end{aligned}$$

При решении уравнений первого порядка было получено выражение

$$U_1 = V_1 + f(\mathbf{X}, t, T).$$

То есть уравнение можно записать в виде

$$(U_2 - V_2)_t = -f_T - \mu_i f + \Delta_s \left[\delta F^{[1,0]}(U_0, V_0) f \right] - \sigma_i \frac{\partial f}{\partial Z} +$$

$$+ (\mu_v - \mu_i) V_1 + \Delta_s \left[\delta F^{[1,0]}(U_0, V_0) V_1 + \delta F^{[0,1]}(U_0, V_0) V_1 \right] - \sigma_i \frac{\partial V_1}{\partial Z}.$$

Вычисление интегралов от слагаемых в правой части этого уравнения приводит к очень громоздким выражениям, при том что в данном случае нам и не нужно знать решение для U_1, V_1 , а достаточно получить уравнение для функции $A_1(X, T)$.

Для этого заметим, что при $t \rightarrow \infty$, как и решения нулевого порядка, решения в первом порядке стремятся к выражениям, зависящим только от медленных переменных, при этом в них входит только функция $A_1(X, t)$ и не входит $B_1(X, T)$.

Используем этот факт для вычисления функции A_1 , т.е. рассмотрим правую часть в приведенном выше уравнении при $t \rightarrow \infty$.

Из уравнения (13) следует, что при $t \rightarrow \infty$ функция V_1 стремится к нулю.

Тогда имеем:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (U_2 - V_2) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int \left[-f_T - \mu_i f + \Delta_s \left[\delta F^{[1,0]}(U_0, V_0) f \right] - \sigma_i \frac{\partial f}{\partial Z} \right] dt + A_2(X, T).$$

Функции U_0, V_0 были вычислены выше и уже известно, что они стремятся к постоянным при $t \rightarrow \infty$.

Для дальнейших выкладок достаточно рассмотреть случай $A = \text{const}$. Тогда оставшийся предел $\lim_{t \rightarrow \infty} f(X, t, T)$ имеет вид

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(X, t, T) = (\mu_v - \mu_i) \lim_{t \rightarrow \infty} R_1(X, t, T) + \Delta_s \lim_{t \rightarrow \infty} \delta W(X, t, T) -$$

$$- \sigma_i \frac{\partial}{\partial Z} \lim_{t \rightarrow \infty} R_1(X, t, T) + A_1(X, T) = (\mu_v - \mu_i) \left(-\frac{A}{\gamma a} \ln|B| + \frac{1}{\gamma} \ln|A - b| \right) +$$

$$+ \frac{\sigma_i A}{\gamma a} \frac{\partial}{\partial Z} \ln|B| + w_0 \Delta_s \ln|B| + A_1(X, T),$$

где были использованы результаты из приложения 1.

Поскольку функция $A_1(X, T)$ произвольна, то удобно сделать замену переменной:

$$\tilde{A}_1 = A_1 + w_0 \Delta_s \ln|B| + \frac{\sigma_i A}{\gamma a} \frac{\partial}{\partial Z} \ln|B| + (\mu_v - \mu_i) \left(-\frac{A}{\gamma a} \ln|B| + \frac{1}{\gamma} \ln|A - b| \right).$$

Это приведет к пересчету коэффициентов в уравнении для $A\Phi B(X, T)$, но не изменит его структуры. А f примет вид $f = \tilde{A}_1(X, T)$.

Тогда рассмотренное выше выражение примет вид

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (U_2 - V_2) = \lim_{t \rightarrow \infty} \left[-\tilde{A}_1(\mathbf{X}, T)_T - \mu_i \tilde{A}_1(\mathbf{X}, T) + \right. \\ \left. + \delta F^{[1,0]}(U_0, V_0) \Delta_s \tilde{A}_1(\mathbf{X}, T) - \sigma_i \frac{\partial \tilde{A}_1(\mathbf{X}, T)}{\partial Z} \right] t + A_2(\mathbf{X}, T),$$

откуда следует условие отсутствия секулярных слагаемых:

$$\frac{\partial \tilde{A}_1}{\partial T} + \sigma_i \frac{\partial \tilde{A}_1}{\partial Z} = D_1 \Delta_s \tilde{A}_1 - \mu_i \tilde{A}_1. \quad (15)$$

Для упрощения дальнейших выкладок выберем в качестве решения $\tilde{A}_1(\mathbf{X}, T) = 0$.

Пересчет коэффициентов в уравнении для $B(\mathbf{X}, T)$ приводит к таким выражениям:

$$\tilde{c}_0 = -2g_1 - [\mu_v + g_1 + (\mu_v - \mu_i) \ln|A - b|] (a - 2A) - \\ - (\mu_v - \mu_i) A + (A + b) (\mu_v - \mu_i) \ln a,$$

$$\tilde{c}_1 = rg_0 (2 + a - 2A) (1 + \lambda_r q) + rg_0 (1 - \lambda_r) (A + b - 2) A,$$

$$\tilde{c}_2 = ac_2, \quad \tilde{c}_3 = c_3, \quad \tilde{c}_4 = c_4 + \gamma (A - 2a) w_0, \quad \tilde{c}_5 = c_5, \quad \tilde{c}_6 = c_6 - \sigma_i \frac{A}{a} (A - 2a).$$

Еще раз отметим, что выкладки, приведенные выше, выполнены для случая $A(\mathbf{X}, T) = \text{const}$, т.е. для стационарного решения уравнения (9).

4. Различные режимы роста когерентных структур

В решения уравнений в нулевом порядке входят две функции медленных переменных – это функция $A(\mathbf{X}, T)$, определяющая асимптотику решения при $t \rightarrow \infty$, и $B(\mathbf{X}, T)$ – амплитудный фактор. Поскольку целью анализа уравнений в конечном счете является получение локализованных или периодических решений для концентраций, то из вида решений в нулевом порядке можно заключить, что существует две возможности для их получения.

В первом случае будем считать, что материал облучается сколь угодно долго и в системе устанавливается динамическое равновесие. В этом случае решения определяются только функцией $A(\mathbf{X}, T)$, при этом $B(\mathbf{X}, T)$ в уравнение для нее не входит. Данный режим будем называть асимптотическим.

Во втором случае будем считать, что облучение происходит в течение некоторого конечного промежутка времени. Тогда вклад в решение дают обе функции и даже в случае, когда решение $A(\mathbf{X}, T)$ не приводит к образованию структуры, на конечном отрезке времени структура может возникнуть за счет соответствующего решения для $B(\mathbf{X}, T)$. В этом случае нужно в начале задать некоторое решение для $A(\mathbf{X}, T)$, так как эта функция входит в уравне-

ние для $B(X, T)$, затем найти соответствующее решение для АФ $B(X, T)$ и определить характерное время, когда структура наиболее контрастна и можно прекратить облучение. Соответствующий режим назовем релаксационным.

4.1. Асимптотический режим роста

Рассмотрим более подробно уравнение (9):

$$\left(A - \frac{v^2}{A} \right)_T + \sigma_i \frac{v^2}{A^2} A_Z = -\Delta_s \delta F(q + A, A) - S(A),$$

где $S(A) = \mu_v A + \mu_i v^2 - \mu_i \frac{v^2}{A} + \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma}$.

Выпишем, чему равно первое слагаемое в правой части:

$$\begin{aligned} \Delta_s \delta F(q + A, A) &= \nabla \left[D_i(N_c r q + N_c r A, N_c \alpha + N_c r A) \nabla(q + A) - \right. \\ &\quad \left. - D_v(N_c r q + N_c r A, N_c \alpha + N_c r A) \nabla A \right] = \\ &= \nabla \left[D_i \left(N_c r \frac{v^2}{A} - N_c r v^2, N_c \alpha + r A \right) \nabla \frac{v^2}{A} - \right. \\ &\quad \left. - D_v \left(N_c r \frac{v^2}{A} - N_c r v^2, N_c \alpha + N_c r A \right) \nabla A \right] = -\nabla(D_{as}(A) \nabla A), \end{aligned}$$

где D_{as} – эффективный коэффициент диффузии, который имеет вид

$$\begin{aligned} D_{as}(A) &= \frac{v^2}{A^2} D_i \left(\frac{N_c r v^2}{A} - N_c r v^2, N_c \alpha + N_c r A \right) + \\ &\quad + D_v \left(\frac{N_c r v^2}{A} - N_c r v^2, N_c \alpha + N_c r A \right) \end{aligned} \quad (16)$$

и в общем случае может принимать отрицательные значения.

Тогда (9) примет вид, близкий к нелинейному уравнению диффузии:

$$\left(1 + \frac{v^2}{A^2} \right) A_T + \sigma_i \frac{v^2}{A^2} A_Z = \nabla(D_{as}(A) \nabla A) - S(A). \quad (17)$$

Для анализа локализованных решений введем переменную $\zeta = \mathbf{KX} + \rho T$. В стационарном случае $\rho = 0$, в нестационарном следует положить $\rho = \pm 1$.

Уравнение (17) сводится к автономному обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка и может быть записано в виде динамической системы:

$$\frac{dA}{d\zeta} = W, \quad (18)$$

$$\frac{dW}{d\zeta} = \frac{\left[\rho(1+v^2/A^2) + \sigma_i v^2 K_3 / A^2 \right] W - K^2 D'_{as}(A) W^2 + S(A)}{K^2 D_{as}(A)}. \quad (19)$$

Данная система имеет две вещественные стационарные точки (A_0, W_0) :

$$(A_0^+, W_0) = \left(\sqrt{(\delta + \beta)^2 + 2\delta} - \delta - \beta, 0 \right), \quad (-A_0^-, W_0) = \left(-\sqrt{(\delta + \beta)^2 + 2\delta} - \delta - \beta, 0 \right),$$

$$\text{где } \beta = \frac{\lambda_i}{2\gamma}, \quad \delta = \frac{v^2 \mu_i}{2\mu_v}.$$

Для выяснения типа стационарных точек запишем характеристическое уравнение, соответствующее линейной части системы (18)–(19):

$$\det \begin{vmatrix} -\Lambda & 1 \\ \frac{S'(A_0)}{K^2 D_{as}(A_0)} & \frac{\rho(1+v^2/A_0^2) + \sigma_i v^2 K_3 / A_0^2}{K^2 D_{as}(A_0)} - \Lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (20)$$

где $A_0 = \pm A_0^\pm$.

Откуда следует, что собственные значения имеют вид

$$\Lambda_{1,2} = \frac{1}{2K^2 D_{as}(A_0)} \left(\rho(1+v^2/A_0^2) + \sigma_i v^2 K_3 / A_0^2 \pm \sqrt{\left[\rho(1+v^2/A_0^2) + \sigma_i v^2 K_3 / A_0^2 \right]^2 + 4K^2 D_{as}(A_0) S'(A_0)} \right). \quad (21)$$

Из выражения (21) видно, что для получения стационарной точки типа фокус или центр необходимо, чтобы выполнялось одно из условий:

- 1) $D_{as}(A_0) > 0, S'(A_0) < 0$;
- 2) $D_{as}(A_0) < 0, S'(A_0) > 0$.

Вычислим $S'(A_0)$:

$$S'(A_0) = \mu_v + \frac{\mu_i v^2}{A_0^2}.$$

Так как A_0 – вещественное число, то $S'(A_0) \geq 0$ независимо от типа стационарной точки, т.е. остается выяснить, при каких условиях $D_{as}(A_0) < 0$ для обеих стационарных точек.

В начале пусть $A_0 = A_0^+ = \sqrt{(\delta + \beta)^2 + 2\delta} - \delta - \beta$.

В этом случае аргументам в коэффициенте диффузии можно придать физический смысл и понять, какие значения он принимает. Из (16) имеем:

$$D_{as}(A_0^+) = \frac{v^2}{A_0^{+2}} D_i \left(\frac{N_c r v^2}{A_0^+} - N_c r v^2, N_c \alpha + N_c r A_0^+ \right) +$$

$$+D_v \left(\frac{N_c r v^2}{A_0^+} - N_c r v^2, N_c \alpha + r A_0^+ \right).$$

В случае $A > 0$ асимптотики концентраций имеют вид

$$\lim_{t \rightarrow \infty} V_0 = A(X, T), \quad \lim_{t \rightarrow \infty} U_0 = \frac{v^2}{A(X, T)} - v^2.$$

Пользуясь этими формулами и вводя такие обозначения $n_{v\infty} = N_c r A_0^+$, $n_{i\infty} = N_c r \left(\frac{v^2}{A_0^+} - v^2 \right)$, запишем коэффициент диффузии D_{as} в виде

$$D_{as} = \frac{(N_c r v)^2}{n_{v\infty}^2} D_i(n_{i\infty} n_{v\infty}) + D_v(n_{i\infty}, n_{v\infty}). \quad (22)$$

Величины $n_{v\infty}, n_{i\infty}$, являясь асимптотиками концентраций, должны принимать значения от нуля до единицы, т.е. они являются нормальными аргументами коэффициентов диффузии как функций концентраций и $D_i(n_{i\infty} n_{v\infty}) \geq 0, D_v(n_{i\infty} n_{v\infty}) \geq 0$.

Таким образом, для стационарной точки A_0^+ : $D_{as}(A_0^+) \geq 0$, т.е. условие периодичности решений не выполняется.

Во втором случае $A_0 = -A_0^- = -\sqrt{(\delta + \beta)^2 + 2\delta - \delta - \beta}$ и коэффициент диффузии D_{as} имеет вид

$$D_{as}(-A_0^-) = \frac{v^2}{A_0^{-2}} D_i \left(-\frac{N_c r v^2}{A_0^-} - N_c r v^2, N_c \alpha - N_c r A_0^- \right) + \\ + D_v \left(-\frac{N_c r v^2}{A_0^-} - N_c r v^2, N_c \alpha - N_c r A_0^- \right).$$

Поскольку в данном случае функции $D_{i,v}(u, v)$ зависят от отрицательных аргументов, то они могут принимать отрицательные значения и коэффициент D_{as} будет меньше нуля. В таком случае условие комплексности собственных значений можно записать в виде неравенства:

$$\left[\rho \left(1 + v^2 / A_0^2 \right) + \sigma_i v^2 K_3 / A_0^2 \right]^2 \leq 4K^2 \left| D_{as}(A_0^-) \right| S'(A_0^-). \quad (23)$$

Наличие вещественной части у собственных значений приводит к неограниченному росту решения вблизи стационарной точки, что еще не говорит об отсутствии замкнутых фазовых траекторий. Так как для полного анализа фазового портрета необходимо знать точный вид коэффициентов диффузии, вычисление которых выходит за рамки данного исследования, гра-

начимся рассмотрением чисто периодических решений. Таким решениям соответствует стационарная точка типа *центр*, т.е. чисто мнимые собственные значения (21). Условие равенства нулю вещественной части $\Lambda_{1,2}$ имеет вид

$$K_3 = -\frac{\rho}{\sigma_i} \left(1 + \frac{(A_0^-)^2}{v^2} \right).$$

Выпишем соответствующие собственные значения:

$$\Lambda_{1,2} = \pm i \sqrt{\frac{S'(A_0^-)}{D_{as}(A_0^-)}} \frac{1}{K}.$$

Периодическое решение вблизи стационарной точки выглядит таким образом:

$$A_s(X, T) = -A_0^- + a_0 \cos \left[\sqrt{\frac{S'(A_0^-)}{D_{as}(A_0^-)}} \mathbf{e}_K \mathbf{X} + b_0 \right].$$

Период структуры вблизи стационарной точки не зависит от начального распределения.

Соответствующие асимптотики концентраций имеют вид

$$n_v = \frac{N_c}{\lambda_i + \gamma} \left(\lambda_i + \frac{g_0}{|A_s(\mathbf{X}, T)|} \right), \quad n_i = \gamma \frac{N_c}{\lambda_i + \gamma} (|A_s(\mathbf{X}, T)| - v^2).$$

4.2. Релаксационный режим роста

В общем случае уравнение для АФР является нелинейным интегро-дифференциальным уравнением с переменными коэффициентами. Однако анализ этого уравнения существенно упрощается, если положить $A = \text{const}$. При данном предположении все коэффициенты в уравнении для $B(\mathbf{X}, T)$ постоянны, и оно допускает разделение переменных. При этом существуют различные варианты представления решения, содержащие как полное разделение переменных, так и частичное.

Подставим функцию $B(\mathbf{X}, T) = \Psi(\mathbf{X}, Y, T)P(Z)$ в уравнение:

$$aB_T = \tilde{D}\Delta_s B + (\tilde{c}_0 + \tilde{c}_1 Z)B + \tilde{c}_2 \int_0^Z B(\mathbf{X}', T) dZ' + B\tilde{c}_3 \ln|B| + \tilde{c}_4 B\Delta_s \ln|B| + \tilde{c}_5 \frac{\partial}{\partial Z} B + \tilde{c}_6 B \frac{\partial}{\partial Z} \ln|B|,$$

где $\tilde{D} = \tilde{D}\tilde{M}$.

Получаем:

$$\left[-a\Psi_T + \tilde{D}\Delta_s \Psi + \Psi\tilde{c}_3 \ln|\Psi| + \tilde{c}_4 \Psi\Delta_s \ln|\Psi| \right] P + \left[\tilde{D}P'' + (\tilde{c}_0 + \tilde{c}_1 Z)P + \right.$$

$$\left. + \tilde{c}_2 \int_0^Z P dZ' + \tilde{c}_3 P \ln |P| + \tilde{c}_4 P (\ln P)'' + \tilde{c}_5 P' + \tilde{c}_6 P (\ln |P|)' \right] \Psi = 0,$$

откуда находим:

$$\begin{aligned} a\Psi_T &= \tilde{D}\Delta_s\Psi + \tilde{c}_3\Psi\ln|\Psi| + \tilde{c}_4\Psi\Delta_s\ln|\Psi| + \Lambda_0\Psi, \\ \tilde{D}P'' + (-\Lambda_0 + \tilde{c}_0 + \tilde{c}_1 Z)P + \tilde{c}_2 \int_0^Z P dZ' + \\ + \tilde{c}_3 P \ln |P| + \tilde{c}_4 P (\ln |P|)'' + \tilde{c}_5 P' + \tilde{c}_6 P (\ln |P|)' &= 0. \end{aligned} \quad (24)$$

Рассмотрим в начале случай полного разделения переменных $\Psi(T, X, Y) = S(T)H_1(X)H_2(Y)$, тогда

$$\begin{aligned} a\dot{S} &= \tilde{c}_3 S \ln S + (\Lambda_0 + \Lambda_1)S, \\ \tilde{D}H_1'' + \tilde{c}_3 H_1 \ln H_1 + \tilde{c}_4 H_1 (\ln H_1)'' &= (\Lambda_1 + \Lambda_2)H_1, \\ \tilde{D}H_2'' + H_2 \tilde{c}_3 \ln H_2 + \tilde{c}_4 H_2 (\ln H_2)'' + \Lambda_2 H_2 &= 0, \end{aligned}$$

$\Lambda_{0,1,2}$ – постоянные разделения переменных.

Решение первого уравнения, определяющее временную зависимость, имеет вид

$$S(T) = e^{-\frac{\Lambda_0 + \Lambda_1}{\tilde{c}_3} T} \exp \left[p_1 e^{p_2(T-T_0)} \right], \quad (25)$$

где T_0 – постоянная интегрирования, которую для простоты можно записать как εt_0 .

Используя (25), выпишем решение в нулевом порядке, перейдя везде к быстрому времени:

$$V_0(X, t) = b + \frac{a}{1 - C(\mathbf{X}) \exp \left[p_1 e^{\varepsilon p_2(t-t_0)} + p_3 t \right]}, \quad (26)$$

где $C(\mathbf{X}) = e^{-\frac{\Lambda_0 + \Lambda_1}{\tilde{c}_3}} P(Z)H_1(X)H_2(Y)$ – пространственная часть решения $B(\mathbf{X}, T)$ и

$$p_1 = \frac{A^2 + v^2}{A(A^2 - v^2)(\mu_v - \mu_i)}, \quad p_2 = -\frac{A^2(A^2 - v^2)(\mu_v - \mu_i)}{(A^2 + v^2)^2}, \quad p_3 = -\gamma \frac{A^2 + v^2}{A}.$$

На самом деле уравнения, приведенные выше, устроены таким образом, что решение не зависит от постоянных разделения переменных и их можно положить равными нулю.

Действительно, во всех уравнениях слагаемое, содержащее постоянную деления, можно записать в таком виде (на примере уравнения для H_2):

$$\Lambda_2 H_2 = \tilde{c}_3 \frac{\Lambda_2}{\tilde{c}_3} H_2 = \tilde{c}_3 H_2 \ln m_2,$$

где $m_k = e^{\Lambda_k / \tilde{c}_3}$, $k = 0, 1, 2$.

После подстановки в уравнение введем новую функцию $\tilde{H}_2 = m_2 H_2$.

По аналогии получаем:

$$\tilde{H}_1 = \frac{1}{m_1 m_2} H_1, \quad \tilde{P} = \frac{1}{m_0} e^{\frac{\tilde{c}_0}{\tilde{c}_3} P}, \quad S = m_0 m_1 \exp \left[p_1 e^{p_2 (T - T_0)} \right].$$

После подстановки этих функций решение принимает вид

$$B(X, T) = e^{\frac{\tilde{c}_0}{\tilde{c}_3 (a - 2A)}} \exp \left(p_1 e^{\varepsilon p_2 (t - t_0)} \right) \tilde{P}(Z) \tilde{H}_1(X) \tilde{H}_2(Y).$$

Введем такое обозначение в (26): $\tilde{s}(t) = \exp \left[p_1 e^{\varepsilon p_2 (t - t_0)} + p_3 t \right]$.

Полученное выражение не содержит постоянных $\Lambda_{0,1,2}$, как и уравнения для неизвестных функций:

$$\tilde{D}\tilde{P}'' + \tilde{c}_5 \tilde{P}' + \tilde{c}_1 Z \tilde{P} + \tilde{c}_3 \tilde{P} \ln |\tilde{P}| + \tilde{c}_6 P (\ln |P|)' + \tilde{c}_4 \tilde{P} (\ln \tilde{P})'' + \tilde{c}_2 \int_0^Z \tilde{P} dZ' = 0,$$

$$\tilde{D}\tilde{H}_1'' + \tilde{H}_1 \tilde{c}_3 \ln \tilde{H}_1 + \tilde{c}_4 \tilde{H}_1 (\ln \tilde{H}_1)'' = 0, \quad \tilde{D}\tilde{H}_2'' + \tilde{H}_2 \tilde{c}_3 \ln \tilde{H}_2 + \tilde{c}_4 \tilde{H}_2 (\ln \tilde{H}_2)'' = 0.$$

В зависимости от знака постоянной $A = \pm A_0^\pm$ и коэффициентов p_1, p_2, p_3 имеются следующие варианты решений, у которых знаменатель не обращается в бесконечность (табл. 1).

Из вида решения (26) следует, что рост когерентной структуры происходит в случаях 1.1, 3.1, 4.1 (табл. 1). Условия, при которых реализуются соответствующие комбинации знаков p_1, p_2, p_3 , являются условиями роста, приведенными в табл. 2, где

$$\beta_{01} = \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2}{8\mu_1\mu_2}, \quad \beta_{02} = \frac{(\mu_1 + \mu_2)^2}{8\mu_1\mu_2},$$

$$v_{11} = \frac{\mu_2 - \mu_1 - \sqrt{(\mu_1 - \mu_2)^2 - 8\mu_1\mu_2}}{2\mu_2}, \quad v_{12} = \frac{\mu_2 - \mu_1 + \sqrt{(\mu_1 - \mu_2)^2 - 8\mu_1\mu_2}}{2\mu_2},$$

$$v_{21} = \frac{\mu_2 + \mu_1 - \sqrt{(\mu_1 + \mu_2)^2 - 8\mu_1\mu_2}}{2\mu_2}, \quad v_{22} = \frac{\mu_2 + \mu_1 + \sqrt{(\mu_1 + \mu_2)^2 - 8\mu_1\mu_2}}{2\mu_2}.$$

Таблица 1

$A > 0$					$A < 0$				
№	p_1	p_2	p_3	$C(X)$	№	p_1	p_2	p_3	$C(X)$
1.1	+	-	-	$[-\infty, 0]$	3.1	+	+	+	$[-\infty, 0]$
1.2	+	-	-	$[0, 1/s(0))$	3.2	+	+	+	$[0, 1/s(0))$
					3.3	+	+	+	$\left(\frac{1}{s(0)}, \infty\right]$
2.1	-	+	-	$[-\infty, 0]$	4.1	-	-	+	$[-\infty, 0]$
2.2	-	+	-	$[0, 1/s(0))$	4.2	-	-	+	$[0, 1/s(0))$
					4.3	-	-	+	$\left(\frac{1}{s(0)}, \infty\right]$

Таблица 2

1.1	$\mu_v > \mu_i$	$\beta \leq \beta_{01}, v_{11} < v < v_{12}$
	$\mu_v < \mu_i$	$\beta \leq \beta_{01}, v < v_{11} \cup v_{12} < v$
	$\mu_v > \mu_i$	$\beta > \beta_{01}, \forall v$
3.1	$\mu_v > \mu_i$	$\beta \leq \beta_{02}, v_{21} < v < v_{22}$
	$\mu_v < \mu_i$	$\beta \leq \beta_{02}, v < v_{21} \cup v_{22} < v$
	$\mu_v < \mu_i$	$\beta > \beta_{02}, \forall v$
4.1	$\mu_v > \mu_i$	$\beta \leq \beta_{02}, v < v_{21} \cup v_{22} < v$
	$\mu_v > \mu_i$	$\beta > \beta_{01}, \forall v$
	$\mu_v < \mu_i$	$\beta < \beta_{01}, v_{21} < v < v_{22}$

Приведем еще раз коэффициенты, для которых записаны условия:
 $\beta = \lambda_i / (2\gamma), v = \sqrt{g_0 / \gamma}$.

Уравнения пространственной части решения являются нелинейными, поэтому ограничимся качественным анализом поведения решения вблизи стационарной точки.

Рассмотрим более подробно уравнение для $\tilde{H}_1(x)$:

$$\tilde{D}\tilde{H}_1'' + \tilde{c}_4\tilde{H}_1(\ln\tilde{H}_1)'' + \tilde{c}_3\tilde{H}_1\ln\tilde{H}_1 = 0.$$

Выполним в нем замену $\tilde{H}_1(X) = e^{\theta(X)}$:

$$\theta'' + \tau_2\theta'^2 + \tau_1\theta = 0, \tag{27}$$

где

$$\tau_2 = \frac{\tilde{D}}{\tilde{D} + \tilde{c}_4}, \tau_1 = \frac{\tilde{c}_3}{\tilde{D} + \tilde{c}_4}.$$

Уравнение (27), записанное в виде динамической системы:

$$\begin{aligned}\theta' &= w, \\ w' &= -\tau_1\theta - \tau_2w^2,\end{aligned}$$

имеет стационарную точку: $(\theta_0, w_0) = (0, 0)$, а корни характеристического уравнения имеют вид

$$\lambda_{1,2} = \pm i\sqrt{\tau_1}.$$

Для стационарной точки типа *центр* необходимо выполнение условия $\tau_1 > 0$, которое является условием периодичности:

$$\frac{\tilde{c}_3}{\tilde{D} + \tilde{c}_4} > 0.$$

Решение вблизи стационарной точки имеет вид

$$\theta = \theta_0 + C_1 \cos\sqrt{\tau_1}X + C_2 \sin\sqrt{\tau_1}X.$$

Постоянные $C_{1,2}$ определяются начальными (по X) условиями для θ, θ' .

Далее проанализируем уравнение для функции $P(Z)$, определяющей профиль концентрации по глубине.

Из выражений (24) следует, что если $P(Z)$ – решение данного уравнения, то $-P(Z)$ также является его решением.

Уравнение (24) – сложное нелинейное уравнение, требующее отдельного рассмотрения, поэтому в данной статье ограничимся приведением численного решения для конкретных параметров.

Чтобы избавиться в (24) от интеграла, выполним следующие замены переменных:

$$\int_0^Z P(Z') dZ' = L(Z),$$

$$P(Z) = L'(Z), \quad P'(Z) = L''(Z), \quad P''(Z) = L'''(Z).$$

Тогда уравнение примет вид

$$L''' + \tilde{c}_4 L'(\ln|L'|)'' + \tilde{c}_6 L'(\ln|L'|)' + \tilde{c}_5 L'' + \tilde{c}_3 L' \ln|L'| + \tilde{c}_1 ZL' + \tilde{c}_2 L = 0. \quad (28)$$

Соответствующие начальные условия запишутся в виде

$$L(0) = 0, \quad L'(0) = P(0), \quad L''(0) = P'(0).$$

Окончательно получаем выражение для концентраций дефектов в нулевом порядке:

$$n_v = \frac{N_c}{\lambda_i + \gamma} \left[\lambda_i + \gamma b + \gamma a \left(1 - e^{\frac{\tilde{c}_0}{\tilde{c}_3(a-2A)}} L'(Z) \tilde{H}(X) S(t) \right)^{-1} \right], \quad (29)$$

$$n_i = \frac{N_c}{\lambda_i + \gamma} \gamma \left[-A - v^2 + a \left(1 - e^{\frac{\tilde{c}_0}{\tilde{c}_3(a-2A)}} L'(Z) \tilde{H}(X) S(t) \right)^{-1} \right]. \quad (30)$$

На рис. 1, 2 приведены графики эволюции начального распределения концентраций (29), (30) со временем. На рис. 3 приведены профили концентрации вакансий (29) по глубине материала. Пространственные координаты и время оставлены безразмерными. Нумерация графиков соответствует табл. 1. Значения параметров приведены в приложении 4.

4.3. Получение высококонтрастной макроструктуры

Характерной особенностью релаксационного режима роста является рост амплитуды начального распределения концентраций с достижением максимально контрастного распределения на конечном отрезке времени (см. случаи 1.1, 3.1, 4.1 на рис. 1, 2). Знание момента времени t_{ex} , соответствующего максимуму амплитуды периодического распределения концентрации (29), позволяет на практике добиться максимального роста макроструктуры.

Для нахождения положения максимумов концентрации вычислим производную по X от решения в нулевом порядке:

$$n_v = N_c \left(\alpha + rb + \frac{ra}{1 - C(X)\tilde{s}(t)} \right), \quad (31)$$

$$\frac{\partial n_v}{\partial X} = N_c \frac{ra\tilde{s}(t)}{(1 - C(X)\tilde{s}(t))^2} \frac{\partial C}{\partial X}. \quad (32)$$

Отсюда видно, что положение экстремумов функции $n_v(X, t)$ совпадает с положением экстремумов $C(X)$, но при этом их тип может быть различен.

Вычисление второй производной в точке экстремума приводит к следующему выражению:

$$\frac{\partial^2 n_v}{\partial X^2} = \frac{N_c r \tilde{s}(t)}{(1 - C(X_{ex})\tilde{s}(t))^2} \frac{v^2 + A^2}{A} C''(X_{ex}),$$

откуда видно, что тип экстремума зависит от знака A . При $A > 0$ максимумы $C(X)$ и $n_v(X, t)$ совпадают. При $A < 0$ максимумы (минимумы) n_v соответствуют минимумам (максимумам) $C(X)$.

Для анализа роста концентрации введем вспомогательную функцию $\delta N(t)$, равную разности значений концентрации в максимуме и минимуме:

$$\delta N(t) = n_v(X_2, t) - n_v(X_1, t) = N_c ra \left(\frac{1}{1 - C(X_2)\tilde{s}(t)} - \frac{1}{1 - C(X_1)\tilde{s}(t)} \right). \quad (33)$$

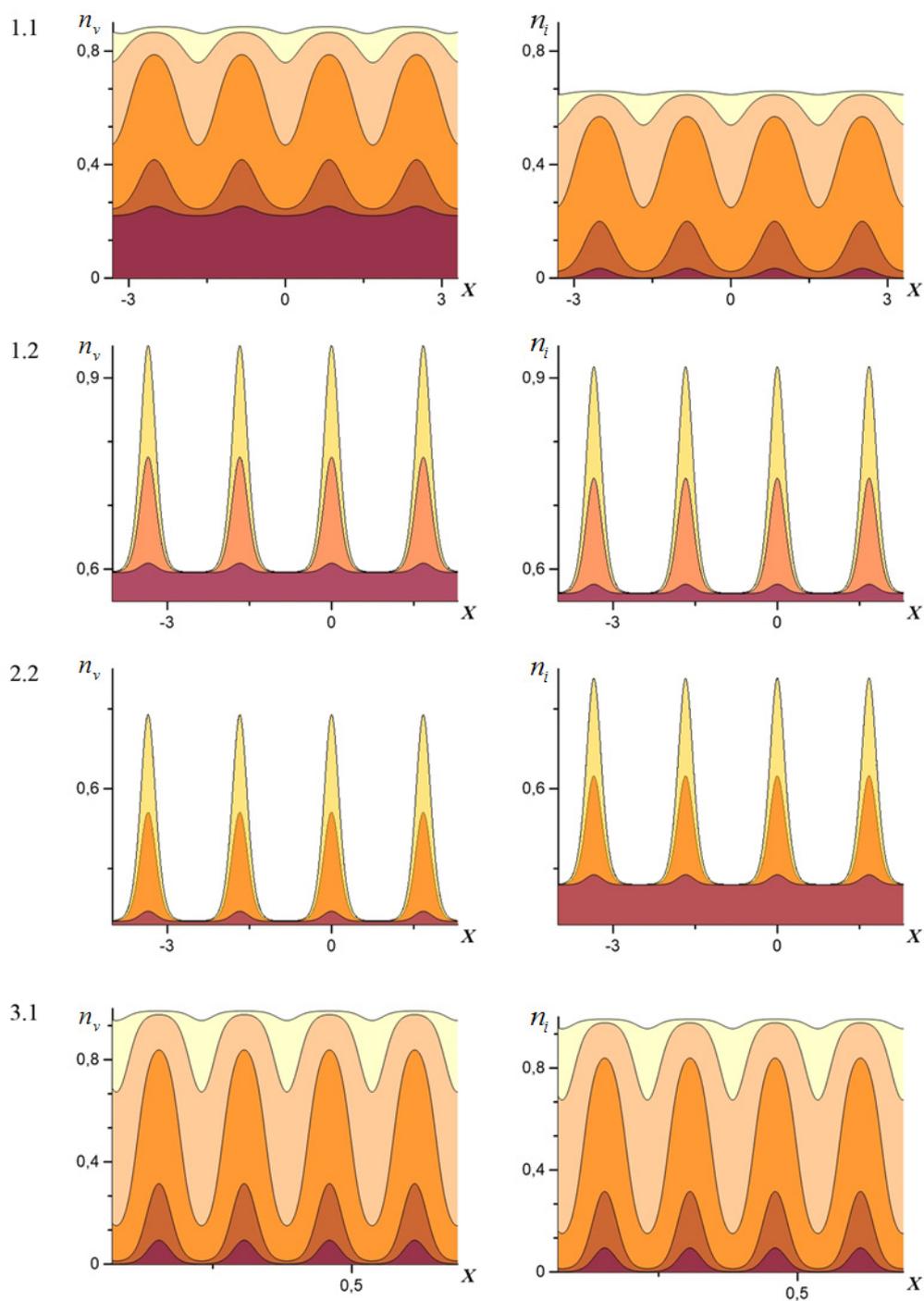


Рис. 1. Увеличение (1.1, 3.1) и уменьшение (1.2, 2.2) амплитуды начального распределения дефектов

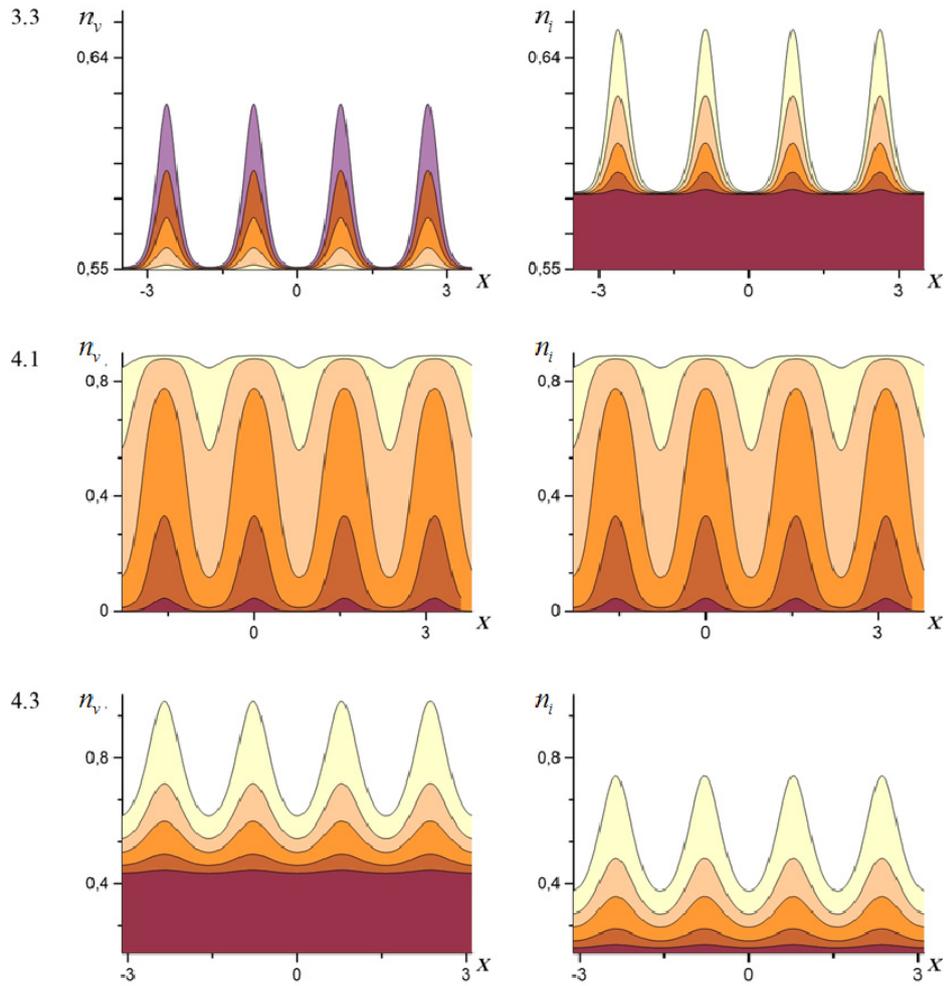


Рис. 2. Увеличение (4.1) и уменьшение (3.3, 4.3) амплитуды начального распределения дефектов

Условие роста начального распределения концентрации на некотором отрезке времени соответствует условию наличия максимума функции $\delta N(t)$. Есть два варианта обращения в ноль производной по времени от $\delta N(t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta N(t) = N_c r a \left[\frac{C(X_2)}{(1 - C(X_2) \tilde{s}(t))^2} - \frac{C(X_1)}{(1 - C(X_1) \tilde{s}(t))^2} \right] \frac{\partial \tilde{s}(t)}{\partial t} = 0.$$

В первом случае $\frac{\partial \tilde{s}(t)}{\partial t} = 0$, откуда находим: $t_{ex} = t_0 + \frac{1}{\epsilon p_2} \ln \left(-\frac{p_3}{\epsilon p_1 p_2} \right)$.

Выражение под логарифмом всегда отрицательно, так как

$$\frac{p_3}{p_1 p_2} = (\gamma A^2 + g_0)^2 / (\gamma A^2) > 0,$$

следовательно t_{ex} – комплексное, т.е. не имеет физического смысла.

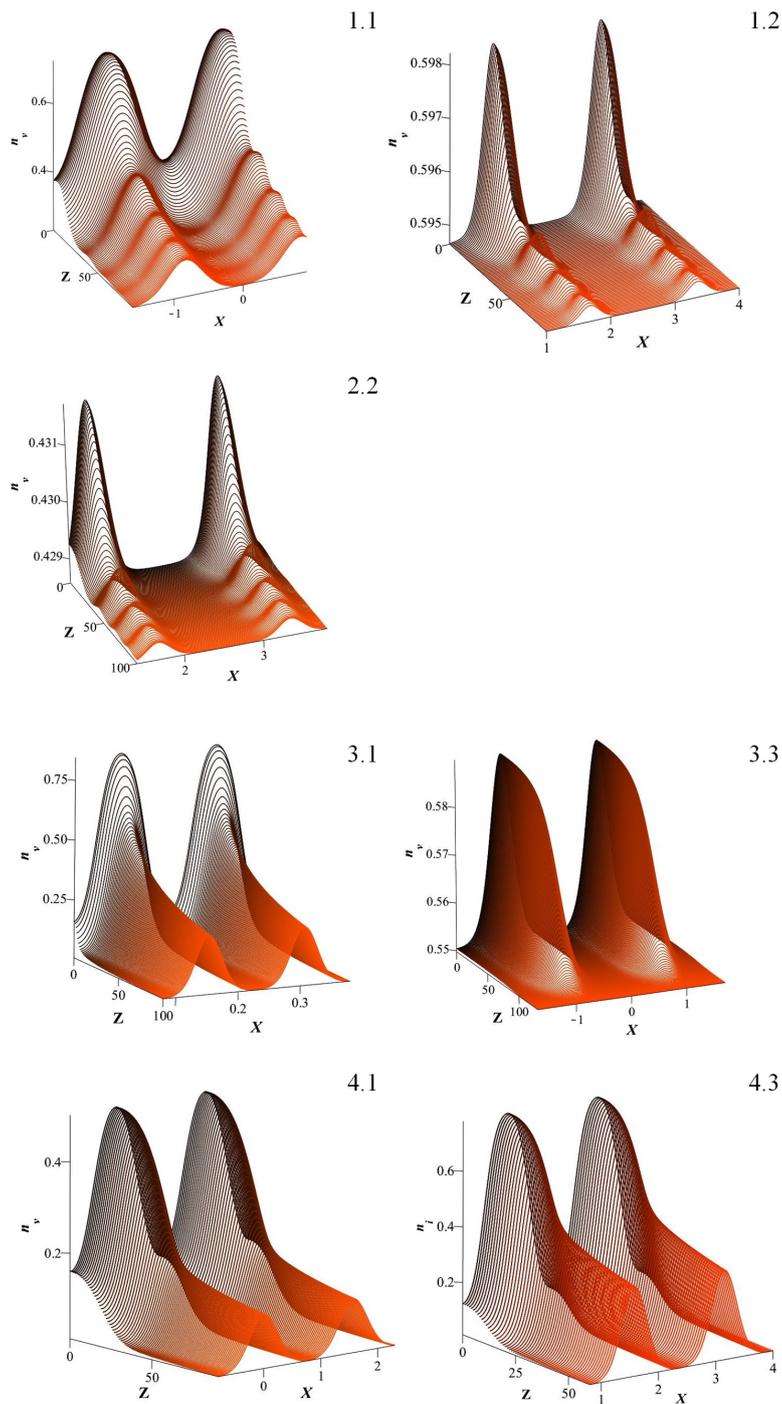


Рис. 3. Концентрации вакансий в нулевом порядке

Во втором случае:

$$\frac{C(X_2)}{(1-C(X_2)\tilde{s}(t))^2} - \frac{C(X_1)}{(1-C(X_1)\tilde{s}(t))^2} = 0,$$

или

$$\tilde{s}(t_{ex}) = \pm \frac{1}{\sqrt{C(X_1)C(X_2)}}, \tag{34}$$

что дает выражение для t_{ex} в неявном виде. Из выражения (34) следует, что максимумы и минимумы $C(X)$ должны иметь один и тот же знак. Поскольку найденный экстремум должен быть максимумом, то для получения условия роста необходимо вычислить вторую производную от $\delta N(t)$ в экстремуме:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta N(t_{ex}) &= 2N_{cr} \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial t_{ex}} \right)^2 a \left[C_2^2 \left(1 - \rho \frac{C_2}{\sqrt{C_1 C_2}} \right)^{-3} - C_1^2 \left(1 - \rho \frac{C_1}{\sqrt{C_1 C_2}} \right)^{-3} \right] = \\ &= 2N_{cr} \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial t_{ex}} \right)^2 |C_1|^{3/2} |C_2|^{3/2} a \left[\frac{\sqrt{|C_2|}}{\left(\sqrt{|C_1|} - \rho \operatorname{sign}(C_2) \sqrt{|C_2|} \right)^3} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\sqrt{|C_1|}}{\left(\sqrt{|C_2|} - \rho \operatorname{sign}(C_1) \sqrt{|C_1|} \right)^3} \right]. \end{aligned}$$

В зависимости от знака A и соотношения между $|C_1|$ и $|C_2|$ возможны варианты уравнений для t_{ex} , приведенные в табл. 3.

Таблица 3

	$A > 0$		$A < 0$	
	$C(X) \geq 0$	$C(X) \leq 0$	$C(X) \geq 0$	$C(X) \leq 0$
$\tilde{s}(t_{ex})$	$\frac{1}{\sqrt{C_1 C_2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{C_1 C_2}}$	$\frac{1}{\sqrt{C_1 C_2}}$	$\frac{1}{\sqrt{C_1 C_2}}$

Заключение

Предложенная в работе модель радиационно-стимулированного роста когерентных структур подходит для случая облучения кристаллического материала пучком с высокими, относительно характеристик материала, плотностью ($(\delta g)_{abs} \ll g_{irr}$) и энергиями ($\langle v \rangle \ll \sigma_r$) налетающих частиц. В данном случае происходит разделение процессов на быстрые, связанные с генерацией и рекомбинацией точечных дефектов, и медленные – прежде всего диффузия. При этом показано, что взаимная рекомбинация дефектов играет важную роль в образовании макроструктуры. Отличительной особенностью новой модели является рассмотрение частиц излучения как части динамической системы, что приводит к новому выражению для ограниченного источника точечных дефектов. Это позволило проанализировать рост сверхрешетки на

всем интервале времени облучения – от начальной стадии до установления динамического равновесия. Наличие ограниченного источника приводит к явлению насыщения концентраций, что в случае релаксационного режима позволяет получить высококонтрастную сверхрешетку за некоторый отрезок времени t_{ex} с последующим прекращением облучения.

Приложение 1

Для вычисления интегралов в правой части решения для $U_1 - V_1$ найдем, чему равен вспомогательный интеграл:

$$I_n = \int V_0^n dt, \quad n \geq 1. \quad (35)$$

Выполним замену переменной $b + a / (1 - Be^{-a\gamma t}) = y$, тогда интеграл примет вид

$$I_n = \int \left(b + \frac{a}{1 - Be^{-a\gamma t}} \right)^n dt = -\frac{1}{\gamma} \int y^n \frac{dy}{(y-b)(y-c)}, \quad (36)$$

где $c = b + a$. Преобразуем его следующим образом:

$$I_n = -\frac{1}{\gamma} \int y^n \frac{dy}{(y-b)(y-c)} = \frac{1}{\gamma a} \int \frac{y^n dy}{y-b} - \frac{1}{\gamma a} \int \frac{y^n dy}{y-c}.$$

Рассмотрим отдельно первое слагаемое, в котором сделаем замену $\xi = y/b$:

$$\begin{aligned} \int \frac{y^n dy}{y-b} &= b^n \int \frac{\xi^n - 1}{\xi - 1} d\xi + b^n \int \frac{dy}{y-b} = \\ &= b^n \ln|y-b| + b^n \int \sum_{s=1}^n \xi^{s-1} d\xi = b^n \ln|y-b| + \sum_{s=1}^n \frac{b^{n-s} y^s}{s}, \end{aligned}$$

где использовано выражение для суммы геометрической прогрессии.

Аналогично вычисляется и второй интеграл в (36):

$$\int \frac{y^n dy}{y-c} = c^n \ln|y-c| + \sum_{s=1}^n \frac{c^{n-s} y^s}{s}.$$

В результате имеем:

$$I_n = \frac{b^n}{\gamma a} \ln|y-b| - \frac{c^n}{\gamma a} \ln|y-c| + \frac{1}{\gamma a} \sum_{s=1}^n \left(b^{n-s} - c^{n-s} \right) \frac{y^s}{s}.$$

Первое слагаемое не содержит растущих при $t \rightarrow \infty$ слагаемых:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \ln|y-b| = \lim_{t \rightarrow \infty} \ln \left| \frac{a}{1 - Be^{-\gamma a t}} \right| = \ln|a|.$$

Второе же принимает вид

$$-\frac{c^n}{\gamma a} \ln|y - c| = -\frac{c^n}{\gamma a} \ln \left| \frac{aBe^{-\gamma at}}{1 - Be^{-\gamma at}} \right| = c^n t - \frac{c^n}{\gamma a} \ln \left| \frac{aB}{1 - Be^{-\gamma at}} \right|,$$

откуда видно, что оно содержит линейно растущий член.

Окончательно получаем следующее выражение для I_n :

$$I_n = A^n t + R_n, \tag{37}$$

где учтено, что $c = a + b = A(X, T)$, а $R_n(X, t, T)$ – остаточный член, не содержащий растущих по t слагаемых, который имеет вид

$$R_n = -\frac{A^n}{\gamma a} \ln B + \frac{c^n - b^n}{\gamma a} \ln|V_0 - b| + \sum_{s=1}^n \frac{b^{n-s} - c^{n-s}}{\gamma a s} V_0^s, \quad n \geq 1; \quad R_0 = 0.$$

Для дальнейших вычислений удобнее записать остаточный член в следующей форме:

$$R_n = -\frac{A^n}{\gamma a} \ln B + \frac{c^n - b^n}{\gamma a} \ln|V_0 - b| + \sum_{s=0}^n \frac{b^{n-1-s} - c^{n-1-s}}{\gamma a (s+1)} V_0^{s+1} - \frac{b^{-1} - c^{-1}}{\gamma a (n+1)} V_0^{n+1}. \tag{38}$$

В таком виде формула дает $R_0 = -\frac{1}{\gamma a} \ln B$, т.е. функцию только медленных переменных. Этот результат не совпадает с правильным вариантом $R_0 = 0$, так как $n = 0$ – частный случай, но позволяет использовать формулу (38) и при $n = 0$, так как выражения, содержащие интегралы, определены с точностью до функции медленных переменных.

Используя полученное для I_n выражение (37), найдем, чему равен первый интеграл в правой части $U_1 - V_1$. Для этого разложим функцию $F_v(u, v)$ в ряд Тейлора по обоим переменным:

$$\begin{aligned} \int F_v(U_0, V_0) dt &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \int V_0^i U_0^k dt = \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \frac{F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \binom{k}{j} q^{k-j} I_{i+j} = \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \frac{F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \binom{k}{j} q^{k-j} (A^{i+j} t + R_{i+j}) = \\ &= F_v \left(\frac{v^2}{A} - v^2, A \right) t + W_v(X, t, T), \end{aligned}$$

где

$$W_v(X, t, T) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} R_{i+j},$$

и учтено, что $U_0 = V_0 + q$, $q = \frac{v^2 - A^2}{A} - v^2$.

Аналогично вычисляется интеграл от $F_i(u, v)$.

Введем обозначение $\delta F(x, y) = F_i(x, y) - F_v(x, y)$.

Поскольку в формулах для решений в первом порядке под интегралами стоит разность $F_i(U_0, V_0) - F_v(U_0, V_0)$, то удобнее сразу вычислить, чему равна величина $\delta W = W_i - W_v$:

$$\begin{aligned} \delta W &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_i^{[k,i]}(0,0) - F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \left[-\frac{A^{i+j}}{\gamma a} \ln B + \right. \\ &+ \left. \frac{c^{i+j} - b^{i+j}}{\gamma a} \ln|V_0 - b| + \sum_{s=0}^{i+j} \frac{b^{i+j-1-s} - c^{i+j-1-s}}{\gamma a(s+1)} V_0^{s+1} - \frac{b^{-1} - c^{-1}}{\gamma a(i+j+1)} V_0^{i+j+1} \right] = \\ &= w_0 \ln B + w_1 \ln|V_0 - b| + \hat{S}_1 V_0^{s+1} - \hat{S}_0 V_0^{i+j+1}, \end{aligned}$$

где

$$w_0(X, T) = -\frac{\delta F(q+A, A)}{\gamma a}, \quad w_1(X, T) = \frac{\delta F(q+A, A) - \delta F(q+b, b)}{\gamma a},$$

$$\hat{S}_1 V_0^{s+1} = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_i^{[k,i]}(0,0) - F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \sum_{s=0}^{i+j} \frac{b^{i+j-1-s} - c^{i+j-1-s}}{\gamma a(s+1)} V_0^{s+1},$$

$$\hat{S}_0 V_0^{i+j+1} = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_i^{[k,i]}(0,0) - F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \frac{b^{-1} - c^{-1}}{\gamma a(i+j+1)} V_0^{i+j+1}.$$

Приложение 2

Далее во всех выкладках полагается $n \geq 1$.

Рассмотрим вычисление интеграла следующего типа:

$$Q_1(n) = \int \frac{(1 - B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} \Delta_s [C(X)V_0^n(X, \zeta)] d\zeta. \quad (39)$$

Как видно из (39), оператор Лапласа нельзя вынести за знак интеграла. Однако этого можно добиться, выполнив замену переменной $X \rightarrow X'$ в функциях, на которые действует оператор Лапласа:

$$\int \frac{(1 - B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} \Delta_s [C(X)V_0^n(X, \zeta)] d\zeta =$$

$$= \Delta'_s \left[C(X') \int \frac{(1-B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} V_0^n(X', \zeta) d\zeta \right]_{X'=X}.$$

Раскрывая скобки под интегралом и вынося коэффициенты, не зависящие от ζ , получаем следующее выражение:

$$Q_1(n) = \Delta_s [C(X)J_2(n, X, \zeta)] - 2B(X)\Delta_s [C(X)J_1(n, X, \zeta)] + B^2(X)\Delta_s [C(X)J_0(n, X, \zeta)],$$

где

$$J_k(n) = \int \frac{V_0^n}{\zeta^k} d\zeta.$$

Поскольку целью решения уравнения (11) является получение условия отсутствия секулярных членов, а не само решение для V_1 , то во всех интегралах достаточно вычислить только линейные по t ($\ln \zeta$) члены, поэтому везде после знака « \Rightarrow » будут стоять выражения с точностью до остаточного члена, не растущего по t .

Прямое вычисление $J_k(n)$ приводит к таким выражениям с точностью до членов, не растущих по t :

$$J_0(n) = 0, \quad J_1(n) = A^n(X) \ln \zeta, \quad J_2(n) = na(X)A^{n-1}(X)B(X) \ln \zeta.$$

В итоге получаем выражение

$$Q_1(n) = \Delta_s [nC(X)a(X)A^{n-1}(X)B(X)] \ln \zeta - 2B(X)\Delta_s [C(X)A^n(X)] \ln \zeta.$$

Вычисление интегралов $Q_2(n)$ и Q_3 аналогично приведенному выше:

$$\begin{aligned} Q_6(n) &= \int \frac{(1-B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} V_0^n(X, \zeta) d\zeta = J_2 - 2B(X)J_1 = \\ &= na(X)A^{n-1}(X)B(X) - 2B(X)A^n(X), \\ Q_2(n) &= \int \frac{(1-B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(X, \zeta) \Delta_s [C(X)V_0^n(X, \zeta)] d\zeta = \\ &= \Delta'_s \left[C(X') \int \frac{(1-B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} \left(b(X) - \frac{a(X)}{1-B(X)\zeta} \right) V_0^n(X', \zeta) d\zeta \right]_{X'=X} = \\ &= A(X)\Delta_s [C(x)na(X)A^{n-1}(X)B(X)] - B(X)[b(X) + A(X)]\Delta_s [C(x)A^n], \\ Q_3 &= \int \frac{(1-B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(X, \zeta) \Delta_s [C(X) \ln |V_0(X, \zeta) - b(X)|] d\zeta = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int \frac{(1-B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(X, \zeta) \Delta_s [C(X) \ln a(X) - C(X) \ln |1-B(X)\zeta|] d\zeta = \\
 &= \Delta_s [C(X) \ln a(X)] (J_2 - 2BJ_1) - \\
 &= -\Delta_s C(X) \int \frac{(1-B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(X, \zeta) \ln |1-B(X)\zeta| d\zeta + \\
 &+ [C(X) \Delta_s B(X) + 2\nabla C(X) \nabla B(X)] J_1 = \\
 &= A(X) \Delta_s [C(X) B(X)] - [A(X) + b(X)] \Delta_s [C(x) \ln a(X)] B(X), \\
 Q_4 &= \int \frac{(1-B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} (1-V_0(X, \zeta)) \int V_0(X, Y, Z', \zeta) dZ' d\zeta = \\
 &= \iint \frac{(1-B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} \left(1-b(X) - \frac{a(X)}{1-B(X)\zeta} \right) V_0(X, Y, Z', \zeta) d\zeta dZ' = \\
 &= [1-A(X)] \int a(X') B(X') dZ' + [A(X) + b(X) - 2] \int A(X') dZ' B(X), \\
 Q_5 &= \int V_0^n(X, \zeta) d\zeta = 0, \\
 Q_7 &= \int \frac{(1-B(X)\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(X, \zeta) \ln |V_0(X, \zeta) - b(X)| d\zeta = \\
 &= A(X) - (A(X) + b(X)) \ln a(X).
 \end{aligned}$$

Приложение 3

Вычислим интегралы от сумм \hat{S}_1 , \hat{S}_0 и разложения $F_v(U_0, V_0)$ в ряд Тейлора в решении в первом порядке.

Рассмотрим сначала подробно интеграл от \hat{S}_1 (пределы и штрих у переменной интегрирования опущены):

$$\begin{aligned}
 &\int \frac{(1-B\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\zeta) \Delta_s \hat{S}_1 V_0^{s+1}(\zeta) d\zeta = \\
 &= \int \frac{(1-B\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\zeta) \Delta_s \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \times \\
 &\times \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \sum_{s=0}^{i+j} \frac{b^{i+j-1-s} - c^{i+j-1-s}}{\gamma a(s+1)} V_0^{s+1}(\zeta) d\zeta =
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \sum_{s=0}^{i+j} \int \frac{(1-B\xi)^2}{\xi^2} V_0 \Delta_s \left[C_{ikjs} V_0^{s+1}(\xi) \right] d\xi = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \sum_{s=0}^{i+j} Q_2(s+1) = \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \sum_{s=0}^{i+j} \left[A \Delta_s \left(C_{ijks} (s+1) a A^s B \right) - (b+A) \Delta_s \left(C_{ijks} A^{s+1} \right) \right] = \\
 &= A \Delta_s (aB \Sigma_1) - B(b+A) \Delta_s \Sigma_2,
 \end{aligned}$$

где C_{ijks} – промежуточное обозначение всех коэффициентов внутри сумм.

Вычислим отдельно суммы Σ_1, Σ_2 :

$$\begin{aligned}
 \Sigma_1 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \sum_{s=0}^{i+j} \frac{b^{i+j-1-s} - A^{i+j-1-s}}{\gamma a} A^s = \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \left[\frac{b^{i+j+1}}{\gamma a} \sum_{s=0}^{i+j} \left(\frac{A}{b} \right)^s - \frac{A^{i+j+1}}{\gamma a} \sum_{s=0}^{i+j} \right] = \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \left[\frac{A^{i+j} - b^{i+j}}{\gamma a^2} - \frac{1}{\gamma a} \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial A} A^{i+j+1} \right] = \\
 &= \frac{\delta F(q+A, A) - \delta F(q+b, b)}{\gamma a^2} - \frac{1}{\gamma a} \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial A} [A \delta F(q+A, A)], \\
 \Sigma_2 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \sum_{s=0}^{i+j} \frac{b^{i+j-1-s} - A^{i+j-1-s}}{\gamma a (s+1)} A^{s+1} = \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \sum_{s=0}^{i+j} \left[\frac{b^{i+j-1-s}}{\gamma a} \frac{A^{s+1}}{s+1} - \frac{A^{i+j}}{\gamma a} \frac{1}{s+1} \right] = \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \left[\frac{b^{i+j-1}}{\gamma a} \sum_{s=0}^{i+j} b^{-s} \int A^s dA - \frac{A^{i+j}}{\gamma a} \int \sum_{s=0}^{i+j} \xi^s d\xi \Big|_{\xi=1} \right] = \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \left[\frac{1}{\gamma a} \int \frac{b^{i+j} - A^{i+j}}{b-A} dA - \right. \\
 &\left. - \frac{1}{\gamma a} \int \frac{A^{i+j} - (A\xi)^{i+j}}{1-\xi} d\xi \Big|_{\xi=1} \right] = \frac{1}{\gamma a} \int \frac{\delta F(q+b, b) - \delta F(q+A, A)}{b-A} dA - \\
 &\quad - \frac{1}{\gamma a} \int \frac{\delta F(q+A, A) - \delta F(q+A\xi, A\xi)}{1-\xi} d\xi \Big|_{\xi=1}.
 \end{aligned}$$

Аналогично вычисляются интегралы от \hat{S}_0 :

$$\begin{aligned} & \int \frac{(1-B\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\zeta) \Delta_s \hat{S}_0 V_0^{s+1}(\zeta) d\zeta = \int \frac{(1-B\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\zeta) \Delta_s \times \\ & \times \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \frac{b^{-1}-A^{-1}}{\gamma a(i+j+1)} V_0^{i+j+1}(\zeta) d\zeta = \\ & = A\Delta_s \left[\sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \binom{k}{j} q^{k-j} \frac{b^{-1}-A^{-1}}{\gamma} A^{i+j} B \right] - \\ & - B(b+A)\Delta_s \left[\sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \binom{k}{j} q^{k-j} \frac{b^{-1}-A^{-1}}{\gamma(i+j+1)} A^{i+j+1} \right] = \\ & = A\Delta_s \left[\frac{b^{-1}-A^{-1}}{\gamma} \delta F(q+A, A) B \right] - B(b+A)\Delta_s \left[\frac{b^{-1}-A^{-1}}{\gamma a} \int \delta F(q+A, A) dA \right], \end{aligned}$$

и от $F_v(U_0, V_0)$:

$$\begin{aligned} & \int \frac{(1-B\zeta)^2}{\zeta^2} \Delta_s F_v(U_0(\zeta), V_0(\zeta)) d\zeta = \\ & = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \int \frac{(1-B\zeta)^2}{\zeta^2} \Delta_s \left[\frac{F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \binom{k}{j} q^{k-j} V_0^{i+j}(\zeta) \right] d\zeta = \\ & = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k Q_1(i+j) = \Delta_s \left[a \frac{\partial}{\partial A} F_v(q+A, A) B \right] - 2B\Delta_s F_v(q+A, A). \end{aligned}$$

Приложение 4

В табл. 4 приведены значения параметров, которые использовались при построении графиков.

Таблица 4

№	μ_1	μ_2	g^0	γ	t_0	λ_i	N_c	c_0	K_0	ω_0
1.1	0,6	0,8	0,0165	0,6	5	4,3856	1	5,487	1,0782	3,75
1.2	1,7	1,0	1	2,1	5	1,3	1	1,139	1,7627	3,75
2.1	1,2	0,8	0,03	1,6	-5	0,22	1	0,250	1,0197	4
3.1	1,1	1,4	1,372	4	-5	489,0061	1	17854,042	1,3041	41
3.3	2,9	3,1	0,12	0,3	-5	0,16	1	0,239	1,4308	3,6
4.1	4,1	2,9	0,0179	1,95	0,3	16,0037	1	-13,825	1,3713	4
4.3	6,1	2,7	1,3	11,2	-5	1,25	1	-380,770	0,5887	4

Список литературы

1. Ghoniem N. M., Walgraef D., Zinkle S. J. Theory and experiment of nanostructure self-organization in irradiated materials // *Journal of computer-aided materials design*. 2001. Vol. 8, № 1. P. 1–38.
2. Liu L. [et al.]. High-flux He⁺ irradiation effects on surface damages of tungsten under ITER relevant conditions // *Journal of Nuclear Materials*. 2016. Vol. 471. P. 1–7.
3. Rudenko A. [et al.]. Spontaneous periodic ordering on the surface and in the bulk of dielectrics irradiated by ultrafast laser: A shared electromagnetic origin // *Scientific reports*. 2017. Vol. 7, № 1. P. 1–14.
4. Журавлев В. М., Золотовский И. О., Морозов В. М. Об условиях возникновения регулярных структур в конденсированных средах под действием внешнего излучения // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. 2015. № 3. С. 144–162.
5. Журавлев В. М. [и др.]. Лазерно-индуцированная генерация поверхностных периодических структур в средах с нелинейной диффузией // *Физика твердого тела*. 2017. Т. 59, № 12. С. 2291–2298.
6. Журавлев В. М. [и др.]. Усиление интерференционных структур в среде с нелинейной диффузией // *Прикладная фотоника*. 2015. Т. 2, № 4. С. 358–375.
7. Gusev M. N., Maksimkin O. P., Tivanova O. V. Correlation of yield stress and microhardness in 08Cr16Ni1Mo3 stainless steel irradiated to high dose in the BN-350 fast reactor // *Journal of nuclear materials*. 2006. Vol. 359, № 3. P. 258–262.
8. Alsabbagh A., Sarkar A., Miller B., Burns J. [et al.]. Microstructure and mechanical behavior of neutron irradiated ultrafine grained ferritic steel // *Materials Science and Engineering A*. 2014. Vol. 615. P. 128–138.
9. Ertugrul R., Tataroglu A. Effects of gamma irradiation on electrical parameters of metal–insulator–semiconductor structure with silicon nitride interfacial insulator layer // *Radiation Effects and Defects in Solids*. 2014. Vol. 169, № 9. P. 791–799.
10. Short M. P. [et al.]. Modeling injected interstitial effects on void swelling in self-ion irradiation experiments // *Journal of Nuclear Materials*. 2016. Vol. 471. P. 200–207.

References

1. Ghoniem N.M., Walgraef D., Zinkle S.J. Theory and experiment of nanostructure self-organization in irradiated materials. *Journal of computer-aided materials design*. 2001;8(1):1–38.
2. Liu L. [et al.]. High-flux He⁺ irradiation effects on surface damages of tungsten under ITER relevant conditions. *Journal of Nuclear Materials*. 2016;471:1–7.
3. Rudenko A. [et al.]. Spontaneous periodic ordering on the surface and in the bulk of dielectrics irradiated by ultrafast laser: A shared electromagnetic origin. *Scientific reports*. 2017;7(1):1–14.
4. Zhuravlev V.M., Zolotovskiy I.O., Morozov V.M. On the conditions for the appearance of regular structures in condensed media under the action of external radiation. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2015;(3):144–162. (In Russ.)
5. Zhuravlev V.M. [et al.]. Laser-induced generation of surface periodic structures in media with nonlinear diffusion. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*. 2017;59(12):2291–2298. (In Russ.)
6. Zhuravlev V.M. [et al.]. Enhancement of interference structures in a medium with nonlinear diffusion. *Prikladnaya fotonika = Applied photonics*. 2015;2(4):358–375. (In Russ.)
7. Gusev M.N., Maksimkin O.P., Tivanova O.V. Correlation of yield stress and microhardness in 08Cr16Ni1Mo3 stainless steel irradiated to high dose in the BN-350 fast reactor. *Journal of nuclear materials*. 2006;359(3):258–262.

8. Alsabbagh A., Sarkar A., Miller B., Burns J. [et al.]. Microstructure and mechanical behavior of neutron irradiated ultrafine grained ferritic steel. *Materials Science and Engineering A*. 2014;615:128–138.
9. Ertugrul R., Tataroglu A. Effects of gamma irradiation on electrical parameters of metal–insulator–semiconductor structure with silicon nitride interfacial insulator layer. *Radiation Effects and Defects in Solids*. 2014;169(9):791–799.
10. Short M.P. [et al.]. Modeling injected interstitial effects on void swelling in self-ion irradiation experiments. *Journal of Nuclear Materials*. 2016;471:200–207.

Информация об авторах / Information about the authors

Виталий Михайлович Морозов

младший научный сотрудник,
Самарский национальный
исследовательский университет (Россия,
г. Самара, Московское шоссе, 34)

Vitaliy M. Morozov

Junior researcher, Samara National
Research University (34 Moskovskoye
highway, Samara, Russia)

E-mail: aielcr@rambler.ru

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 17.06.2022

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 07.07.2022

Принята к публикации / Accepted 15.07.2022

Уважаемые читатели!

Для гарантированного и своевременного получения журнала «**Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки**» рекомендуем вам оформить подписку.

Журнал выходит 4 раза в год. Научные специальности журнала:
01.01.02 Дифференциальные уравнения, динамические системы и оптимальное управление
01.01.07 Вычислительная математика
01.01.09 Дискретная математика и математическая кибернетика
01.04.02 Теоретическая физика
01.04.05 Оптика
01.04.10 Физика полупроводников
01.04.15 Физика и технология наноструктур, атомная и молекулярная физика
01.04.16 Физика атомного ядра и элементарных частиц

Стоимость одного номера журнала – 500 руб. 00 коп.
Для оформления подписки через редакцию необходимо заполнить и отправить заявку в редакцию журнала: факс/тел. +7 (8412) 64-32-89. E-mail: volgavuz@pnzgu.ru

Подписку можно также оформить по объединенному каталогу «Пресса России» тематические разделы «Научно-технические издания. Известия РАН. Известия ВУЗов». Подписной индекс – 82413.

ЗАЯВКА

Прошу оформить подписку на журнал «Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки» на 20__ г.

№ 1 – _____ шт., № 2 – _____ шт., № 3 – _____ шт., № 4 – _____ шт.

Наименование организации (полное) _____

ИНН _____ КПП _____

Почтовый индекс _____

Республика, край, область _____

Город (населенный пункт) _____

Улица _____ Дом _____

Корпус _____ Офис _____

ФИО ответственного _____

Должность _____

Тел. _____ Факс _____ E-mail _____

Руководитель предприятия _____

(подпись)

(ФИО)

Дата « ____ » _____ 20__ г.