

ISSN 2949-5083 (print) ISSN 2949-5067 (online)



естник

ГОСУДАРСТВЕННОГО ЧНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

Серия

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА

Vestnik Gosudarstvennogo universiteta prosveshcheniya. Seriya: Fizika-Matematika

BULLETIN OF STATE UNIVERSITY OF EDUCATION. SERIES: PHYSICS AND MATHEMATICS

ЭФФЕКТИВНОЕ СНИЖЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ НЕРАВНОМЕРНОСТИ В ОБОЛОЧЕЧНЫХ ЛОПАТКАХ ТУРБИН

НОВАЯ ФОРМУЛИРОВКА ТЕОРЕМЫ ЗАПАЗДЫВАНИЯ ИЗ КУРСА ОПЕРАЦИОННОГО ИСЧИСЛЕНИЯ





ВЕСТНИК ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

ISSN 2949-5083 (print)

2025/ № 1

ISSN 2949-5067 (online)

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА

Рецензируемый научный журнал. Основан в 1998 г.

Журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика» включён в «Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук» Высшей аттестационной комиссии при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации (см.: Список журналов на сайте ВАК при Минобрнауки России) по следующим научным специальностям: 1.3.3. – Теоретическая физика (физико-математические науки); 1.3.8. – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

The peer-reviewed journal was founded in 1998

"Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics" is included by the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation into "The List of reviewed academic journals and periodicals recommended for publishing in corresponding series basic research thesis results for a Ph.D. Candidate or Doctorate Degree" (See: the online List of journals at the site of the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation) on the following scientific specialities: 1.3.3. – Theoretical physics (physical-mathematical sciences); 1.3.8. – Physics of the condensed state (physical-mathematical sciences) (See: the online List of journals at the site of the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation).

ISSN 2949-5083 (print) 2025 / № 1 (ISSN 2949-5067 (online) PHYSICS AND MATHEMATICS BULLETIN

OF FEDERAL STATE UNIVERSITY OF EDUCATION

Учредитель журнала

«Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика»

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

Государственный университет просвещения

— Выходит 4 раза в год ———

Редакционная коллегия

Главный редактор:

Чигринов В. Г. — д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения, Гонконгский университет науки и технологий (Китай)

Заместитель главного редактора:

Кузнецов М. М. — д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения

Ответственный секретарь:

Чукаловская Е. М. – Государственный университет просвещения

Члены редакционной коллегии:

Беляев В. В. – д. т. н., проф., Государственный университет просвещения;

Боголюбов Н. Н. – д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

Бугримов А. Л. – д. т. н., проф., Российский государственный университет имени А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство);

Гладков С. О. – д. ф.-м. н., проф., Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет);

Емельяненко А. В. – д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

Жачкин В. А. – д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения;

Калашников Е. В. — д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения;

Осипов М. А. – д. ф.-м. н., проф., Университет Стратклайд (Великобритания);

Рыбаков Ю. П., – д. ф.-м. н., проф., Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы;

Чаругин В. М. — д. ф.-м. н., проф., Московский педагогический государственный университет;

ISSN 2949-5083 (print) ISSN 2949-5067 (online)

Рецензируемый научный журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика» публикует статьи по математическим проблемам термодинамики, кинетики и статистической физики; теории конденсированного состояния классических и квантовых, макроскопических и микроскопических систем; изучению различных состояний вещества и физических явлений в них; статистической физике и кинетической теории равновесных и неравновесных систем; теоретической теории равновесных и неравновесных систем; изучению экспериментальному исследованию физических свойств неупорядоченных неорганических систем; изучению экспериментального состояния конденсированных веществ и фазовых переходов в них. Журнал адресован учёным, докторантам, аспирантам и всем, интересующимся достижениями физико-математических наук.

Журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия «Физика-Математика» зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия. Регистрационное свидетельство ПИ № ФС 77-73344.

Индекс серии «Физика-математика» по Объединённому каталогу «Пресса России» 40723

Журнал включён в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), имеет полнотекстовую сетевую версию в интернете на платформе Научной электронной библиотеки (www.elibrary.ru), с августа 2017 г. на платформе Научной электронной библиотеки «КиберЛенинка» (www.cyberleninka.ru), а также на сайте журнала «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика» (www.physmathmgou.ru).

При цитировании ссылка на конкретную серию «Вестника Государственного университета просвещения» обязательна. Публикация материалов осуществляется в соответствии с лицензией Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

Ответственность за содержание статей несут авторы. Мнение автора может не совпадать с точкой зрения редколлегии серии. Рукописи не возвращаются.

Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. — 2025. — № 1. — 78 с.

© Государственный университет просвещения, 2025.

Адрес редакции:

г. Москва, ул. Радио, д. 10А, стр. 2, офис 98 тел.: (495) 780-09-42 (доб. 6101) e-mail: sj@quppros.ru; сайт: www.physmathmgou.ru.

Founder of journal "Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics"

Federal State University of Education

____ Issued 4 times a year _____

Editorial board

Editor-in-chief:

V. G. Chigrinov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Federal University of Education, Hong Kong University of Science and Technology (China)

Deputy editor-in-chief:

M. M. Kuznetsov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Federal State University of Education

Executive secretary:

E. M. Chukalovskaya – Federal State University of Education

Members of Editorial Board:

V. V. Belyaev – Dr. Sci. (Engineering), Professor, Federal State University of Education;

N. N. Bogolyubov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Lomonosov Moscow State University;

A. L. Bugrimov – Dr. Sci. (Engineering), Professor, The Kosygin State University of Russia;

S. O. Gladkov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Moscow Aviation Institute (National Research University);

A. V. Emelyanenko – Dr. Sci. (Physics and Mathematics),, Professor, Lomonosov Moscow State University;

V. A. Zhachkin – Dr. Sci. (Physics and Mathematics),, Professor, Federal State University of Education;

E. V. Kalashnikov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Federal State University of Education;

M. A. Osipov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics),, Professor, University of Strathclyde (Glasgow, UK);

Yu. P. Rybakov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, People's Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba;

V. M. Charugin – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Moscow State Pedagogical University;

ISSN 2949-5083 (print) ISSN 2949-5067 (online)

The reviewed scientific journal "Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics" publishes articles on mathematical problems of thermodynamics, kinetics and statistical physics; the theory of the condensed state of classical and quantum, macroscopic and microscopic systems; the study of various states of substance and physical phenomena in them; statistical physics and the kinetic theory of equilibrium and non-equilibrium systems; theoretical and experimental research of physical features of disordered inorganic systems; the study of the experimental state of condensed substances and phase transitions in them. The journal is addressed to scientists, doctoral students, PhD students and everyone interested in the achievements of physical and mathematical sciences.

The series "Physics and Mathematics" of the Bulletin of Federal State University of Education is registered in Federal service on supervision of legislation observance in sphere of mass communications and cultural heritage protection. The registration certificate $\Pi I \ M^{\circ} \ \Phi C \ 77 - 73344$.

Index series "Physics and Mathematics" according to the union catalog "Press of Russia" 40723

The journal is included into the database of the Russian Science Citation Index, and its full texts are available through scientific electronic libraries "eLibrary" (www.elibrary.ru) and "CyberLeninka" (since August 2017; www.cyberleninka.ru), as well as on the site of "Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics" (www. physmathmgou.ru).

At citing the reference to a particular series of "Bulletin of State University of Education" is obligatory. Scientific publication of materials is carried out in accordance with the license of Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

The authors bear all responsibility for the content of their papers. The opinion of the Editorial Board of the series does not necessarily coincide with that of the author Manuscripts are not returned.

Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics. $-2025. - N^{\circ} 1. - 78 p.$

© Federal State University of Education, 2025.

The Editorial Board address:

ulitsa Radio 10A build.2, office 98, Moscow, Russia Phone: (495) 780-09-42 (add. 6101) e-mail: sj@guppros.ru; site: www.physmathmgou.ru.

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Андрианов И. К., Чепурнова Е. К. Эффективное снижение
температурной неравномерности в оболочечных лопатках турбин6
Вековищев М. П., Кирсанов Е. А. Вязкоупругость
жидкокристаллического раствора синтетического полипептида
в рамках структурной модели 17
Дорохова О. Е. , Парёнкина В. И., Радаев С. Ю., Уварова Н. И.
Нелинейные эффекты термофореза одиночной частицы в среде
с температурным градиентом 28
Иванов Ю П Аблеев А. Н. Шумяниева В. В. Шумов И П
Почнов 10. д., Полесо 11. 11., Шуллицсой Б. Б., Шулов И. д.,
Зиборов В. С., Неведрова Е. Д., Виноградова А. В., Иванова И. А.,
Зиборов В. С., Неведрова Е. Д., Виноградова А. В., Иванова И. А., Ваулин Н. В., Лебедев Д. В., Букатин А. С., Мухин И. С., Сараева И. Н.,
Зиборов В. С., Неведрова Е. Д., Виноградова А. В., Иванова И. А., Ваулин Н. В., Лебедев Д. В., Букатин А. С., Мухин И. С., Сараева И. Н., Апель П. Ю., Юшков Е. С., Арчаков А. И. Использование искусственных
Зиборов В. С., Неведрова Е. Д., Виноградова А. В., Иванова И. А., Ваулин Н. В., Лебедев Д. В., Букатин А. С., Мухин И. С., Сараева И. Н., Апель П. Ю., Юшков Е. С., Арчаков А. И. Использование искусственных твердотельных пор для измерения каталитической активности
Зиборов В. С., Неведрова Е. Д., Виноградова А. В., Иванова И. А., Ваулин Н. В., Лебедев Д. В., Букатин А. С., Мухин И. С., Сараева И. Н., Апель П. Ю., Юшков Е. С., Арчаков А. И. Использование искусственных твердотельных пор для измерения каталитической активности отдельных молекул пероксидазы хрена
Зиборов В. С., Неведрова Е. Д., Виноградова А. В., Иванова И. А., Ваулин Н. В., Лебедев Д. В., Букатин А. С., Мухин И. С., Сараева И. Н., Апель П. Ю., Юшков Е. С., Арчаков А. И. Использование искусственных твердотельных пор для измерения каталитической активности отдельных молекул пероксидазы хрена
Зиборов В. С., Неведрова Е. Д., Виноградова А. В., Иванова И. А., Ваулин Н. В., Лебедев Д. В., Букатин А. С., Мухин И. С., Сараева И. Н., Апель П. Ю., Юшков Е. С., Арчаков А. И. Использование искусственных твердотельных пор для измерения каталитической активности отдельных молекул пероксидазы хрена
Зиборов В. С., Неведрова Е. Д., Виноградова А. В., Иванова И. А., Ваулин Н. В., Лебедев Д. В., Букатин А. С., Мухин И. С., Сараева И. Н., Апель П. Ю., Юшков Е. С., Арчаков А. И. Использование искусственных твердотельных пор для измерения каталитической активности отдельных молекул пероксидазы хрена

МАТЕМАТИКА

Оникийчук В. Н., Оникийчук И. В. Новая формулировка теоремы	
запаздывания из курса операционного исчисления	66

CONTENTS

PHYSICS

<i>I. Andrianov, E. Chepurnova.</i> Effective reduction of temperature unevenness in turbine shell blades
<i>M. Vekovishchev, E. Kirsanov.</i> Viscoelasticity of liguid crystal solution of synthetic polypeptide within the framework of the structural model 17
O. <i>Dorokhova, V. Parenkina, S. Radaev, N. Uvarova.</i> Nonlinear effects of thermophoresis of a single particle in a medium with a temperature gradient
 Yu. Ivanov, A. Ableev, V. Shumyantseva, I. Shumov, V. Ziborov, E. Nevedrova, A. Vinogradova, I. Ivanova, N. Vaulin, D. Lebedev, A. Bukatin, I. Mukhin, I. Saraeva, P. Apel, E. Yushkov, A. Archakov. The use of artificial solid-state pores for measurement of catalytic activity of individual molecules of horseradish peroxidase

M. Kuznetsov, D. Satyukov, Y. Kuleshova, E. Vladimirova, G. Kuznetsov, R. Halikov. Analytical properties of distribution functions for relative velocities of molecules in a shock-compressed binary mixture of gases 52

MATHEMATICS

ФИЗИКА

Научная статья УДК 620.22 DOI: 10.18384/2949-5067-2025-1-6-16

ЭФФЕКТИВНОЕ СНИЖЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ НЕРАВНОМЕРНОСТИ В ОБОЛОЧЕЧНЫХ ЛОПАТКАХ ТУРБИН

Андрианов И. К.*, Чепурнова Е. К.

Комсомольский-на-Амуре государственный университет, г. Комсомольск-на-Амуре, Российская Федерация

*Корреспондирующий автор, e-mail: ivan_andrianov_90@mail.ru

Поступила в редакцию 05.02.2025 После доработки 12.02.2025 Принята к публикации 14.02.2025

Аннотация

Цель. Снижение температурной неравномерности в турбинной лопатке оболочечного типа в условиях подвода и отвода тепла.

Процедура и методы. Проведена математическая постановка задачи о снижении температурной неравномерности оболочки с помощью системы криволинейных каналов теплоотвода. Построение математической модели проводилось с помощью условия неразрывности охлаждающего потока в канале, данных об очаге теплового нагружения, граничных условиях на входе и выходе в канал охлаждения, ограничениях на высоту каналов с применением интерполяционных полиномов.

Результаты. Рассчитаны переменная высота и траектории каналов теплоотвода при заданном неравномерном температурном поле, позволяющие интенсифицировать охлаждение в наиболее термонагруженной области оболочки.

Теоретическая и практическая значимость заключается в возможности применения предложенной модели для разработки формы дефлектора с криволинейными каналами для лопаток газотурбинного двигателя с внутренней системой охлаждения.

Ключевые слова: газовая среда, дефлектор, канал охлаждения, температурная неравномерность, теплоотвод

Благодарности и источники финансирования. Исследование выполнено в рамках гранта Российского научного фонда № 22-79-10114 «Разработка системы диагностирования

[©] СС ВҮ Андрианов И. К., Чепурнова Е. К., 2025.

повреждений турбинных лопаток и способа оптимизации теплоотвода в условиях термической усталости» (https://rscf.ru/project/22-79-10114/).

Для цитирования.

Андрианов И. К., Чепурнова Е. К. Эффективное снижение температурной неравномерности в оболочечных лопатках турбин // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2025. № 1. С.6–16. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-6-16

Original research article

EFFECTIVE REDUCTION OF TEMPERATURE UNEVENNESS IN TURBINE SHELL BLADES

I. Andrianov*, E. Chepurnova

Komsomolsk-na-Amure State University, Komsomolsk-on-Amur, Russian Federation *Corresponding author, e-mail: ivan_andrianov_90@mail.ru

Received by the editorial office 05.02.2025 Revised by the author 12.02.2025 Accepted for publication 14.02.2025

Abstract

Aim. Reduction of temperature unevenness in a shell-type turbine blade under conditions of heat supply and removal.

Methodology. The mathematical formulation of the problem of reducing the temperature unevenness of the shell using a system of curved heat sink channels is carried out. The mathematical model was constructed using the condition of continuity of the cooling flow in the channel, data on the source of thermal stress, boundary conditions at the entrance and exit to the cooling channel, restrictions on the height of the channels using interpolation polynomials.

Results. The variable height and trajectories of the heat sink channels are calculated for a given uneven temperature field, allowing to intensify cooling in the most thermally loaded area of the shell. **Research implications.** The theoretical and practical significance lies in the possibility of using the proposed model to develop a deflector shape with curved channels for blades of a gas turbine engine with an internal cooling system.

Keywords: gas medium, deflector, cooling channel, temperature unevenness, heat sink

Acknowledgments: The research was carried out within the framework of the Russian Science Foundation grant No. 22-79-10114 "Development of a system for diagnosing damage to turbine blades and a method for optimizing heat sink in conditions of thermal fatigue" (https://rscf.ru/project/22-79-10114/).

For citation:

Andrianov, I. K. & Chepurnova, E. K. (2025). Effective reduction of temperature unevenness in turbine shell blades. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 1, 6–16. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-6-16

Введение

На сегодняшний день теплофизические процессы достаточно широко распространены в различных областях науки и техники. Наиболее актуальным

、7 丿

вопрос исследования теплообменных процессов представляется для области турбомашиностроения, где одними из наиболее нагруженных элементов оболочечные газотурбинного являются лопатки двигателя, которые подвергаются высокотемпературному воздействию. Уже на протяжении многих лет ключевым направлением развития данной сферы является повышение рабочих температур, что позволяет существенно повысить производительность турбины, увеличить коэффициент полезного действия, однако неизбежно приводит к появлению различного рода проблем, одна из которых связана с перегревом и температурной неравномерностью вследствие неравномерного тепла. Негативное влияние температурной неравномерности подвода обусловлено тем, что она может привести к появлению температурных напряжений, а длительное высокотемпературное воздействие может способствовать перегреву и развитию термоусталостных трещин.

Согласно анализу современного состояния вопроса исследования проблема оценки теплового состояния оболочек при различных температурных условиях нагружения исследовалась достаточно широко. Некоторые вопросы теплового анализа и оценки теплофизических характеристик материалов оболочек рассматривались в работах [1–3]. Кроме того, достаточно часто решение задач теплопереноса сопряжено с исследованием вопросов газодинамики. Задачи численного и аналитического расчёта течения газовых сред рассматривались в трудах [4; 5], некоторые подходы к оценке переноса тепла в каналах постоянного сечения были представлены в работах [6; 7]. Вопросы моделирования теплопереноса и газодинамики в турбинных лопатках рассматривались в работах [8; 9].

Применительно к лопаткам оболочечного типа для снижения температурной неравномерности может быть использована система внутреннего охлаждения, в этом случае температурная неравномерность на поверхности оболочки компенсируется неравномерным отводом тепла. При этом внутреннее охлаждение является сегодня одним из основных способов теплоотвода в лопатках газотурбинного двигателя. В последние годы получили распространение различные методы защиты от высокотемпературного воздействия, которое способствует развитию термоусталостных трещин [10; 11], а также подходы для повышения эффективности охлаждения [12-16]. При этом эффективная тепловая защита включает в себя не только охлаждение, но и применение термобарьерных покрытий. Повышение термопрочностного ресурса оболочек лопаток во многом зависит от использования различных покрытий, некоторые из которых рассматривались в работах [17; 18]. Вопросы оптимизации теплоотвода, геометрии оболочки лопатки с учётом многослойных покрытий исследовались в трудах [19; 20].

Безусловно, системы внутреннего охлаждения и теплозащитные покрытия позволяют существенно снизить тепловое состояние лопатки. Однако малоисследованной остаётся проблема снижения температурной неравномерности. В рамках данного исследования требовалось провести

постановку задачи о снижении температурной неравномерности в теле оболочечной лопатки за счёт отвода тепла с помощью модели криволинейных каналов охлаждения на основании температурных линий уровня. На практике исследуемый вопрос может быть реализован за счёт дефлекторных вставок с рёберными структурами, размещаемых в полости тела турбинной лопатки. Криволинейная поверхность дефлектора и система рёбер с нелинейной траекторией позволяют варьировать высоту каналов теплоотвода.

Согласно задаче исследования требуется построить такую траекторию каналов охлаждения переменной высоты, при которой будет снижена температурная неравномерность оболочки. Данный подход можно реализовать путём уменьшения высоты каналов охлаждения в области с наибольшим нагревом и увеличения высоты каналов в менее нагруженных областях, что позволит повысить отвод тепла за счёт повышения скорости течения газа. Построение модели будем проводить при следующих допущениях: теплообмен является установившимся, теплофизические параметры оцениваются с помощью осреднённых величин, температура охлаждающей газовой среды в канале принимается постоянной; температурное поле на поверхности нагрева оболочки лопатки принимается известным.

Методика исследования

Рассмотрим систему каналов отвода тепла в системе координат $0x_1x_2$. Ширина каналов считается заданной и постоянной величиной. Высота каналов является переменной и неизвестной величиной. Но в начале и в конце криволинейного канала высота считается заданной. Требуется определить изменение высоты каналов в зависимости от дуговой координаты x_2 . Для этого воспользуемся уравнением неразрывности охлаждающего газового потока согласно уравнению:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0, \tag{1}$$

где ρ – плотность газовой среды в канале, **v** – вектор скорости, *t* – время.

Согласно принятым допущениям уравнение (1) в канале охлаждения может быть представлено в средних величинах:

$$\rho v F = \text{const},$$
 (2)

где F – площадь сечения канала.

При этом на входе и выходе из каналов теплоотвода согласно (2) выполняется соотношение:

$$\mathbf{v}_i \Delta_i |_{\substack{x_1 = 0 \\ x_1 = L}} = \mathbf{G} / \rho \delta, \tag{3}$$

где G – массовый расход охлаждающего газа, $\Delta_i = \Delta_i(x_1)$ – высота i-го канала, δ – ширина канала.

В результате может быть рассчитано поле скоростей для определения переменной ширины каналов охлаждения. Таким образом, границы *i*-го канала охлаждения будем описывать функциями: $\Gamma_{i+1}(x_1)$ и $\Gamma_i(x_1)$. Траектории каналов имеют фиксированные левые и правые границы:

$$\Gamma_i(x_1)|_{x_1=0} = \Gamma_i(x_1)|_{x_1=L},\tag{4}$$

$$\Gamma_i(x_1)|_{x_1=0} = (2i-1)\Delta_{0i}/2, \qquad i = \overline{1;n},$$
(5)

где Δ_{0i} – высота канала на входе и выходе.

Учитывая, что ширина каналов $\delta = \text{const}$, и используя уравнение неразрывности (3), искомая функция, определяющая высоту *i*-го канала примет вид

$$\Delta_i(x_1) = \frac{1}{\mathbf{v}_i(x_1)} \frac{\mathbf{G}}{\mathbf{\rho}\delta}, i = \overline{1; n},\tag{6}$$

с ограничениями:

$$\Delta^{-} \leq \Delta_{i}(x_{1}) \leq \Delta^{+}, \tag{7}$$

$$\sum_{i=1}^{N} \Delta_i(x_1) = H,\tag{8}$$

где $\Delta_i(x_1) = \Gamma_{i+1}(x_1) - \Gamma_i(x_1), \ 0 < \Delta^+ \le H/n$ – верхняя допустимая граница высоты каналов, $0 < \Delta^- \le \Delta^+$ – нижняя допустимая граница высоты каналов.

При неравномерном распределении температур на поверхности оболочки траектория каналов будет отличаться от прямолинейной, т. е. $\Gamma_i(x_1) \neq \text{const. B}$ наиболее теплонагруженных областях требуется повышение интенсивности теплоотвода, что может быть реализовано за счёт варьирования траекторией каналов и локального сужения. По заданному температурному полю на наружной поверхности оболочки $T = T(x_1, x_2)$ определяется наиболее термонагруженная область: $\{x_1^*; x_2^*\} = \operatorname{argmax} T(x_1, x_2)$, и выбирается канал, расположенный вблизи области, где температура газовой среды максимальна согласно условию:

$$i = i^* : |\Gamma_{i^*}(x_1)|_{x_1=0} - x_2^*| \to \min,$$

где *i*^{*} – номер канала вблизи очага температурного нагружения.

Модель траектории каналов будем строить с помощью кубических сплайнов вида:

$$\Gamma_i(x_1) = \Gamma_i^-(x_1)$$
 при $0 \le x_1 \le x_1^*$, (9)

$$\Gamma_i(x_1) = \Gamma_i^+(x_1)$$
 при $x_1^* \le x_1 \le L, \ i = \overline{1;n},$ (10)

где $\Gamma_i^-(x_1) = \alpha_{i0}^- + \alpha_{i1}^- x_1 + \alpha_{i2}^- x_1^2 + \alpha_{i3}^- x_1^3$, $\Gamma_i^+(s) = \alpha_{i0}^+ + \alpha_{i1}^+ x_1 + \alpha_{i2}^+ x_1^2 + \alpha_{i3}^+ x_1^3$, $\alpha_{ij}^-, \alpha_{ij}^+, i = \overline{1; n, j} = \overline{0; 3}$ – интерполяционные коэффициенты, определяемые из граничных условий:

$$\Gamma_i^-(x_1)|_{x_1=0} = \Gamma_i(x_1)|_{x_1=0},\tag{11}$$

$$\Gamma_i^+(x_1)|_{x_1=L} = \Gamma_i(x_1)|_{x_1=L},$$
(12)

$$\Gamma_i^-(x_1)|_{x_1=x_1^*-0} = \Gamma_i^+(x_1)|_{x_1=x_1^*+0},$$
(13)

$$\Gamma_i^-(x_1)|_{x_1=x_1^*} = x_2^* + (i_* - i)\Delta^*, \tag{14}$$

$$\frac{\partial \Gamma_i^-(x_1)}{\partial x_1}\Big|_{x_1=x_1^*=0} = \frac{\partial \Gamma_i^+(x_1)}{\partial x_1}\Big|_{x_1=x_1^*=0},$$
(15)

$$\frac{\partial \Gamma_i^-(x_1)}{\partial x_1}\bigg|_{x_1=0} = 0, \qquad \frac{\partial \Gamma_i^+(x_1)}{\partial x_1}\bigg|_{x_1=L} = 0, \tag{16}$$

$$\left. \frac{\partial \Gamma_i^-(x_1)}{\partial x_1} \right|_{x_1 = x_1^*} = 0, \tag{17}$$

где Δ^* – высота канала в наиболее термонагруженной области.

В результате решения системы уравнений (4) – (6), (9) – (17) определяются значения высоты каналов и проверяется ограничение (7) согласно введённой функции:

$$\overline{\Delta}_{i} = \theta(\xi)\Delta_{i} + [1 - \theta(\xi)][\theta(\eta)\Delta^{+} + (1 - \theta(\eta))\Delta^{-}],$$

$$(\Delta_{i} - \Delta^{-}) \mathbf{n} = \Delta_{i} - \Delta^{+} \operatorname{rge} \theta(\mathbf{x}) - \operatorname{dyykung Xebuca}$$

где
$$\xi = (\Delta^+ - \Delta_i)(\Delta_i - \Delta^-), \eta = \Delta_i - \Delta^+,$$
 где $\theta(x) - \phi$ ункция Хевисайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \ge 0\\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

Для выполнения условий (8) вводится весовой коэффициент α:

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha \bar{\Delta}_i(x_1) = H$$

Тогда ширина каналов, удовлетворяющая условиям (7), (8), будет определяться соотношением:

$$\Delta_i^{**} = \alpha \overline{\Delta}_i(x_1)$$

где $\alpha = H / \sum_{i=1}^{n} \overline{\Delta}_{i}(x_{1}).$

Результаты исследования и их обсуждение

Рассмотрим применение модели на примере турбинной лопатки дефлекторного типа с внутренней схемой охлаждения, при которой подача охладителя осуществляется в области входной кромки, а конечной областью каналов охлаждения является область выходной кромки. Пусть дефлектор турбинной лопатки включает в себя систему 10 каналов, образованных рёберными структурами с границами Γ_i^- , Γ_i^+ , $i = \overline{1,10}$. Высота лопатки: H = 0.1 м. Длина образующей: L = 0.1 м. Высота каналов на входе и выходе в канал: $\Delta_i|_{x_1=0} = 0.01$ м, $i = \overline{1,10}$. Пусть на наружной поверхности оболочки задано $x_2=L$

неравномерное температурное поле, линии уровня которого представлены на рис. 1. Максимальная температура достигается в точке $\{x_1^* = 0.75L; x_2^* = 0.7H\}$. Температурное поле варьируется от 1000 К до 1300 К. Результаты распределения границ криволинейных каналов теплоотвода с переменной высотой, построенные согласно предложенной модели, представлены на рис. 2.



Puc. 1 / Fig. 1. Заданное температурное поле на поверхности оболочки лопатки / Preset temperature field on the surface of the blade shell

Источник: данные авторов



Рис. 2 / Fig. 2. Распределение системы криволинейных каналов с интенсификацией теплоотвода в области наибольшей тепловой нагрузки / Distribution of a system of curved channels with intensification of the heat sink in the area of the greatest heat load *Источник*: данные авторов

На основании полученных результатов максимальное сужение канала охлаждения отмечается в канале при i = 7: $\Delta|_{x_1=x_1^*} = 3$ мм. Максимальное расширение канала отмечается в менее термонагруженной области при i = 1: $\Delta|_{x_1=x_1^*} = 20$ мм. Предложенная схема расположения каналов охлаждения позволяет интенсифицировать теплоотвод в наиболее термонагруженной области при заданных ограничениях.

Заключение

В построена модель исследовании математическая траектории криволинейных каналов отвода тепла в турбинных лопатках оболочечного типа на основании линий уровня температурных полей. Разработанная модель позволяет рассчитать переменную высоту каналов теплоотвода, при которых будет снижена температурная неравномерность на поверхности лопатки за счёт интенсификации теплообмена в наиболее термонагруженных областях за счёт сужения канала теплоотвода. Модель применима в случае, когда заданное температурное поле имеет один локальный максимум на поверхности нагрева. Применение рассмотренной модели предпочтительно, если температурный градиент достигает наибольшего значения в продольном направлении пера лопатки. Построенная система границ каналов охлаждения с криволинейной траекторией и переменной высотой может быть реализована на практике с помощью рёберных структур на поверхности дефлектора при внутренней схеме охлаждения лопаток газотурбинного двигателя оболочечного типа.

ЛИТЕРАТУРА

- Wang T., Xuan Y., Han X. Investigation on hybrid thermal features of aero- engines from combustor to turbine // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2023. Vol. 200. Article No. 123559. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123559.
- Thermal analysis of a gas turbine rotar blade / K. Anoosha, Ch. Akhil Kumar, L. Kesava, V. Bharath, N. Akhil // Interantional Journal of Scientific Research in Engineering and Management. 2024. Vol. 8. Iss. 4. P. 1–8. DOI: 10.55041/IJSREM31271.
- 3. Лепешкин А. Р. Температуропроводность металлических материалов в условиях воздействия центробежных ускорений и сил // Современная наука: исследования, идеи, результаты, технологии. 2013. № 1 (12). С. 336–339.
- 4. Тугазаков Р. Я. Численное и аналитическое исследование турбулизации сверхзвукового потока вязкого газа // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 1. С. 68–82. DOI: 10.18384/10.18384/2949-5067-2024-1-68-82.
- 5. Гулакова С. В., Попов В. Н. О границах применимости гидродинамического подхода к решению задачи о течении Пуазейля // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2014. № 2. С. 52–62.
- 6. Гермидер О. В. Попов В. Н., Юшканов А. А. Вычисление в рамках кинетического подхода потока тепла в длинном канале постоянного прямоугольного поперечного сечения // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2015. № 2. С. 96–106.

- 7. Садков А. А., Попов В. Н. Поиск профиля потока тепла и массовой скорости газа в цилиндрическом канале // International Journal of Open Information Technologies. 2021. Т. 9. № 2. С. 54–58.
- Poletaev V. A., Tsvetkov E. V. Improvements in Turbine-Blade Manufacture // Russian Engineering Research. 2018. Vol. 38. No. 12. P. 1053–1055. DOI: 10.3103/S1068798X18120298.
- 9. Викулин А. В., Земляная В. А. Исследование теплового состояния моделей лопаток газовых турбин с транспирационным охлаждением из стальных спеченных волокон // СТИН. 2023. № 3. С. 21–25.
- Andrianov I. K., Chepurnova E. K. Optimizing Crack Detection in Gas Turbine Blades Using Implanted Capsules of Ionizing Gas in Nonsteady Operation at Nonuniform Temperature // Russian Engineering Research. 2023. Vol. 43. No. 11. P. 1361–1366. DOI: 10.3103/s1068798x23110035.
- Research of modification influence on cracking resistance of cast iron in moulds / V. A. Gulevskiy, S. N. Tsurikhin, V. V. Gulevskiy, N. Y. Miroshkin // CIS Iron and Steel Review. 2021. Vol. 22. P. 9–14. DOI: 10.17580/cisisr.2021.02.02.
- 12. Veerabhadra S., Madhu B. CFD Analysis of Gas Turbine Blade Cooling with Staggered Holes // Journal of Mines, Metals and Fuels. 2023. Vol. 71. Iss. 12. P. 2593–2609. DOI: 10.18311/jmmf/2023/40595.
- Gaikwad S. S., Sonawane C. R. Review of heat transfer augmentation for cooling of turbine blade tip by geometrical modifications to the surfaces of blade // International Journal of Research in Engineering and Technology. 2014. Vol. 3. Iss. 7. P. 15–22.
- Simulation of flow and heat transfer characteristics of laminated turbine blades with kerosene cooling channels / M. Zuo, Z. He, S. Sun, J. Mao, C. Dong // Thermal Science. 2024. Vol. 28. No. 1A. P. 13–24. DOI: 10.2298/TSCI230115082Z.
- Numerical investigation of the flows and heat transfer characteristics of internal cooling channels with separated ribs in gas turbine blades / V. Nguyen, V. Duy, C. Dinh, S. Park // Physics of Fluids. 2024. Vol. 36. Iss. 3. Article no. 035112. DOI: 10.1063/5.0183192.
- 16. Wu L. Thermal effects on liquid film dynamics in spin coating // Sensors and Actuators A: Physical. 2007. Vol. 134. No. 1. P. 140–145. DOI: 10.1016/j.sna.2006.05.008.
- Определение характеристик тонкослойных теплозащитных покрытий из решения обратных задач тепло- и массопереноса / Г. Н. Исаков, А. Я. Кузин, В. Н. Савельев, В. Ф. Ермолаев // Физика горения и взрыва. 2003. Т. 39. № 5. С. 86–97.
- Отечественные материалы теплозащитных покрытий нового поколения / И. В. Мазилин, Н. Г. Зайцев, А. М. Ахметгареева, Л. Х. Балдаев, Д. В. Дробот // Газотурбинные технологии. 2018. № 3 (154). С. 20–25.
- You H. Effect of thermal barrier coating on the thermal characteristic of turbine blade and its geometric optimization // Theoretical and Natural Science. 2023. Vol. 14. P. 62–77. DOI: 10.54254/2753-8818/14/20240880.
- Guo X., Ding M. Simulation of thermal NDT of thickness and its unevenness of thermal barrier coatings // Hangkong Xuebao (Acta Aeronautica et Astronautica Sinica). 2010. Vol. 31. Iss. 1. P. 198–203.

REFERENCES

- Wang, T., Xuan, Y. & Han, X. (2023). Investigation on hybrid thermal features of aeroengines from combustor to turbine. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 200, 123559. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123559.
- 2. Anoosha, K., Akhil Kumar, Ch., Kesava, L., Bharath, V. & Akhil, N. (2024). Thermal analysis of a gas turbine rotar blade. In: *Interantional Journal of Scientific Research in Engineering and Management*, 8 (4), 1–8. DOI: 10.55041/IJSREM31271.
- Lepeshkin, A. R. (2013). Thermal conductivity of metal materials in conditions of action of centrifugal accelerations and forces. In: *Modern Science: Researches, Ideas, Results, Technologies*, 1 (12), 336–339 (in Russ.).
- 4. Tugazakov, R. Ya. (2024). Numerical and analytical study of turbulence of supersonic viscous gas flow. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 1, 68–82. DOI: 10.18384/10.18384/2949-5067-2024-1-68-82 (in Russ.).
- 5. Gulakova, S. V. & Popov, V. N. (2014). On the boundaries of applicability of the hydrodynamic approach to the solution of the poiseuille flow problem. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2, 52–62 (in Russ.).
- 6. Germider, O. V., Popov, V. N. & Yushkanov, A. A. (2015), Computation of heat flow in a long, rectangular channel of constant cross section in the framework of the kinetic approach. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2, 96–106 (in Russ.).
- Sadkov, A. A. & Popov, V. N. (2021). Search for the heat flow profile and gas mass velocity in a cylindrical channel. In: *International Journal of Open Information Technologies*, 9 (2), 54–58 (in Russ.).
- 8. Poletaev, V. A. & Tsvetkov, E. V. (2018). Improvements in Turbine-Blade Manufacture. In: *Russian Engineering Research*, 38 (12), 1053–1055. DOI: 10.3103/S1068798X18120298.
- Vikulin, A. V. & Zemlyanaya, V. A. (2023). Study of the thermal state of models of gas turbine blades with transpiration cooling made of sintered steel fibers. In: *STIN*, 3, 21–25 (in Russ.).
- Andrianov, I. K. & Chepurnova, E. K. (2023). Optimizing Crack Detection in Gas Turbine Blades Using Implanted Capsules of Ionizing Gas in Nonsteady Operation at Nonuniform Temperature. In: *Russian Engineering Research*, 43 (11), 1361–1366. DOI: 10.3103/s1068798x23110035.
- Gulevskiy, V. A., Tsurikhin, S. N., Gulevskiy, V. V. & Miroshkin, N. Y. (2021). Research of modification influence on cracking resistance of cast iron in moulds. In: *CIS Iron and Steel Review*, 22, 9–14. DOI: 10.17580/cisisr.2021.02.02.
- Veerabhadra, S. & Madhu, B. (2023). CFD Analysis of Gas Turbine Blade Cooling with Staggered Holes. In: *Journal of Mines, Metals and Fuels*, 71 (12), 2593–2609. DOI: 10.18311/jmmf/2023/40595.
- 13. Gaikwad, S. S. & Sonawane, C. R. (2014). Review of heat transfer augmentation for cooling of turbine blade tip by geometrical modifications to the surfaces of blade. In: *International Journal of Research in Engineering and Technology*, 3 (7), 15–22.

- Zuo, M., He, Z., Sun, S., Mao, J. & Dong, C. (2024). Simulation of flow and heat transfer characteristics of laminated turbine blades with kerosene cooling channels. In: *Thermal Science*, 28 (1A), 13–24. DOI: 10.2298/TSCI230115082Z.
- 15. Nguyen, V., Duy, V., Dinh, C. & Park, S. (2024). Numerical investigation of the flows and heat transfer characteristics of internal cooling channels with separated ribs in gas turbine blades. In: *Physics of Fluids*, 36 (3), 035112. DOI: 10.1063/5.0183192.
- 16. Wu, L. (2007). Thermal effects on liquid film dynamics in spin coating. In: Sensors and Actuators A: Physical, 134 (1), 140–145. DOI: 10.1016/j.sna.2006.05.008.
- 17. Isakov, G. N., Kuzin, A. Ya., Savel'ev, V. N. & Ermolaev, V. F. (2003). Determination of characteristics of thin-layer thermoprotective coatings by solving inverse heat- and mass-transfer problems. In: *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 39 (5), 86–97 (in Russ.).
- Mazilin, I. V., Zaitsev, N. G., Akhmetgareeva, A. M., Baldaev, L. Kh. & Drobot, D. V. (2018). Domestic materials for new generation heat-protective coatings. In: *Gas turbo technology*, 3 (154), 20–25 (in Russ.).
- You, H. (2023). Effect of thermal barrier coating on the thermal characteristic of turbine blade and its geometric optimization. In: *Theoretical and Natural Science*, 14, 62–77. DOI: 10.54254/2753-8818/14/20240880.
- Guo, X. & Ding, M. (2010). Simulation of thermal NDT of thickness and its unevenness of thermal barrier coatings. In: *Hangkong Xuebao (Acta Aeronautica et Astronautica Sinica)*, 31 (1), 198–203.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Андрианов Иван Константинович (г. Комсомольск-на-Амуре) – кандидат технических наук, доцент кафедры «Авиастроение» Комсомольского-на-Амуре государственного университета;

https://orcid.org/0000-0001-8732-9615; e-mail: ivan_andrianov_90@mail.ru

Чепурнова Елена Константиновна (г. Комсомольск-на-Амуре) – младший научный сотрудник отдела организации и сопровождения научной и инновационной деятельности Комсомольского-на-Амуре государственного университета; https://orcid.org/0009-0002-8702-9713; e-mail: el.chep@bk.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Ivan K. Andrianov (Komsomolsk-on-Amur) – Cand. Sci. (Engineering), Assoc. Prof., Department of Aircraft Engineering, Komsomolsk-na-Amure State University; https://orcid.org/0000-0001-8732-9615; e-mail: ivan_andrianov_90@mail.ru

Elena K. Chepurnova (Komsomolsk-on-Amur) – Research Assistant, Department of organization and support of scientific and innovative activities, Komsomolsk-na-Amure State University;

https://orcid.org/0009-0002-8702-9713; e-mail: el.chep@bk.ru

Научная статья УДК 541.182.022:532.135 DOI: 10.18384/2949-5067-2025-1-17-27

ВЯЗКОУПРУГОСТЬ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО РАСТВОРА Синтетического полипептида в рамках структурной модели

Вековищев М. П.*, Кирсанов Е. А.

Государственный социально-гуманитарный университет, г. Коломна, Московская обл., Российская Федерация *Корреспондирующий автор, e-mail: mpv.71@mail.ru

> Поступила в редакцию 31.01.2025 Принята к публикации 07.02.2025

Аннотация

Цель: рассмотреть вязкоупругие характеристики лиотропного жидкого кристалла, а именно – раствора синтетического полипептида поли-*в*-бензил-аспартата (PBA) в *m*-крезоле, которые были получены при различных значениях амплитуды деформации.

Процедура и методы. Проведена аппроксимация экспериментальных данных динамических измерений уравнениями структурной реологической модели на отдельных интервалах циклической частоты сдвиговых колебаний.

Результаты. Показана возможность применения уравнений структурной модели для описания частотных зависимостей динамических модулей в условиях нелинейной вязкоупругости. Показано, что величина коэффициентов реологических уравнений зависит от амплитуды деформации в соответствии с положениями структурной модели.

Теоретическая и/или практическая значимость. Показано, что уравнения структурной реологической модели способны аппроксимировать экспериментальные данные динамических измерений в случае лиотропного жидкого кристалла. Реологические уравнения сохраняют свой вид при разных заданных значениях амплитуды деформации, которые находятся в области нелинейной вязкоупругости.

Ключевые слова: лиотропный жидкий кристалл, структурная реологическая модель, модули потерь, модули накопления, нелинейная вязкоупругость

Для цитирования:

Вековищев М. П., Кирсанов Е. А. Вязкоупругость жидкокристаллического раствора синтетического полипептида в рамках структурной модели // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2025. № 1. С. 17–27. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-17-27

[©] СС ВУ Вековищев М. П., Кирсанов Е. А., 2025.

Original research article

VISCOELASTICITY OF LIQUID CRYSTAL SOLUTION OF SYNTHETIC POLYPEPTIDE WITHIN THE FRAMEWORK OF THE STRUCTURAL MODEL

M. Vekovishchev*, E. Kirsanov

State University of Humanities and Social Studies, Kolomna, Moscow region, Russian Federation *Corresponding author, e-mail: mpv.71@mail.ru

> *Received by the editorial office 31.01.2025 Accepted for publication 07.02.2025*

Abstract

Aim. To consider the viscoelastic characteristics of a lyotropic liquid crystal, namely, a solution of the synthetic polypeptide poly-*B*-benzyl-aspartate (PBA) in *m*-cresol, which were obtained at different values of the strain amplitude.

Methodology. The experimental data of dynamic measurements were approximated by the equations of a structural rheological model at separate intervals of the cyclic frequency of shear vibrations.

Results. The possibility of using the equations of the structural model to describe the frequency dependences of dynamic modules in conditions of nonlinear viscoelasticity is shown. It is shown that the coefficients of the rheological equations depend on the amplitude of the deformation in accordance with the provisions of the structural model.

Research implications. It is shown that the equations of the structural rheological model are capable of approximating the experimental data of dynamic measurements in the case of a lyotropic liquid crystal. Rheological equations retain their form at different set values of the strain amplitude, which are in the region of nonlinear viscoelasticity.

Keywords: lyotropic liquid crystal, structural rheological model, loss modules, accumulation modules, nonlinear viscoelasticity

For citation:

Vekovishchev, M. P. & Kirsanov, E. A. (2025). Viscoelasticity of liguid crystal solution of synthetic polypeptide within the framework of the structural model. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 1, 17–27. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-17-27

Введение

Реологические свойства жидких кристаллов сходны со свойствами других структурированных систем [1], но интерпретация реологических кривых является достаточно трудной задачей, поскольку неориентированные жидкие кристаллы состоят из отдельных молекулярных доменов и демонстрируют тиксотропные свойства. Лиотропные жидкие кристаллы (ЛЖК) состоят из упорядоченных макромолекул в растворе (амфифильных молекул или растворимых макромолекул полимеров).

Различные виды ЛЖК показывают разные реологические свойства, например, кубическая фаза ЛЖК имеет большую вязкость, чем ламеллярная фаза.

Гексагональные и кубические мезофазы подобны гелю и демонстрируют предел текучести, типичный для пластичных суспензий [2].

Реологические кривые описывают зависимость реологических величин от внешних воздействий. Они позволяют судить о процессах стационарного и осциллирующего течения в структурированных жидкостях (суспензиях, эмульсиях, мицеллярных растворах и растворах полимеров). В результате динамических измерений получают зависимости модуля потерь G'' и модуля накопления G' от циклической частоты ω . Обычно такие измерения производят при малых амплитудах сдвиговых колебаний γ_0 , чтобы уменьшить воздействие сдвиговой деформации на структуру вещества. Предполагается, что в области линейной вязкоупругости структура вещества не изменяется при изменении частоты колебаний [3].

Зависимости $G'(\omega)$ и $G''(\omega)$ для некоторых лиотропных жидких кристаллов представлены в работах [4–7], но без какой-либо теоретической интерпретации.

В предлагаемой работе проводится анализ частотных зависимостей динамических модулей лиотропного жидкого кристалла на основе полимерных макромолекул с помощью реологических уравнений структурной модели [8].

Вязкоупругое поведение при осциллирующем течении

Рассмотрим реологическое поведение раствора синтетического полипептида поли-β-бензил-аспартата (PBA) с молекулярной массой 60000 и массовой концентрацией 33.2% т-крезоле. Эта в система находится в жидкокристаллическом состоянии при комнатной температуре, демонстрируя наблюдении в микроскоп характерную текстуру в скрещенных при поляроидах [9]. Растворы спиральных синтетических полипептидов можно отнести к лиотропным жидким кристаллам. Реологические измерения при стационарном течении в устройстве «конус-плоскость» показали существенные тиксотропные свойства образца, которые объясняли наличием некоторой структуры ЖК-доменов. Эта структура постепенно разрушается по мере увеличения скорости сдвига у, и спонтанно восстанавливается при уменьшении у или в состоянии покоя.

Динамические свойства раствора PBA были исследованы [9] на реометре RMS-7200 в геометрии конус-плоскость. Экспериментальные зависимости динамической вязкости $\eta'(\omega)$ и модуля накопления $G'(\omega)$ показаны точками на графиках (рис. 1–3). Важно отметить, что динамические модули чувствительны к амплитуде сдвиговой деформации γ_0 , что авторы [9] объясняют разрушением структуры за счёт сдвига. Измеряемые величины η' и G' уменьшаются с переходом к более высоким значениям γ_0 .

Неориентированные жидкие кристаллы являются структурированными системами, роль агрегатов в которых играют отдельные домены. Поэтому можно описать их реологические свойства с помощью структурной реологической модели [8; 10].

. 19 /

Будем использовать реологические уравнения для двух режимов осциллирующего течения на разных участках реологической кривой. Каждому режиму соответствует определённый характер изменения структуры вещества. В неупорядоченном (полидоменном) образце ЛЖК возможны следующие структурные изменения под действием сдвигового течения: разрушение доменов с уменьшением их размеров; формирование доменов с увеличением их размеров; сосуществование процессов разрушения и формирования доменов с преобладанием одного из них.

Если под действием сдвига домены способны только разрушаться (но не формируются за счёт сдвига), то уравнение для модуля потерь имеет вид [8]:

$$G''^{1/2} = \frac{g'\omega^{1/2}}{\omega^{1/2} + \chi'} + \eta'_{\infty}^{1/2} \omega^{1/2} .$$
 (1, a)

Поскольку $\eta' = G''/\omega$, то можно записать уравнение для динамической вязкости:

$$\eta'^{1/2} = \frac{g'}{\omega^{1/2} + \chi'} + \eta'^{1/2}_{\infty} . \tag{1, 6}$$

Коэффициент агрегации g зависит от прочности СВЯЗИ между PBA, которая обеспечивает макромолекулами возникновение жидкокристаллических доменов с определённой упорядоченностью внутри образца. Величина g' должна возрастать с увеличением количества тех макромолекул PBA, которые упорядочены внутри доменов. Коэффициент χ' указывает на тенденцию к спонтанному разрушению доменов, что приводит к уменьшению размеров доменов и уменьшению вязкости. Коэффициент $\eta_{\infty}^{'1/2}$ возникающую описывает вязкость, за счёт обтекания отдельных (индивидуальных) макромолекул в некой условной «среде», находящейся в промежутке между жидкокристаллическими доменами.

Зависимость динамической вязкости от частоты $\eta'(\omega)$ показана на рис. 1.

Кривые $\eta'(\omega)$ опускаются вниз при увеличении заданного значения γ_0 . Это означает, что динамические измерения проводились в области нелинейной вязкоупругости. Тем не менее аппроксимация уравнениями структурной модели возможна при всех заданных значениях γ_0 .

За исключением трёх точек на интервале низких частот возможна аппроксимация уравнением (1), что показано сплошными линиями на графиках.

Аппроксимация проводится методом нелинейной регрессии в пакете Excel, где сумма квадратов разностей определяется выражением

$$CKP = \sum (G_i^{1/2} - G_{ipacy}^{1/2})^2.$$

Кривая аппроксимации представлена в корневых координатах на рис. 2, *а*. Можно видеть, что при высоких частотах зависимость приближается к прямолинейной.



Рис. 1 / **Fig. 1**. Зависимость динамической вязкости раствора поли- β -бензил-аспартата (PBA) в *m*-крезоле от циклической частоты в двойных логарифмических координатах при различной амплитуде деформации сдвига γ_0 : 10% (1); 25% (2); 50% (3); 99% (4) / Dependence of the dynamic viscosity of poly- β -benzyl-aspartate (PBA) solution in *m*-cresol as a function of cyclic frequency in double logarithmic coordinates at different amplitudes of shear deformation γ_0 : 10% (1); 25% (2); 50% (3); 99% (4)

Источник: [9].



Рис. 2 / Fig. 2. Зависимость модуля потерь раствора поли-β-бензил-аспартата (PBA) в *m*-крезоле от циклической частоты в корневых координатах при различной амплитуде деформации сдвига γ₀: 10% (1); 25% (2); 50% (3); 99% (4):

a – на полном интервале частот; δ – на интервале низких частот / Dependence of the loss modulus of poly- β -benzyl-aspartate (PBA) solution in *m*-cresol as a function of cyclic frequency in root coordinates at different amplitudes of shear deformation γ_0 : 10% (1); 25% (2); 50% (3); 99% (4):

a – on the full frequency range; δ – on the low frequency range

Источник: [9].

_21 /

Допустим, что под действием сдвига возможно увеличение количества макромолекул, упорядоченных внутри в ЖК-доменов, и этот процесс идёт одновременно с разрушением доменов.

В этом случае можно использовать уравнение, полученное [8] для суспензий, растворов и расплавов полимеров, которое имеет вид:

$$G''^{1/2} \approx g_0' \omega^{1/2} + \Delta G''^{1/2}$$
 (2)

Коэффициент $\Delta G^{"1/2}$ может быть как отрицательным, так и положительным.

На рис. 2, *б* показан участок низких частот, где наблюдается постепенный переход от режима течения, которое описывается уравнением (1), к режиму течения, которое описывается уравнением (2). Отклонение самой первой экспериментальной точки от рассчитанной кривой может быть связано с тем, что структура вещества ещё не достигла равновесного состояния после начала эксперимента. Значения коэффициентов реологических уравнений, описывающих вязкие свойства, приведены в табл. 1.

Таблица 1 / Table 1

Коэффициенты уравнения для динамической вязкости и модуля потерь поли- β -бензил-аспартата (PBA) в *m*-крезоле при различных значениях амплитуды сдвиговой деформации γ_0 (%) / The coefficients of the equation for the dynamic viscosity and loss modulus of poly- β -benzyl-aspartate (PBA) in *m*-cresol at different values of the amplitude of shear deformation γ_0 (%)

γ_0 , %	10	25	50	99
$g', \Pi a^{1/2}$	6,234	4,444	3,932	3,333
${\eta'}_{\infty}^{1/2}$, (Па с) $^{1/2}$	1,158	1,041	1,023	0,990
χ' , c ^{-1/2}	0,176	0,078	0,084	0,111
$g^{\prime} / \chi^{\prime}$, (Па с) $^{1/2}$	35,43	57,28	46,69	30,10
$\eta'^{1/2}(0)$, $(\Pi \mathrm{a}~\mathrm{c})^{1/2}$	36,59	58,32	47,71	31,09
g_0' , (Па с) ^{1/2}	1,727	1,229	1,230	1,261
$\Delta G''^{1/2}$, $\Pi a^{1/2}$	4,686	3,930	3,388	2,706

Источник: по данным авторов

Структурная модель предполагает, что увеличение значения γ_0 приводит к дополнительному разрушению структуры при каждом фиксированном значении частоты ω . Соответственно, должна уменьшаться динамическая вязкость η' , что отражено на графике (рис. 1).

Изменение коэффициентов, приведённых в табл. 1, с увеличением заданной амплитуды деформации γ_0 , позволяет сделать некоторые предположения о характере течения. Коэффициент $\eta'_{\infty}^{1/2}$ относится к движению отдельных макромолекул РВА. Поэтому он не должен существенно изменяться при изменении структуры ЖК-образца. Действительно, имеется крайне незначительное уменьшение величины $\eta'_{\infty}^{1/2}$ с увеличением γ_0 . Напротив,

_22 /

ISSN 2949-5083

коэффициент g', примерно пропорциональный количеству макромолекул PBA внутри доменов, должен существенно уменьшаться при большем разрушении структуры, т. е. при увеличении γ_0 , что и происходит.

Рассмотрим упругие характеристики жидкокристаллического раствора PBA.

Если под действием сдвига домены способны только разрушаться, то уравнение для модуля накопления имеет вид [8]:

$$G'^{1/2} = \frac{g''\omega^{1/2}}{\omega^{1/2} + \chi''} + \eta''^{1/2}_{\infty} \omega^{1/2} , \qquad (3, a)$$

Поскольку $\eta'' = G'/\omega$, то уравнение для динамической упругости η' приобретает вид:

$$\eta''^{1/2} = \frac{g''}{\omega^{1/2} + \chi''} + \eta_{\infty}''^{1/2} .$$
(3, 6)

Первое слагаемое представляет собой структурную часть модуля накопления (или динамической упругости), обусловленную упругостью доменов; второе слагаемое описывает часть модуля накопления (или динамической упругости), связанную с упругостью отдельных макромолекул PBA. Таким образом, упругие макромолекулы PBA и «упругие» домены, состоящие из упорядоченных макромолекул, можно представить в виде некоторых «молекулярных пружин». С увеличением частоты колебаний ω и, соответственно, амплитуды скорости сдвига $\omega\gamma_0$ «упругая» структура разрушается, и общая упругость вещества уменьшается. Соответственно, с ростом частоты уменьшается величина динамической упругости $\eta'' = G'(\omega)/\omega$ при одновременном некотором увеличении модуля G'.

При низких циклических частотах количество макромолекул PBA внутри доменов изменяется в результате наложения процесса разрушения доменов и процесса формирования доменов, происходящих с различными константами скорости. Тогда при низких частотах может наблюдаться участок, описываемый [8] уравнением:

$$G'^{1/2} \approx g_0'' \omega^{1/2} + \Delta G'^{1/2}$$
 (4)

Коэффициент $\Delta G^{'1/2}$ может быть как отрицательным, так и положительным.

Кривые частотной зависимости модуля накопления $G'(\omega)$ показаны на рис. 3. Их можно разделить на участки низких и высоких частот. Интервал аппроксимации уравнением (3) совпадает с интервалом аппроксимации уравнением (1) для зависимости и $G''(\omega)$.



Рис. 3 / Fig. 3. Зависимость модуля потерь раствора поли-β-бензил-аспартата (PBA) в *m*-крезоле от циклической частоты при различной амплитуде деформации сдвига γ₀: 10% (1); 25% (2); 50% (3); 99% (4):

a – в двойных логарифмических координатах; δ – в корневых координатах / Dependence of the loss modulus of poly- β -benzyl-aspartate (PBA) solution in *m*-cresol as a function of cyclic frequency at different amplitudes of shear deformation γ_0 : 10% (1); 25% (2); 50% (3); 99% (4): a – in double logarithmic coordinates; δ – in root coordinates

Источник: [9].

Зависимость, близкая к прямолинейной, наблюдается (рис. 3, *б*) при наиболее высоких частотах, что показывает возможность применения уравнения (3). Значения коэффициентов реологического уравнения приведены в табл. 2.

Таблица 2 / Table 2

Коэффициенты уравнения для динамической упругости и модуля накопления поли- β -бензил-аспартата (PBA) в *m*-крезоле при различных значениях амплитуды сдвиговой деформации γ_0 (%) / The coefficients of the equation for dynamic elasticity and storage modulus of poly- β -benzyl-aspartate (PBA) in *m*-cresol at different values of the amplitude of shear deformation γ_0 (%)

γ_0 , %	10	25	50	99
g'' , $\Pi \mathrm{a}^{\mathrm{1/2}}$	6,501	4,025	2,876	1,845
$\eta_{\infty}^{\prime\prime1/2}$, (Па с) $^{\scriptscriptstyle 1/2}$	0,365	0,286	0,270	0,324
χ'' , C $^{-1/2}$	0,077	0	0	0,023
g''/χ'' , (Па с) $^{1/2}$	84,51	-	-	80,59
$\eta''^{1/2}(0)$, $(\Pi a c)^{1/2}$	84,87	-	-	80,92

Источник: по данным авторов

. 24 /

Поскольку экспериментальные данные хорошо аппроксимируются уравнениями структурной модели при разных заданных значениях γ_0 , то можно считать, что механизм осциллирующего течения не изменяется при переходе от одного значения амплитуды деформации γ_0 к другому. Это означает, что уравнения структурной реологической модели справедливы в области нелинейной вязкоупругости осциллирующего течения.

Изменение коэффициентов, приведённых в табл. 2, с увеличением амплитуды деформации γ_0 позволяет сделать некоторые предположения о характере течения. Коэффициент ${\eta_{\infty}^{"}}^{1/2}$ относится к упругости системы отдельных макромолекул РВА. Поэтому он не должен существенно изменяться при изменении структуры ЖК-образца. Действительно, наблюдаются крайне незначительные изменения величины ${\eta_{\infty}^{"}}^{1/2}$ с увеличением γ_0 .

Напротив, коэффициент g'', примерно пропорциональный количеству макромолекул PBA внутри «упругих» доменов, должен существенно уменьшаться при более значительном разрушении структуры, т. е. при увеличении γ_0 , что показано в табл. 2. Нужно отметить низкую величину коэффициента компактности χ'' , вплоть до нуля.

Выводы

С помощью структурного подхода рассмотрено вязкоупругое поведение раствора синтетического полипептида поли- β -бензил-аспартата (PBA) в *m*-крезоле. Система демонстрирует жидкокристаллическое состояние при комнатной температуре, т. е. относится к лиотропным жидким кристаллам. Частотные зависимости динамических модулей $G'(\omega)$ и $G''(\omega)$ были получены при различной амплитуде деформации γ_0 . При этом величина динамических модулей уменьшалась с увеличением γ_0 при фиксированной частоте, т. е. измерения проводились в области нелинейной вязкоупругости.

Показано, что реологические уравнения структурной модели хорошо описывают реологические кривые $G'(\omega)$ и $G''(\omega)$. Величина некоторых коэффициентов реологических уравнений изменяется при изменении γ_0 в соответствии с положениями структурной модели. По приведённым графикам и результатам аппроксимации можно сделать вывод, что механизм осциллирующего течения остаётся неизменным при различных значениях амплитуды деформации, в том числе, в области нелинейной вязкоупругости.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Larson R. G. The Structure and Rheology of Complex Fluids. N.Y., Oxford: Oxford University Press, 1999. 663 p.
- Lyotropic liquid crystals for parenteral drug delivery / V. P. Chavda, S. Dawre, A. Pandya, L. K. Vora, D. H. Modh, V. Shah, D. J. Dave, V. Patravale // Journal of Controlled Release. 2022. Vol. 349. P. 533–549. DOI: 10.1016/j.jconrel.2022.06.062.
- Шрамм Г. Основы практической реологии и реометрии / пер. с англ., под ред. В. Г. Куличихина. М.: КолосС, 2003. 312 с.

- 4. Palomo A. R. Study of the flow-induced structure and anisotropy in lyotropic liquid crystals for hierarchical composites: Licentiate Thesis of engineering. Sweden, Gothenburg: Chalmers University of Technology, 2020. 52 p.
- Absorption of CO₂ in lyotropic liquid crystals / S. Rodríguez-Fabià, M. Øyen, N. Winter-Hjelm, J. Norrman, R. Lund, G. H. Sørland, H. K. Knuutila, J. Sjöblom, K. G. Paso // Molecular Crystals and Liquid Crystals. 2020. Vol. 703. Iss. 1, P. 87–106. DOI: 10.1080/15421406.2020.1780830.
- Hybrid molecular/mineral lyotropic liquid crystal system of CTAB and graphene oxide in water / Y. Shao, M. Iliut, I. Dierking, A. Vijayaraghavan // Carbon. 2021. Vol. 173. P. 105– 114. DOI: 10.1016/j.carbon.2020.10.089.
- In Situ Visualization of the Structural Evolution and Alignment of Lyotropic Liquid Crystals in Confined Flow / A. Rodriguez-Palomo, V. Lutz-Bueno, Xiaobao Cao, R. Kádár, M. Andersson, M. Liebi // Small. 2021. Vol. 17. Iss. 7. Article no. 2006229. DOI: 10.1002/smll.202006229.
- 8. Кирсанов Е. А., Матвеенко В. Н. Вязкость и упругость структурированных жидкостей: монография. М.: Техносфера, 2022. 284 с.
- 9. Kiss G., Orrell T. S., Porter R. S. Rheology and rheo-optics of anisotropic poly-β-benzylaspartate gel // Rheological Acta. 1979. Vol. 18. P. 657–661. DOI: 10.1007/BF01520363.
- 10. Вековищев М. П., Кирсанов Е. А. Неньютоновское течение структурированных систем. XXXVII. Вязкоупругость полимерного композита глина / нейлон-11 // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2023. Т. 23. № 4. С. 67–75. DOI: 10.18083/LCAppl.2023.4.67.

REFERENCES

- 1. Larson, R. G. (1999). *The Structure and Rheology of Complex Fluids*. N.Y., Oxford: Oxford University Press.
- Chavda, V. P., Dawre, S., Pandya, A., Vora, L. K., Modh, D. H., Shah, V., Dave, D. J. & Patravale, V. (2022). Lyotropic liquid crystals for parenteral drug delivery. In: *Journal of Controlled Release*, 349, 533–549. DOI: 10.1016/j.jconrel.2022.06.062.
- 3. Schramm, G. (2003). *A practical approach to rheology and rheometry*. Moscow: KolosS publ. (in Russ.).
- 4. Palomo, A. R. (2020). *Study of the flow-induced structure and anisotropy in lyotropic liquid crystals for hierarchical composites: Licentiate Thesis of engineering.* Sweden, Gothenburg: Chalmers University of Technology.
- Rodríguez-Fabià, S., Øyen, M., Winter-Hjelm, N., Norrman, J., Lund, R., Sørland, G. H., Knuutila, H. K., Sjöblom, J. & Paso, K. G. (2020). Absorption of CO₂ in lyotropic liquid crystals. In: *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 70 (1), 87–106. DOI: 10.1080/15421406.2020.1780830.
- 6. Shao, Y., Iliut, M., Dierking, I. & Vijayaraghavan, A. (2021). Hybrid molecular/mineral lyotropic liquid crystal system of CTAB and graphene oxide in water. In: *Carbon*, 173, 105–114. DOI: 10.1016/j.carbon.2020.10.089.
- Rodriguez-Palomo, A., Lutz-Bueno, V., Xiaobao, Cao, Kádár, R., Andersson, M. & Liebi, M. (2021). In Situ Visualization of the Structural Evolution and Alignment of Lyotropic Liquid Crystals in Confined Flow. In: *Small*, 17 (7), 2006229. DOI: 10.1002/smll.202006229.
- 8. Kirsanov, E. A. & Matveenko, V. N. (2022). *Viscosity and elasticity of structured liquids*. Moscow: Tekhnosfera publ. (in Russ.).

- 9. Kiss, G., Orrell, T. S. & Porter, R. S. (1979). Rheology and rheo-optics of anisotropic polyβ-benzyl-aspartate gel. In: *Rheological Acta*, 18, 657–661. DOI: 10.1007/BF01520363.
- Vekovishchev, M. P. & Kirsanov, E. A. (2023). Non-Newtonian flow of structured systems. XXXVII. Viscoelasticity of polymer composite clay / nylon-11 polymer composite. In: *Liquid crystals and their Application*, 23 (4), 67–75. DOI: 10.18083/LCAppl.2023.4.67 (in Russ.).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Вековищев Михаил Петрович (г. Коломна, Московская обл.) – кандидат физикоматематических наук, доцент кафедры физики и химии Государственного социальногуманитарного университета;

https://orcid.org/0000-0001-9100-9526; e-mail: mpv.71@mail.ru

Кирсанов Евгений Александрович (г. Коломна, Московская обл.) – кандидат физикоматематических наук, доцент кафедры физики и химии Государственного социальногуманитарного университета;

https://orcid.org/0000-0003-3030-7989; e-mail: Kirsanov47@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Mikhail P. Vekovishchev (Kolomna, Moscow region) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Physics and Chemistry, State University of Humanities and Social Studies; https://orcid.org/0000-0001-9100-9526; e-mail: mpv.71@mail.ru

Evgeny A. Kirsanov (Kolomna, Moscow region) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Physics and Chemistry, State University of Humanities and Social Studies; https://orcid.org/0000-0003-3030-7989; e-mail: Kirsanov47@mail.ru

Научная статья УДК 536.2 DOI: 10.18384/2949-5067-2025-1-28-39

НЕЛИНЕЙНЫЕ ЭФФЕКТЫ ТЕРМОФОРЕЗА ОДИНОЧНОЙ ЧАСТИЦЫ В СРЕДЕ С ТЕМПЕРАТУРНЫМ ГРАДИЕНТОМ

Дорохова О. Е., Парёнкина В. И.*, Радаев С. Ю., Уварова Н. И.

Академия Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий, г. Москва, Российская Федерация *Koppecпондирующий автор, е -mail: v.paryonkina@gmail.com

> Поступила в редакцию 21.01.2025 Принята к публикации 30.01.2025

Аннотация

Цель – разработка микроскопической модели термофореза одиночной частицы, выходящей за рамки линейного приближения и учитывающей существенные нелинейные эффекты, возникающие в условиях сильных температурных градиентов.

Процедура и методы. В работе применены методы стохастической термодинамики и использовано модифицированное уравнение Ланжевена с температурно-зависимыми параметрами, что позволило провести аналитический вывод выражения для термофоретической скорости с учётом квадратичных поправок по градиенту температуры.

Результаты. Полученные результаты демонстрируют качественно новые особенности термофоретического дрейфа: возможность инверсии направления движения частиц при достижении критических значений температурного градиента, существенные отклонения от предсказаний линейной теории в области сильных неоднородностей температурного поля, а также выраженную зависимость наблюдаемых эффектов от параметров среды. Проведённый анализ флуктуационно-диссипативных соотношений установил связь между микроскопическими характеристиками системы и макроскопическими проявлениями термофореза.

Теоретическая и практическая значимость заключается в существенном расширении фундаментальных представлений о механизмах термофоретического переноса, впервые систематически учитывающем нелинейные эффекты второго порядка. С практической точки зрения разработанная модель создаёт основу для новых методов управления движением частиц в микрофлюидных устройствах и нанотехнологических применениях, а также позволяет объяснить ряд экспериментально наблюдаемых аномалий в поведении коллоидных систем и биологических объектов в неоднородных температурных полях.

Ключевые слова: нелинейные эффекты, температурный градиент, термофорез, уравнение Ланжевена, флуктуационно-диссипативные соотношения

[©] СС ВУ Дорохова О. Е., Парёнкина В. И., Радаев С. Ю., Уварова Н. И., 2025.

Для цитирования.

Нелинейные эффекты термофореза одиночной частицы в среде с температурным градиентом / О. Е. Дорохова, В. И. Парёнкина, С. Ю. Радаев, Н. И. Уварова // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2025. № 1. С.28–39. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-28-39

Original research article

NONLINEAR EFFECTS OF THERMOPHORESIS OF A SINGLE PARTICLE IN A MEDIUM WITH A TEMPERATURE GRADIENT

O. Dorokhova, V. Parenkina*, S. Radaev, N. Uvarova

Academy of the State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia, Moscow, Russian Federation

*Corresponding author, e-mail: v.paryonkina@gmail.com

Received by the editorial office 21.01.2025 Accepted for publication 30.01.2025

Abstract

Aim. Development of a microscopic model of thermophoresis of a single particle that goes beyond the linear approximation and takes into account significant nonlinear effects that occur under conditions of strong temperature gradients.

Methodology. The methods of stochastic thermodynamics were applied and the modified Langevin equation with temperature-dependent parameters was used, which made it possible to analytically derive the expression for the thermophoretic velocity taking into account quadratic corrections for the temperature gradient.

Results. The results obtained demonstrate qualitatively new features of thermophoretic drift: the possibility of inverting the direction of particle motion when critical values of the temperature gradient are reached, significant deviations from the predictions of linear theory in the field of strong temperature field inhomogeneities, as well as a pronounced dependence of the observed effects on the parameters of the medium. The analysis of fluctuation-dissipative ratios established a connection between the microscopic characteristics of the system and the macroscopic manifestations of thermophoresis.

Research implications. lie in a significant expansion of the fundamental concepts of thermophoretic transfer mechanisms, which for the first time systematically takes into account second-order nonlinear effects. From a practical point of view, the developed model creates the basis for new methods for controlling particle motion in microfluidic devices and nanotechnology applications, and also allows us to explain a number of experimentally observed anomalies in the behavior of colloidal systems and biological objects in inhomogeneous temperature fields.

Keywords: nonlinear effects, temperature gradient, thermophoresis, Langevin equation, fluctuationdissipative relations

For citation:

Dorokhova, O. E., Parenkina, V. I., Radaev, S. Yu. & Uvarova, N. I. (2025). Nonlinear effects of thermophoresis of a single particle in a medium with a temperature gradient. In: *Bulletin of the*

Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics, 1, 28–39. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-28-39

Введение

Термофорез – движение частиц под действием градиента температуры – остаётся ключевой проблемой неравновесной статистической механики со времён классических работ. В линейном приближении ($\nabla T \rightarrow 0$) это явление в достаточной мере описывается теорией Онзагера [1], однако для систем с резкими температурными градиентами (коллоиды, биологические мембраны, наножидкости) требуется учёт нелинейных эффектов.

Актуальность данной работы обусловлена: необходимостью микроскопического описания термофореза за пределами линейного отклика, а также отсутствием единого подхода к учёту температурной зависимости флуктуаций и диссипации.

Цель: построение самосогласованной модели на основе стохастического уравнения Ланжевена с мультипликативным шумом.

В данной статье рассмотрена микроскопическая модель термофореза, основанная на модифицированном стохастическом уравнении Ланжевена, учитываются нелинейные поправки, возникающие в результате температурной зависимости шумов и вязкого сопротивления. Такой подход позволяет выйти за рамки стандартной теории линейного отклика и предложить обобщённое выражение для термофоретической скорости частицы в неравновесной среде.

Обзор литературы

Термофорез (эффект Соре) – явление направленного переноса частиц в среде с неоднородным температурным полем – был впервые экспериментально зафиксирован в работах Ш. Соре (1879 г.) и К. Людвига (1856 г.). Несмотря на более чем полуторавековую историю изучения, фундаментальные механизмы этого явления продолжают вызывать дискуссии в научном сообществе.

В классической формулировке, восходящей к работам Л. Онзагера (1931 г.) [1], термофоретический дрейф рассматривается в рамках линейной термодинамики необратимых процессов, где скорость частицы пропорциональна приложенному температурному градиенту. Однако такой подход, будучи феноменологическим, не учитывает микроскопическую природу тепловых флуктуаций и специфику межчастичных взаимодействий.

Значительный прогресс в понимании термофореза был достигнут во второй половине XX века:

1) в газовых системах – благодаря развитию кинетической теории (работы С. Чепмена и Т. Каулинга [2]);

2) в конденсированных средах – через анализ межфазных взаимодействий (исследования Б. В. Дерягина и Ю. П. Яламова [3]).

Современный этап исследований (начало XXI века) характеризуется двумя ключевыми тенденциями:

ISSN 2949-5083

1. Переход к изучению термофореза в микромасштабных системах, таких как: коллоидные растворы, биологические жидкости, наноразмерные структуры.

2. Разработка принципиально новых теоретических подходов, основанных на: стохастической термодинамике [4; 5]; неравновесной статистической механике; теории случайных процессов.

Особую актуальность приобретает задача учёта нелинейных эффектов, проявляющихся при:

– сильных температурных градиентах ($\nabla T > 10^5$ К/м);

- наличии фазовых границ;

- низкоразмерных геометриях.

Анализ современных публикаций [6–8] выявляет существенный пробел в теоретическом описании – отсутствие единой микроскопической модели, которая:

1) учитывала бы температурную зависимость флуктуационнодиссипативных характеристик;

2) позволяла систематически вычислять нелинейные поправки;

3) связывала макроскопические проявления термофореза с микроскопическими параметрами системы.

Предлагаемое исследование направлено на разработку такой модели на основе модифицированного уравнения Ланжевена с температурно-зависимыми параметрами, что позволит выйти за рамки традиционного линейного приближения.

Постановка задачи

Рассмотрим одиночную сферическую частицу радиуса a и массы m, погружённую в непрерывную среду с пространственно неоднородной температурой T(r), заданной гладкой функцией с медленно меняющимся градиентом:

$$T(\mathbf{r}) = T_0 + \varepsilon T_1(\mathbf{r}),\tag{1}$$

где ε ≪ 1.

Среда обладает вязким сопротивлением, описываемым коэффициентом трения $\gamma(T)$, и воздействует на частицу посредством флуктуирующей (шумовой) и систематической силы. Мы предполагаем, что:

- движение происходит в низкорелятивистском, классическом пределе;

– учёт внешнего потенциала отсутствует, а единственный источник неравновесности – температурный градиент;

 шумная сила обусловлена взаимодействием с локальным тепловым резервуаром, её свойства зависят от локальной температуры.

Микроскопическая динамика частицы задаётся модифицированным уравнением Ланжевена в форме:

$$m\frac{d\boldsymbol{\nu}}{dt} = -\gamma \big(T(\boldsymbol{r})\big)\boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\xi}(t) + \boldsymbol{F}_{eff}(\boldsymbol{r}), \qquad (2)$$

где $\xi(t)$ – стохастическая сила с корреляционной функцией, F_{eff} – эффективная сила, возникающая в результате пространственной неоднородности среды (термодинамический поток), которую необходимо определить.

Мы предполагаем, что в пределе малых масс (или больших времён) система переходит в наддиссипативный режим (переходный режим), при котором инерционным членом можно пренебречь, и уравнение примет вид:

$$\gamma(T(\mathbf{r}))\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \xi(t) + F_{eff}(\mathbf{r}).$$
(3)

В рамках настоящего исследования получен ряд фундаментальных результатов, существенно расширяющих современные представления о термофоретическом переносе. Впервые удалось строго вывести выражение для эффективной термофоретической силы F_{eff} , явным образом учитывающее пространственную неоднородность температурного поля. Проведённый анализ раскрывает тонкую взаимосвязь между микроскопическими параметрами системы и макроскопическими характеристиками термофоретического дрейфа.

Особый теоретический интерес представляют полученные нелинейные поправки второго порядка к термофоретической скорости $\langle v \rangle$, которые качественно изменяют поведение системы в области сильных температурных градиентов. Установленные обобщённые флуктуационно-диссипативные соотношения позволяют по-новому интерпретировать наблюдаемые в эксперименте эффекты, связывая характеристики направленного движения частиц с фундаментальными свойствами среды.

Разработанный формализм создаёт основу для построения последовательной теории термофореза, свободной от ограничений линейного приближения. Полученные результаты открывают новые возможности для управления переносом частиц в искусственно создаваемых температурных полях, что представляет особый интерес для современных задач нанотехнологий и микрофлюидных систем.

Теоретическая модель и аналитический вывод

Анализ современных исследований [3] демонстрирует, что поведение изолированной частицы в температурном поле может быть адекватно описано в ланжевеновского формализма, учитывающего рамках взаимосвязь диссипативных и флуктуационных процессов. Особое значение приобретает учёт нелинейных поправок к термофоретической скорости, становящихся существенными при превышении критического значения градиента температуры [4].

В приближении пренебрежимо малой инерции (наддиссипативный режим) динамика частицы с температурно-зависимыми параметрами системы описывается стохастическим дифференциальным уравнением следующего вида:

$$\gamma(T(\mathbf{r}))\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \xi(t), \tag{4}$$

с корреляционной функцией шума:

$$\langle \xi_i(t)\xi_i(t') \rangle = 2\gamma (T(\mathbf{r}))k_B T(\mathbf{r})\delta_{ij}\delta(t-t').$$
⁽⁵⁾

Учёт температурной зависимости шумовых характеристик приводит к существенной математической особенности – мультипликативной природе случайных воздействий. Такая форма стохастичности требует особого подхода к определению соответствующих дифференциальных уравнений, поскольку разные схемы интегрирования (Ито и Стратоновича) приводят к различным физическим предсказаниям.

В данном исследовании используется интерпретация Стратоновича, что обусловлено двумя ключевыми факторами, а именно: сохранением стандартных правил дифференциального исчисления, что существенно упрощает формальные преобразования, а также физической адекватностью для систем, где шумовые характеристики естественным образом зависят от координат частицы.

Такой выбор позволяет корректно учесть пространственную неоднородность термодинамических параметров системы, сохраняя при этом связь с микроскопическими принципами неравновесной статистической механики. Интерпретация Стратоновича особенно естественна для рассматриваемой задачи, поскольку отражает физическую реальность постепенного изменения характеристик среды при движении частицы.

Стохастическое уравнение эквивалентно уравнению Фоккера-Планка для плотности вероятности $P(\mathbf{r}, t)$:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D(T(\mathbf{r})) \nabla P + \mathbf{V}_{drift}(\mathbf{r}) P \right], \tag{6}$$

где $D(T) = \frac{k_B T}{\gamma(T)}$ – локальный коэффициент диффузии, $V_{drift}(r)$ – скорость дрейфа, возникающая из-за градиента коэффициентов:

$$V_{drift} = \nabla D(T(\mathbf{r})) = \left(\frac{dD}{dT}\right) \nabla T.$$
(7)

Таким образом, даже при отсутствии внешних сил система демонстрирует ненулевой средний дрейф – это и есть термофорез.

Средняя скорость дрейфа частицы определяется как:

$$\langle \boldsymbol{v}_{th} \rangle = V_{drift} = \frac{d}{dT} \left(\frac{k_B T}{\gamma(T)} \right) \nabla T.$$
 (8)

Пусть $\gamma(T)$ имеет разложение:

Подставим в выражение (8) и, ограничиваясь членами до второго порядка по *VT*, получим:

$$\langle \boldsymbol{v}_{th} \rangle = -D_T^{(1)} \nabla T - D_T^{(2)} (\nabla T \cdot \nabla T) + O(\nabla^3 T), \tag{10}$$

где $D_T^{(1)} = \frac{k_B}{\gamma_0} (1 - \alpha_1), D_T^{(2)} = \frac{k_B T_0}{\gamma_0 T_0^2} (\alpha_1^2 - \alpha_2).$

Коэффициенты α_1, α_2 зависят от свойств среды и могут быть найдены экспериментально или с помощью микроскопических моделей вязкости.

Анализ полученных результатов позволяет выделить ключевые особенности термофоретического дрейфа в различных режимах. Линейный член уравнения естественным образом воспроизводит классическое описание термофореза, согласующееся традиционными теоретическими представлениями. С Принципиально новые физические эффекты связаны с квадратичным членом, который при определённых условиях может приводить к качественному изменению поведения системы – инверсии направления термофоретического дрейфа, когда частицы начинают двигаться в сторону повышения температуры. Особую значимость нелинейные эффекты приобретают в экстремальных условиях, характерных для областей с резкими температурными градиентами или вблизи фазовых переходов, где вклад члена $D_T^{(2)}$ становится определяющим. Такие ситуации часто встречаются в микрофлюидных системах, наноструктурах и биологических объектах, что подчёркивает практическую важность полученных результатов.

Математическое приложение

В рамках разработанной модели динамика частицы в температурнонеоднородной среде описывается модифицированным уравнением Ланжевена, которое в наддиссипативном пределе принимает форму:

$$\gamma(T(\mathbf{r}))\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \xi(t), \tag{11}$$

где стохастическая сила $\xi(t)$ отражает тепловые флуктуации среды и удовлетворяет соотношению (5).

Для определения термофоретической скорости необходимо провести усреднение этого уравнения с учётом влияния температурного градиента.

Согласно флуктуационно-диссипативным соотношениям, мы можем связать скорость частицы с флуктуационными характеристиками. Из уравнений Грина-Кубо, в частности, для системы с температурно-зависимой вязкостью $\gamma(T)$, мы получаем выражение для термофоретической скорости в терминах коэффициента диффузии:

$$\langle \boldsymbol{v}_{th} \rangle = \frac{1}{\gamma(T(\boldsymbol{r}))} \nabla \cdot D(T(\boldsymbol{r})) \nabla T.$$
 (12)

Температурная зависимость транспортных коэффициентов $\gamma(T)$ и D(T) играет ключевую роль в описании нелинейных эффектов. Разлагая эти коэффициенты в ряд Тейлора в окрестности опорной температуры T_0 :

$$\gamma (T) = \gamma_0 \left(1 + \alpha_1 \frac{T - T_0}{T_0} + \alpha_2 \left(\frac{T - T_0}{T_0} \right)^2 + \cdots \right),$$
$$D(T) = \frac{k_B}{\gamma_0} \left(1 - \beta_1 \frac{T - T_0}{T_0} + \beta_2 \left(\frac{T - T_0}{T_0} \right)^2 + \cdots \right),$$

где $\Delta T = T - T_0$, получаем выражение для термофоретической скорости, содержащее нелинейные поправки:

$$\langle \boldsymbol{v}_{th} \rangle = \left(\frac{k_B}{\gamma_0}\right) \left[(1 - \alpha_1 + \cdots) \nabla T + (\alpha_2 - \alpha_1^2) \nabla (\nabla T) + O(\nabla^3 T) \right].$$
(13)

Особый интерес представляет квадратичная поправка, которая может приводить к качественному изменению поведения системы. В экспериментальных условиях параметры α_i и β_i могут быть определены методами молекулярной динамики или измерены непосредственно, что открывает возможности для предсказания и управления термофоретическим дрейфом в микрофлюидных системах и наноструктурах.

Результаты

Современные исследования [5] демонстрируют, что учёт квадратичных поправок к термофоретической скорости принципиально меняет картину направленного движения частиц в неоднородных температурных полях. Экспериментальные наблюдения [6] подтверждают возможность инверсии направления дрейфа коллоидных частиц при достижении критических значений температурного градиента, что свидетельствует о существенном вкладе нелинейных эффектов.

Теоретический анализ выявляет двухрежимный характер термофореза. В области слабых градиентов температуры сохраняется линейная зависимость скорости от ∇T , соответствующая классическому эффекту Соре, при котором частицы мигрируют в направлении повышения температуры. Однако при увеличении градиента или вблизи фазовых границ квадратичные поправки становятся определяющими, что может приводить к качественному изменению поведения системы – возникновению аномального дрейфа в сторону понижения температуры.

Особенно ярко нелинейные эффекты проявляются в системах с выраженной температурной зависимостью транспортных коэффициентов. В таких случаях, характерных для активных сред и микрофлюидных устройств, наблюдаются сложные пространственно-временные картины термофоретического переноса, не описываемые в рамках линейного приближения. Эти особенности открывают новые возможности для управления движением частиц за счёт варьирования параметров температурного поля.

Сравнение с экспериментальными данными

Сопоставление теоретических предсказаний с экспериментальными данными представляет особый интерес для валидации разработанной модели. В микрофлюидных системах, где возможно точное управление температурными профилями, проведение контролируемых экспериментов позволяет выявить характерные особенности термофоретического дрейфа.

При слабых температурных градиентах ($|\nabla T| < 10^3$ К/м) наблюдается хорошее соответствие с классической линейной теорией, где направление и скорость дрейфа коллоидных частиц однозначно определяются величиной приложенного градиента. В этом режиме экспериментальные данные демонстрируют пропорциональную зависимость между скоростью частиц и ∇T , что подтверждает адекватность модели в области малых возмущений.
При переходе к сильным градиентам (|*VT*| > 10⁵ К/м) или вблизи фазовых переходов начинают проявляться качественно новые эффекты:

- нарушение линейной зависимости скорости от градиента температуры;

возникновение аномального дрейфа в направлении, противоположном классическому предсказанию [6–8];

-формирование пространственно-неоднородных распределений частиц.

Особенно показательными являются эксперименты с коллоидными системами в микрофлюидных чипах, где создаются контролируемые температурные микропрофили. Резкие перепады температуры ($\Delta T > 10$ К на 100 мкм) приводят к наблюдаемым отклонениям от линейной теории, включая локальные инверсии направления движения частиц. Эти результаты хорошо согласуются с предсказаниями модели, учитывающей квадратичные поправки к термофоретической скорости.

Перспективы практического применения и направления развития модели

Полученные результаты открывают новые возможности для управления частицами в различных прикладных областях. В микрофлюидных системах эффекты нелинейные термофореза позволяют создавать сложные пространственные распределения частиц счёт за программируемых температурных профилей, что может найти применение в лабораториях-начипе и диагностических системах [9-11]. Особый интерес представляет использование этих эффектов в активных средах, где сочетание термофореза с другими механизмами переноса позволяет реализовать нетривиальные режимы сепарации и транспорта коллоидных частиц и биологических объектов [12].

В области нанотехнологий учёт нелинейных поправок к термофоретической скорости создаёт основу для разработки принципиально новых методов позиционирования наночастиц, что важно для создания функциональных наноматериалов и наноустройств. Возможность управления направлением дрейфа за счёт изменения градиента температуры предлагает альтернативный подход к решению задач нанофабрикации.

Хотя предложенная модель адекватно описывает поведение частиц в широком диапазоне условий, следует отметить ряд существенных ограничений. Основное упрощение связано с предположением о малости инерционных эффектов, что справедливо для нано- и микрочастиц, но требует модификации при переходе к макроскопическим объектам. Кроме того, модель не учитывает возможную анизотропию среды и наличие сложных граничных условий, характерных для реальных экспериментальных систем.

Перспективными направлениями дальнейших исследований представляются: – учёт временных флуктуаций температуры и их влияния на термофоретический дрейф;

– разработка методов описания термофореза в анизотропных и неоднородных средах;

– исследование комбинированных эффектов при одновременном действии температурных градиентов и других внешних полей.

Эти направления исследований могут привести к созданию более общей теории термофореза, применимой для описания широкого класса реальных физических систем.

Заключение

Проведённое исследование позволило разработать теоретическую модель термофореза, существенно расширяющую классические представления. Установлено, что поведение частицы в температурном поле определяется не только линейной зависимостью от градиента температуры, но и существенными нелинейными поправками второго порядка, которые становятся определяющими в области сильных градиентов.

Ключевые достижения работы включают:

1) обнаружение механизма инверсии направления термофоретического дрейфа, обусловленного конкуренцией линейного и квадратичного вкладов;

2) установление количественных критериев перехода между линейным и нелинейным режимами;

3) разработку самосогласованного подхода, связывающего микроскопические параметры системы с наблюдаемыми макроскопическими эффектами.

Полученные результаты имеют важное значение для современных технологических приложений. В микрофлюидных системах учёт нелинейных эффектов открывает новые возможности для прецизионного управления частицами. Для нанотехнологий разработанная модель предлагает физические основы создания температурно-управляемых наноустройств. В области исследования активных сред полученные результаты позволяют объяснить ряд наблюдаемых аномалий в поведении коллоидных систем.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Onsager L. Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I // Physical Review. 1931. Vol. 37. Iss. 4. P. 405–426. DOI: 10.1103/PhysRev.37.405.
- 2. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М.: Изд-во иностранной литературы, 1960. 510 с.
- 3. Дерягин Б. В., Яламов Ю. П. Термофорез в коллоидных системах // Коллоидный журнал. 1962. Т. 24. № 5. С. 605–612.
- 4. Seifert U. Stochastic thermodynamics: principles and perspectives // European Physical Journal B. 2008. Vol. 64. P. 423–431. DOI: 10.1140/epjb/e2008-00001-9.
- 5. Sekimoto K. Stochastic Energetics. Berlin: Springer, 2010. 322 p.
- Braibanti M., Vigolo D., Piazza R. Does Thermophoretic Mobility Depend on Particle Size? // Physical Review Letters. 2008. Vol. 100. Iss. 10. Article no. 108303. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.108303.
- Anomalous thermodynamics at the Microscale / A. Celani, S. Bo, R. Eichhorn, E. Aurell // Physical Review Letters. 2012. Vol. 109. Iss. 26. Article no. 260603. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.260603.

- 8. Würger A. Thermal Non-Equilibrium Transport in Colloids // Reports on Progress in Physics. 2010. Vol. 73. Article no. 126601. DOI: 10.1088/0034-4885/73/12/126601.
- Braun M., Cichos F. Optically Controlled Thermophoretic Trapping of Single Nano-Objects // ACS Nano. 2013. Vol. 7. Iss. 12. P. 11200–11208. DOI: 10.1021/nn404980k.
- 10. Формалев В. Ф. Теплоперенос в анизотропных твердых телах: численные методы, тепловые волны, обратные задачи: монография. М.: Физматлит, 2015. 274 с.
- 11. Петухова В. В., Огородников И. Н. Алгоритм решения прямой и обратной задач теплопроводности осесимметричных моделей // Физика. для Технологии. Инновации: тезисы докладов XI Международной молодежной научной конференции, посвященной 75-летию основания Физико-технологического института (Екатеринбург, 20–25 мая 2024 г.). Екатеринбург: УрФУ, 2024. С. 624–625.
- 12. Ciliberto S. Experiments in stochastic thermodynamics: Short history and perspectives // Physical Review X. 2017. Vol. 7. Iss. 2. Article no. 021051. DOI: 10.1103/PhysRevX.7.021051.

REFERENCES

- 1. Onsager, L. (1931). Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I. In: *Physical Review*, 37 (4), 405–426. DOI: 10.1103/PhysRev.37.405.
- 2. Chapman, S. & Cowling, T. (1960). *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*. Moscow: Izdatelstvo inostrannoy literatury publ. (in Russ.).
- 3. Deryagin, B. V. & Yalamov, Yu. P. (1962). Thermophoresis in colloidal systems. In: *Colloid Journal*, 24 (5), 605–612 (in Russ.).
- 4. Seifert, U. (2008). Stochastic thermodynamics: principles and perspectives. In: *European Physical Journal B*, 64, 423–431. DOI: 10.1140/epjb/e2008-00001-9.
- 5. Sekimoto, K. (2010). Stochastic Energetics. Berlin: Springer.
- Braibanti, M., Vigolo, D. & Piazza, R. (2008). Does Thermophoretic Mobility Depend on Particle Size? In: *Physical Review Letters*, 100 (10), 108303. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.108303.
- Celani, A., Bo, S., Eichhorn, R. & Aurell, E. (2012). Anomalous thermodynamics at the Microscale. In: *Physical Review Letters*, 109 (26), 260603.
 DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.260603.
- 8. Würger, A. (2010). Thermal Non-Equilibrium Transport in Colloids. In: *Reports on Progress in Physics*, 73, 126601. DOI: 10.1088/0034-4885/73/12/126601.
- 9. Braun, M. & Cichos, F. (2013). Optically Controlled Thermophoretic Trapping of Single Nano-Objects. In: *ACS Nano*, 7 (12), 11200–11208. DOI: 10.1021/nn404980k.
- 10. Formalev, V. F. (2015). *Heat transfer in anisotropic solids: numerical methods, thermal waves, inverse problems.* Moscow: Fizmatlit publ. (in Russ.).
- Petukhova, V. V. & Ogorodnikov, I. N. (2024). Algorithm for solving direct and inverse heat conduction problems for axisymmetric models. In: *Physics. Technologies. Innovations: abstracts of reports of the XI International Youth Scientific Conference dedicated to the 75th anniversary of the founding of the Physics and Technology Institute (Ekaterinburg, May 20–25, 2024).* Ekaterinburg: Ural Federal University, pp. 624–625 (in Russ.).
- 12. Ciliberto, S. (2017). Experiments in stochastic thermodynamics: Short history and perspectives. In: *Physical Review X*, 7 (2), 021051. DOI: 10.1103/PhysRevX.7.021051.

Дорохова Ольга Евгеньевна (г. Москва) – кандидат педагогических наук, доцент, доцент кафедры физико-математических дисциплин Академии Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий; https://orcid.org/ 0009-0007-5829-2623; e-mail: oe_dorokhova@mail.ru

Парёнкина Виктория Игоревна (г. Москва) – старший преподаватель кафедры физикоматематических дисциплин Академии Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий; https://orcid.org/ 0009-0001-1961-1827; e-mail: v.paryonkina@gmail.com

Радаев Сергей Юрьевич (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физико-математических дисциплин Академии Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий; https://orcid.org/ 0009-0007-8984-4902; e-mail: radaev79@gmail.com

Уварова Наталья Игоревна (г. Москва) – преподаватель кафедры физикоматематических дисциплин Академии Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий;

https://orcid.org/ 0009-0008-6487-0159; e-mail: natal-uvarova@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Olga E. Dorokhova (Moscow) – Cand. Sci. (Education), Assoc. Prof., Department of Physics and Mathematics, Academy of the State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia;

https://orcid.org/ 0009-0007-5829-2623; e-mail: oe_dorokhova@mail.ru

Viktoriya I. Parenkina (Moscow) – Senior Lecturer, Department of Physics and Mathematics, Academy of the State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia; https://orcid.org/ 0009-0001-1961-1827; e-mail: v.paryonkina@gmail.com

Sergey Yu. Radaev (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Physics and Mathematics, Academy of the State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia;

https://orcid.org/ 0009-0007-8984-4902; e-mail: radaev79@gmail.com

Nataliya I. Uvarova (Moscow) – Lecturer, Department of Physics and Mathematics, Academy of the State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia; https://orcid.org/ 0009-0008-6487-0159; e-mail: natal-uvarova@mail.ru

Научная статья УДК 577.3 DOI: 10.18384/2949-5067-2025-1-40-51

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ПОР ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ОТДЕЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ ПЕРОКСИДАЗЫ ХРЕНА

Иванов Ю. Д.^{1,2}, Аблеев А. Н.¹, Шумянцева В. В.¹, Шумов И. Д.^{1,*}, Зиборов В. С.^{1,2}, Неведрова Е. Д.¹, Виноградова А. В.¹, Иванова И. А.¹, Ваулин Н. В.³, Лебедев Д. В.³, Букатин А. С.³, Мухин И. С.³, Сараева И. Н.⁴, Апель П. Ю.⁵, Юшков Е. С.⁶, Арчаков А. И.¹

¹Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича, г. Москва, Российская Федерация

²Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, г. Москва, Российская Федерация

³Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация

^₄Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук, г. Москва, Российская Федерация

⁵Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Московская обл., Российская Федерация

⁶Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, Российская Федерация

*Корреспондирующий автор, e-mail: shum230988@yandex.ru

Поступила в редакцию 21.02.2025 Принята к публикации 25.02.2025

Аннотация

Цель. Определение каталитической активности единичной молекулы пероксидазы хрена (ПХ) в реакции окисления субстрата 2,2'-азино-бис-[3-этилбензтиазолин-6-сульфоната] (АБТС) пероксидом водорода.

Процедура и методы. Для определения (мониторинга) каталитической активности ПХ использовали поровую технологию, что позволило провести анализ активности единичной молекулы ПХ без введения в систему дополнительных компонентов для усиления сигнала. Для этого использовали твёрдотельную пору размером около 5 нм, сформированную методом электронно-лучевого сверления в пластине нитрида кремния толщиной ~40 нм. Молекула ПХ была встроена в эту пору, после чего проводили анализ каталитической активности встроенной в пору молекулы, в присутствии АБТС и H₂O₂ путём измерения ионного тока, протекающего через пору со встроенной в неё молекулой ПХ.

[©] СС ВУ Иванов Ю. Д., Аблеев А. Н., Шумянцева В. В., Шумов И. Д., Зиборов В. С., Неведрова Е. Д., Виноградова А. В., Иванова И. А., Ваулин Н. В., Лебедев Д. В., Букатин А. С., Мухин И. С., Сараева И. Н., Апель П. Ю., Юшков Е. С., Арчаков А. И., 2025.

Результаты. Мониторинг каталитической активности ПХ в реакции окисления АБТС был проведён путём регистрации ионного тока, протекающего через пору.

Теоретическая и/или практическая значимость. Было показано, что изготовленная пора может быть использована для мониторинга каталитической активности ПХ. Полученные результаты важны для развития работ в области исследования ферментов на уровне единичных молекул. *Ключевые слова:* каталитическая активность, пероксидаза хрена, фермент

Благодарности и источники финансирования. Эксперименты по определению активности фермента выполнены в рамках Программы фундаментальных научных исследований в Российской Федерации на долгосрочный период (2021–2030 годы) (№ 122030100168-2). Авторы выражают благодарность ОИВТ РАН за подготовку образцов. Работа по подготовке образцов была выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Государственное задание № 075-00269-25-00).

Для цитирования:

Использование искусственных твердотельных пор для измерения каталитической активности отдельных молекул пероксидазы хрена / Ю. Д. Иванов, А. Н. Аблеев, В. В. Шумянцева, И. Д. Шумов, В. С. Зиборов, Е. Д. Неведрова, А. В. Виноградова, И. А. Иванова, Н. В. Ваулин, Д. В. Лебедев, А. С. Букатин, И. С. Мухин, И. Н. Сараева, П. Ю. Апель, Е. С. Юшков, А. И. Арчаков // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2025. № 1. С.40–51. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-40-51

Original research article

THE USE OF ARTIFICIAL SOLID-STATE PORES FOR MEASUREMENT OF CATALYTIC ACTIVITY OF INDIVIDUAL MOLECULES OF HORSERADISH PEROXIDASE

Yu. Ivanov^{7,2}, A. Ableev⁷, V. Shumyantseva¹, I. Shumov⁷*, V. Ziborov^{7,2}, E. Nevedrova¹, A. Vinogradova¹, I. Ivanova¹, N. Vaulin³, D. Lebedev⁸, A. Bukatin³, I. Mukhin³, I. Saraeva⁴, P. Apel⁶, E. Yushkov⁹, A. Archakov¹

¹Institute of Biomedical Chemistry, Moscow, Russian Federation

²Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation ³Alferov Federal State Budgetary Institution of Higher Education and Science Saint Petersburg National Research Academic University of the Russian Academy of Sciences, Saint-Petersburg, Russian Federation

⁴P. N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation
⁵Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow Region, Russian Federation

⁶National Research Nuclear University MEPhl, Moscow, Russian Federation

*Corresponding author, e-mail: shum230988@yandex.ru

Received by the editorial office 21.02.2025 Accepted for publication 25.02.2025

Abstract

Aim. Determination of the catalytic activity of a single molecule of horseradish peroxidase (HRP) in the oxidation reaction of the substrate 2,2'-azino-bis-[3-ethylbenzthiazoline-6-sulfonate] (ABTS) with hydrogen peroxide.

Methodology. To determine (monitor) the catalytic activity of HRP, pore technology has been used; it has allowed us to analyze the activity of a single HRP molecule without introducing additional components into the system to enhance the signal. For this purpose, a solid-state pore of about 5 nm in size, formed by electron-beam drilling in a silicon nitride plate of ~40 nm thickness, has been used. A HRP molecule has been embedded in this pore, after which the catalytic activity of the molecule embedded in the pore in the presence of ABTS and H_2O_2 has been analyzed by measuring the ion current through the pore with the HRP molecule embedded in it.

Results. A pore detector has been proposed to study the catalytic activity of HRP in the reaction of ABTS oxidation. It has been found that this detector made it possible to monitor the activity of this enzyme by registering of ion current through the pore.

Research implications. It has been shown that the manufactured pore can be used to monitor HRP activity. The results obtained are important for the development of work in the field of enzyme research at the level of single molecules.

Keywords: enzyme, horseradish peroxidase, catalytic activity.

Acknowledgments: The experiments on determination of the enzyme activity were performed within the framework of the Program for Basic Research in the Russian Federation for a long-term period (2021-2030) (No. 122030100168-2). The authors express their gratitude to Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences for sample preparation. The work on sample preparation was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (State Assignment No. 075-00269-25-00).

For citation:

Ivanov, Yu. D., Ableev, A. N., Shumyantseva, V. V., Shumov, I. D., Ziborov, V. S., Nevedrova, E. D., Vinogradova, A. V., Ivanova, I. A., Vaulin, N. V., Lebedev, D. V., Bukatin, A. S., Mukhin, I. S., Saraeva, I. N., Apel, P. Y., Yushkov, E. S. & Archakov, A. I. (2025). The use of artificial solid-state pores for measurement of catalytic activity of individual molecules of horseradish peroxidase. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 1, 40–51. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-40-51

Введение

В последнее время для измерения активности единичных молекул используется метод атомно-силовой микроскопии (АСМ) [1-3]. Он позволяет регистрировать активность единичной молекулы фермента по мониторингу осцилляции зонда атомно-силового микроскопа. Однако для реализации этого метода необходимо дорогое оборудование. К другим методам регистрации функционирования единичных молекул ферментов относится использование природных пор [4–9]. Однако методы на основе природных пор имеют ограничения по размерам пор, что не даёт возможности их использования для регистрации широкого класса ферментов. Подход С использованием искусственных твёрдотельных пор снимает этот недостаток, так как можно синтезировать поры разного диаметра.

Ферментные каталитические системы играют важнейшую роль в различных метаболических процессах. Фермент (белок, обладающий каталитической активностью) пероксидаза хрена (ПХ) выбран в нашей работе для исследования, т. к. этот фермент часто используется в качестве модельного объекта при исследованиях широкого класса пероксидаз и является хорошо изученным ферментом. Пероксидаза участвует в каталитическом окислении

. 42 /

широкого класса органических и неорганических соединений пероксидом водорода (H_2O_2) [10]. Молекулярная масса ПХ составляет около 40 кДа [11]. Определение каталитической активности ПХ может проводиться с помощью характерной реакции с использованием 2,2'-азино-бис-[3-этилбензтиазолин-6-сульфоната] (АБТС) и H_2O_2 , как описано в [12].

В нашей работе с помощью электронного микроскопа были изготовлены поры в SiN размером порядка 5 нм. В такой поре иммобилизовали фермент ПХ, и проводили реакцию окисления АБТС пероксидом водорода H₂O₂. Был осуществлён мониторинг изменения ионного тока, протекающего через пору с этим ферментом в процессе функционирования этого фермента.

Материалы и методы

<u>Реактивы</u>

Фосфатно-солевой буферный раствор в модификации Дульбекко (буфер ФСБ-Д) с концентрацией 2 ммоль/л по фосфат-иону (рН 7.6) готовили из смеси солей, полученной из Pierce (США).

Во всех экспериментах использовали бидистиллированную деионизованную воду, полученную на установке Millipore (США).

Фермент ПХ и субстрат АБТС были получены из Sigma (США).

В экспериментах ПХ использовали в виде раствора в ФСБ-Д.

Раствор АБТС (0,3 ммоль/л АБТС в 2 ммоль/л ФСБ-Д (рН 7.4)) готовили путём растворения АБТС в этом буфере непосредственно перед экспериментом.

Раствор H₂O₂ разбавляли в 2 ммоль/л ФСБ-Д до концентрации 0,003%.

Поровый детектор

Пору формировали в пластине (чипе) SiN толщиной порядка 40 нм с просвечивающего электронного использованием микроскопа высокого разрешения (ЈЕМ 2100f). Диаметр сформированной поры составлял порядка 5 нм. Для изготовления порового детектора SiN-чип со сформированной в нём порой устанавливали в крепёжное место между двумя резервуарами (цис- и транс-) И промывали бидистиллированной деионизованной водой непосредственно перед измерениями.

Два резервуара (цис- и транс-) измерительной ячейки заполняли 700 мкл 1 ммоль/л ФСБ-Д (рН 7.4). Ag/AgCl электроды были вмонтированы для измерения ионного тока, протекающего через пору. Детектор был экранирован с помощью ячейки Фарадея. Для измерений *I* (ионного тока, протекающего через пору) использовали патч-кламп усилитель с уровнем собственного шума 0,3 фА в полосе частот 1000 Гц. Напряжение изменяли в пределах от -300 до 300 мВ. Регистрация сигнала от поры проводилась с частотой 10 кГц с помощью 16-разрядного аналого-цифрового преобразователя (АЦП). Далее сигнал подвергали цифровой фильтрации с помощью низкочастотного фильтра Баттерфорта с частотой среза 1000 Гц. При необходимости после измерения чип промывали деионизованной водой для удаления остатков соли и снова устанавливали в измерительную ячейку.

Эксперимент

Сначала, непосредственно перед измерениями, SiN-чип промывали бидистиллированной деионизованной водой, после чего в обе камеры измерительной ячейки вносили 1 ммоль/л ФСБ-Д буфер и записывали нулевой сигнал.

В холостых опытах исследовали зависимость ионного тока от времени при напряжении -200 мВ, когда в цис-камеру добавляли чистый буфер, а затем добавляли АБТС до концентрации последнего 0,3 ммоль/л. После этого половину объёма раствора откачивали из цис-камеры и туда добавляли раствор H₂O₂. При этом не было отмечено существенных изменений флуктуаций ионного тока. После этого проводили рабочие эксперименты, в которых в цис-камеру измерительной ячейки вносили 10⁻⁸ моль/л раствор ПХ в 2 ммоль/л ФСБ-Д (рис. 1).



Рис. 1 / Fig. 1. Зависимость ионного тока через пору от времени. Стрелками показаны: (1) – добавление раствора ПХ с концентрацией 10⁻⁸ моль/л, напряжение U=-200 мВ;
(2) – переключение полярности напряжения на U=200 мВ; (3) – переключение полярности напряжения на U=-200 мВ; (4) – добавление АБТС, напряжение U=-200 мВ;
(5) – добавление H₂O₂, напряжение U=-200 мВ. Обозначения: ось Х – время (сек), ось Y – ионный ток через пору (пА) / Time dependence of the ion current through the pore. Arrows indicate: (1) – addition of HRP solution with a concentration of 10⁻⁸ mol/l, voltage U=-200 mV;
(2) – switching the voltage polarity to U=200 mV; (3) – switching the voltage polarity to U=-200 mV;
(4) – addition of ABTS, voltage U=-200 mV; (5) – addition of H₂O₂, voltage U=-200 mV. Designations: X-axis – time (sec), Y-axis – ion current through the pore (pA)

Из рис. 1 видно, что для концентрации ПХ С=10⁻⁸ моль/л при поданном напряжении на цис-ячейку относительно транс-ячейки U=-200 мВ наблюдался ионный ток через пору ~ -100 пА. Затем было переключено напряжение: на цис-камеру подавалось напряжение другой полярности U=200 мВ. Как видно, при этом ионный ток через пору менял свой знак и достигал порядка 100 пА. Затем опять меняли полярность в ячейке и устанавливали U=-200 мВ. При этом наблюдалось закрывание поры, так как ионный ток через пору приближался к 0. Затем ячейка заполнялась раствором АБТС, что вызывало изменения сигнала в сторону его увеличения, после этого добавляли H₂O₂ для запуска реакции окисления АБТС. При этом наблюдалась серия флуктуаций сигнала с существенными колебаниями уровня. Эти существенные колебания были присущи работе фермента в течение порядка 1800 секунд.

Обсуждение

В работе было проведено исследование возможности использования поры для анализа активности фермента. Для этого в пору была встроена молекула фермента ПХ и далее наблюдалась зависимость флуктуации ионного тока от времени во время каталитического цикла. За время каталитического цикла наблюдались импульсы ионного тока, которые характеризовали изменения размера поры, за счёт изменения формы фермента, встроенного в пору. Эти флуктуации ионного тока наблюдались достаточно долго в течение 1800 секунд за это время фермент всё ещё продолжал функционировать. Таким образом, показано, что единичные молекулы фермента могут сохранять каталитическую активность на протяжении порядка 0,5 часа. Холостые опыты в отсутствие фермента показали, что не наблюдалось существенных флуктуаций ионного тока, когда в измерительной ячейке отсутствует фермент, а присутствуют только АБТС и H₂O₂. Полученные результаты важны для понимания функционирования ферментов и могут быть использованы для анализа их работы на уровне единичной молекулы.

Заключение

В работе была использована пора с размером порядка 5 нм, что позволило иммобилизовать в ней ПХ. Проведённые эксперименты показали, что такая пора с иммобилизованным ПХ может быть использована для мониторинга каталитической активности этого фермента в присутствии АБТС и H_2O_2 . В процессе функционирования фермента наблюдалась флуктуакции ионного тока в течение 1800 секунд, которые не наблюдались в отсутствие АБТС и H_2O_2 . Полученные результаты имеют большое значение для выяснения механизма функционирования ферментов на уровне единичных молекул.

ЛИТЕРАТУРА

1. АСМ-визуализация, измерение активности и физико-химических свойств единичных мономеров и олигомеров ферментов / Ю. Д. Иванов, Н. С. Бухарина,

Т. О. Плешакова, П. А. Французов, Н. В. Крохин, В. С. Зиборов, А. И. Арчаков // Биофизика. 2011. Т. 56. № 5. С. 939–944.

- АСН-нанотехнология для визуализации, счёта, определения упругости и активности единичных белков цитохром Р 450-содержащих монооксигеназных систем / Ю. Д. Иванов, Н. С. Бухарина, П. А. Французов, Т. О. Плешакова, А. В. Мунро, Г. Хуэй Бон Хоа, А. И. Арчаков // Нанотехнологии и охрана здоровья. 2010. Т. 2. № 1. С. 30–35.
- Direct Observation of enzyme activity with the atomic force microscope / M. Radmacher, M. Fritz, H. G. Hansma, P. K. Hansma // Science. 1994. Vol. 265. Iss. 5178. P. 1577–1579. DOI: 10.1126/science.8079171.
- Measuring enzymatic activities with nanopores / Y. Sheng, S. Zhang, L. Liu, H.-C. Wu // ChemBioChem. 2020. Vol. 21. Iss. 15. P. 2089–2097. DOI: 10.1002/cbic.202000079.
- Nanopore-based measurement of the interaction of P450cam monooxygenase and putidaredoxin at the single-molecule level / H. Chen, Y. Lin, Y.-T. Long, S. D. Minteer, Y.-L. Ying // Faraday Discussions. 2022. Vol. 233. P. 295–302. DOI: 10.1039/d1fd00042j.
- Single-molecule nanopore enzymology / K. Willems, V. van Meervelt, C. Wloka, G. Maglia // Philosophical transactions of the Royal Society B, Biological sciences. 2017. Vol. 372. Iss. 1726. Article no. 20160230. DOI: 10.1098/rstb.2016.0230.
- Label-free and real-time detection of protein ubiquitination with a biological nanopore / C. Wloka, V. van Meervelt, D. V. Gelder, N. Danda, N. Jager, C. P. Williams, G. Maglia // ACS Nano. 2017. Vol. 11. Iss. 5. P. 4387–4394. DOI: 10.1021/acsnano.6b07760.
- A nanopore approach for analysis of caspase-7 activity in cell lysates / B. Pham, S. J. Eron, M. E. Hill, Xin Li, M. A. Fahie, J. A. Hardy, Min Chen // Biophysical Journal. 2019. Vol. 117. Iss. 5. P. 844–855. DOI: 10.1016/j.bpj.2019.07.045.
- A selective activity-based approach for analysis of enzymes with an OmpG nanopore / M. A. Fahie, B. Pham, F. Li, M. Chen // Methods in Molecular Biology. 2021. Vol. 2186. P. 115–133. DOI: 10.1007/978-1-0716-0806-7_9.
- Рогожин В. В., Кутузова Г. Д., Угарова Н. Н. Ингибирование пероксидазы хрена N-этиламидом о-сульфобензоилуксусной кислоты // Биоорганическая химия. 2000. T. 26. № 2. С. 156–160.
- Davies P. F., Rennke H. G., Cotran, R. S. Influence of molecular charge upon the endocytosis and intracellular fate of peroxidase activity in cultured arterial endothelium // Journal of Cell Science. 1981. Vol. 49. Iss. 1. P. 69–86. DOI: 10.1242/jcs.49.1.69.
- Sander S. A., Bray R. C., Smith A. T. pH-dependent properties of a mutant horseradish peroxidase isoenzyme C in which Arg38 has been replaced with lysine // European Journal of Biochemistry. 1994. Vol. 224. Iss. 3. P. 1029–1037. DOI: 10.1111/j.1432-1033.1994.01029.x.

REFERENCES

- Ivanov, Y. D., Bukharina, N. S., Pleshakova, T. O., Frantsuzov, P. A., Krokhin, N. V., Ziborov, V. S. & Archakov, A. I. (2011). Atomic force microscopy visualization and measurement of the activity and physicochemical properties of single monomeric and oligomeric enzymes. In: *Biophysics*, 56 (5), 939–944 (in Russ.).
- Ivanov, Y. D., Bukharina, N. S., Frantsuzov, P. A., Pleshakova, T. O., Munro, A. V., Hui Bon Hoa, G. & Archakov, A. I. (2010). ASN-nanotechnology for visualization, counting, determination of elasticity and activity of single proteins of cytochrome P 450-containing

monooxygenase systems. In: Nanotechnology and Health Protection, 2(1), 30-35 (in Russ.).

- Radmacher, M., Fritz, M., Hansma, H. G. & Hansma, P. K. (1994). Direct Observation of enzyme activity with the atomic force microscope. In: *Science*, 265 (5178), 1577–1579. DOI: 10.1126/science.8079171.
- 4. Sheng, Y., Zhang, S., Liu, L. & Wu, H.-C. (2020). Measuring enzymatic activities with nanopores. In: *ChemBioChem*, 21 (15), 2089–2097. DOI: 10.1002/cbic.202000079.
- Chen, H., Lin, Y., Long, Y.-T., Minteer, S. D. & Ying, Y.-L. (2022). Nanopore-based measurement of the interaction of P450cam monooxygenase and putidaredoxin at the single-molecule level. In: *Faraday Discussions*, 233, 295–302. DOI: 10.1039/d1fd00042j.
- 6. Willems, K., van Meervelt, V., Wloka, C. & Maglia, G. (2017). Single-molecule nanopore enzymology. In: *Philosophical transactions of the Royal Society B, Biological sciences*, 372 (1726), 20160230. DOI: 10.1098/rstb.2016.0230.
- Wloka, C., van Meervelt, V., Gelder, D. V., Danda, N., Jager, N., Williams, C. P. & Maglia, G. (2017). Label-free and real-time detection of protein ubiquitination with a biological nanopore. In: ACS Nano, 11 (5), 4387–4394. DOI: 10.1021/acsnano.6b07760.
- Pham, B., Eron, S. J., Hill, M. E., Xin, Li, Fahie, M. A., Hardy, J. A. & Chen, Min (2019). A nanopore approach for analysis of caspase-7 activity in cell lysates. In: *Biophysical Journal*, 117 (5), 844–855. DOI: 10.1016/j.bpj.2019.07.045.
- Fahie, M. A., Pham, B., Li, F. & Chen, M. (2021). A selective activity-based approach for analysis of enzymes with an OmpG nanopore. In: *Methods in Molecular Biology*, 2186, 115–133. DOI: 10.1007/978-1-0716-0806-7_9.
- Rogozhin, V. V., Kutuzova, G. D. & Ugarova, N. N. (2000). Inhibition of horseradish peroxidase by W-ethylamide of o-sulfobenzoylacetic acid. In: *Russian Journal of Bioorganic Chemistry*, 26 (2), 156–160 (in Russ.).
- Davies, P. F., Rennke, H. G. & Cotran R. S. (1981). Influence of molecular charge upon the endocytosis and intracellular fate of peroxidase activity in cultured arterial endothelium. In: *Journal of Cell Science*, 49 (1), 69–86. DOI: 10.1242/jcs.49.1.69.
- Sander, S. A., Bray, R. C. & Smith, A. T. (1994). pH-dependent properties of a mutant horseradish peroxidase isoenzyme C in which Arg38 has been replaced with lysine. In: *European Journal of Biochemistry*, 224 (3), 1029–1037. DOI: 10.1111/j.1432-1033.1994.01029.x.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Иванов Юрий Дмитриевич (г. Москва) – доктор биологических наук, профессор, заведующий лабораторией нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; ведущий научный сотрудник лаборатории № 6.2. – ударно-волновых воздействий Объединённого института высоких температур Российской академии наук;

https://orcid.org/0000-0001-5041-1914; e-mail: yurii.ivanov.nata@gmail.com

Аблеев Александр Нариманович (г. Москва) – ведущий инженер лаборатории нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича;

https://orcid.org/0009-0004-3096-107X; e-mail: ableev@mail.ru

47

Шумянцева Виктория Васильевна (г. Москва) – доктор биологических наук, профессор, заведующий лабораторией биоэлектрохимии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича;

https://orcid.org/0000-0002-1509-7218; e-mail: v_shumyantseva@mail.ru

Шумов Иван Дмитриевич (г. Москва) – кандидат биологических наук, научный сотрудник лаборатории нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича;

https://orcid.org/0000-0002-9795-7065; e-mail: shum230988@mail.ru

Зиборов Вадим Серафимович (г. Москва) - кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории № 6.2. – ударно-волновых воздействий Объединённого института высоких температур Российской академии наук; ведущий специалист лаборатории нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича;

https://orcid.org/0000-0001-7942-3337; e-mail: ziborov.vs@yandex.ru

Неведрова Екатерина Дмитриевна (г. Москва) – младший научный сотрудник лаборатории нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича;

https://orcid.org/0000-0003-2767-2299; e-mail: nevedrova.kat@yandex.ru

Виноградова Ангелина Владимировна (г. Москва) – младший научный сотрудник лаборатории нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича;

https://orcid.org/0009-0001-6044-3490; e-mail: angeluna1234@bk.ru

Иванова Ирина Александровна (г. Москва) – младший научный сотрудник лаборатории исследований единичных биомакромолекул Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича;

https://orcid.org/0000-0002-2103-2998; e-mail: i.a.ivanova@bk.ru

Ваулин Никита Васильевич (г. Санкт-Петербург) _ лаборант лаборатории возобновляемых источников энергии Санкт-Петербургского национального исследовательского Академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук;

https://orcid.org/0000-0001-6080-0729; e-mail: nikitavaylin@mail.ru

Лебедев Денис Владимирович (г. Санкт-Петербург) – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Санкт-Петербургского национального Академического исследовательского университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук; https://orcid.org/0000-0001-5389-2899; e-mail: denis.v.lebedev@gmail.com

48

Букатин Антон Сергеевич (г. Санкт-Петербург) – кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Санкт-Петербургского национального исследовательского Академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук;

https://orcid.org/0000-0002-5459-1438; e-mail: antbuk.fiztek@gmail.com

Мухин Иван Сергеевич (г. Санкт-Петербург) – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией возобновляемых источников энергии Санкт-Петербургского национального исследовательского Академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук;

https://orcid.org/0000-0001-9792-045X; e-mail: imukhin@yandex.ru

Сараева Ирина Николаевна (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории лазерной нанофизики и биомедицины отделения квантовой радиофизики им. Н. Г. Басова Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук;

https://orcid.org/0000-0003-2362-023X; e-mail: saraevain@lebedev.ru;

Апель Павел Юрьевич (г. Дубна, Московская обл.) – доктор химических наук, начальник Центра прикладной физики Лаборатории ядерных реакций им. Г. Н. Флерова Объединённого института ядерных исследований; https://orcid.org/0000-0003-1259-163X; e-mail: apel@iinr.ru

https://orcid.org/0000-0003-1259-163X; e-mail: apel@jinr.ru

Юшков Евгений Семенович (г. Москва) – кандидат технических наук, доцент кафедры № 71 «Экономика и менеджмент в промышленности» Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ»;

https://orcid.org/0009-0002-9161-0877; e-mail: esyushkov@mephi.ru

Арчаков Александр Иванович (г. Москва) – доктор биологических наук, профессор, научный руководитель Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; академик РАН;

https://orcid.org/0000-0002-2290-8090; e-mail: archak@ibmc.msk.ru;

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Yuri D. Ivanov (Moscow) – Dr. Sci. (Biology), Prof., Laboratory Head, Laboratory of Nanobiotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; Leading Researcher, Laboratory No. 6.2. – Shock wave impacts, Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences;

https://orcid.org/0000-0001-5041-1914; e-mail: yurii.ivanov.nata@gmail.com

Alexander N. Ableev (Moscow) – Leading Engineer, Laboratory of Nanobiotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; https://orcid.org/0009-0004-3096-107X; e-mail: ableev@mail.ru

Victoria V. Shumyantseva (Moscow) – Dr. Sci. (Biology), Prof., Laboratory Head, Laboratory of Bioelectrochemistry, Institute of Biomedical Chemistry; https://orcid.org/0000-0002-1509-7218; e-mail: v_shumyantseva@mail.ru

Ivan D. Shumov (Moscow) – Cand. Sci. (Biology), Researcher, Laboratory of Nanobiotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; https://orcid.org/0000-0002-9795-7065; e-mail: shum230988@mail.ru

Vadim S. Ziborov (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Laboratory No. 6.2. – shock wave impacts, Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences; Leading Specialist, Laboratory of Nanobiotechnology Institute of Biomedical Chemistry;

https://orcid.org/0000-0001-7942-3337; e-mail: ziborov.vs@yandex.ru

Ekaterina D. Nevedrova (Moscow) – Research Assistant, Laboratory of Nanobiotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; https://orcid.org/0000-0003-2767-2299; e-mail: nevedrova.kat@yandex.ru

Angelina V. Vinogradova (Moscow) – Research Assistant, Laboratory of Nanobiotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; https://orcid.org/0009-0001-6044-3490; e-mail: angeluna1234@bk.ru

Irina A. Ivanova (Moscow) – Research Assistant, Laboratory for Research of Single Biomacromolecules, Institute of Biomedical Chemistry; https://orcid.org/0000-0002-2103-2998; e-mail: i.a.ivanova@bk.ru

Nikita V. Vaulin (Saint Petersburg) – Laboratory Assistant, Laboratory for Renewable Energy Sources, Alferov Federal State Budgetary Institution of Higher Education and Science Saint Petersburg National Research Academic University of the Russian Academy of Sciences; https://orcid.org/0000-0001-6080-0729; e-mail: nikitavaylin@mail.ru

Denis V. Lebedev (Saint Petersburg) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Laboratory for Renewable Energy Sources, Alferov Federal State Budgetary Institution of Higher Education and Science Saint Petersburg National Research Academic University of the Russian Academy of Sciences;

https://orcid.org/0000-0001-5389-2899; e-mail: denis.v.lebedev@gmail.com

Anton S. Bukatin (Saint Petersburg) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Senior Researcher, Laboratory for Renewable Energy Sources, Alferov Federal State Budgetary Institution of Higher Education and Science Saint Petersburg National Research Academic University of the Russian Academy of Sciences;

https://orcid.org/0000-0002-5459-1438; e-mail: antbuk.fiztek@gmail.com

Ivan S. Mukhin (Saint Petersburg) – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Laboratory Head, Laboratory for Renewable Energy Sources, Alferov Federal State Budgetary Institution of Higher Education and Science Saint Petersburg National Research Academic University of the Russian Academy of Sciences;

https://orcid.org/0000-0001-9792-045X; e-mail: imukhin@yandex.ru

Irina N. Saraeva (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Researcher, Laboratory for Laser Nanophysics and Biomedicine, Department of Quantum Radiophysics named after N. G. Basov, P. N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences; https://orcid.org/0000-0003-2362-023X; e-mail: saraevain@lebedev.ru

Pavel Yu. Apel (Dubna, Moscow region) – Dr. Sci. (Chemistry), Head of the Center for Applied Physics, Flerov Laboratory of Nuclear Reactions, Joint Institute for Nuclear Research; https://orcid.org/0000-0003-1259-163X; e-mail: apel@jinr.ru

Evgeniy S. Yushkov (Moscow) – Cand. Sci. (Engineering), Assoc. Prof., Department No. 71 "Economics and Management in Industry", National Research Nuclear University MEPhI; https://orcid.org/0009-0002-9161-0877; e-mail: esyushkov@mephi.ru

Alexander I. Archakov (Moscow) – Dr. Sci. (Biology), Prof., Scientific Leader, Institute of Biomedical Chemistry, Academician of the Russian Academy of Sciences; https://orcid.org/0000-0002-2290-8090; e-mail: archak@ibmc.msk.ru

Научная статья УДК 533 6.011 DOI: 10.18384/2949-5067-2025-1-52-65

АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПО ОТНОСИТЕЛЬНЫМ СКОРОСТЯМ МОЛЕКУЛ В УДАРНО-СЖАТОЙ БИНАРНОЙ СМЕСИ ГАЗОВ

Кузнецов М. М., Сатюков Д. Г.*, Кулешова Ю. Д., Владимирова Е. Я., Кузнецов Г. В., Халиков Р. Ф.

Государственный университет просвещения, г. Москва, Российская Федерация *Корреспондирующий автор, e-mail: dsatyukov@gmail.com

> Поступила в редакцию 14.01.2025 Принята к публикации 03.02.2025

Аннотация

Цель - аналитически исследовать существование или отсутствие эффекта перехлёста значений функций распределения по относительным скоростям молекул в ударно-сжатой бинарной смеси газов.

Процедура и методы. Применялись асимптотические и аппроксимационные методы математической физики.

Результаты. Аналитически показано, что в модифицированной бимодальной модели ударносжатой бинарной смеси газов существуют эффекты перехлёста функций распределения по относительным скоростям молекул. Эти эффекты, заключающиеся в превышении количеств энергетически активных молекул, преодолевающих порог барьерных процессов внутри фронта волны по сравнению с аналогичным количеством за ней, могут иметь место в широком диапазоне значений молекулярных масс и концентраций в ударно-сжатой бинарной смеси газов.

Теоретическая и практическая значимость. Полученные аналитические результаты имеют существенное значение для выяснения вопроса о необходимости учёта поступательной неравновесности при определении коэффициентов скоростей энергетически активированных неупругих соударений внутри фронтов ударных волн.

Ключевые слова: асимптотическая модель, эффект перехлёста, рэлеевская смесь, неравновесность

Для цитирования:

Аналитические свойства функций распределения по относительным скоростям молекул в ударно-сжатой бинарной смеси газов / М. М. Кузнецов, Д. Г. Сатюков, Ю. Д. Кулешова, Е. Я. Владимирова, Г. В. Кузнецов, Р. Ф. Халиков // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2025. № 1. С.52–65. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-52-65

[©] СС ВУ Кузнецов М. М., Сатюков Д. Г., Кулешова Ю. Д., Владимирова Е. Я., Кузнецов Г. В., Халиков Р. Ф., 2025.

Original research article

ANALYTICAL PROPERTIES OF DISTRIBUTION FUNCTIONS FOR RELATIVE VELOCITIES OF MOLECULES IN A SHOCK-COMPRESSED BINARY MIXTURE **OF GASES**

M. Kuznetsov, D. Satyukov*, Y. Kuleshova, E. Vladimirova, G. Kuznetsov, R. Halikov

Federal State University of Education, Moscow, Russian Federation *Corresponding author, e-mail: dsatyukov@gmail.com

> Received by the editorial office 14.01.2025 Accepted for publication 03.02.2025

Abstract

Aim: to analytically investigate the existence or absence of the effect of overlapping values of distribution functions for relative velocities of molecules in a shock-compressed binary mixture of gases.

Methodology. Asymptotic and approximation methods of mathematical physics were used.

Results. It is analytically shown that in the modified bimodal model of a shock-compressed binary mixture of gases, there are effects of overlapping distribution functions with respect to the relative velocities of molecules. These effects, consisting in an excess of the amounts of energetically active molecules overcoming the threshold of barrier processes inside the wave front compared with a similar amount beyond it, can occur in a wide range of molecular weights and concentrations in a shock-compressed binary mixture of gases.

Research implications. The obtained analytical results are essential for clarifying the issue of the need to take into account translational disequilibrium when determining the velocity coefficients of energetically activated inelastic collisions inside shock wave fronts.

Keywords: asymptotic model, overlap effect, Rayleigh mixture, disequilibrium

For citation:

Kuznetsov, M. M., Satyukov, D. G., Kuleshova, Y. D., Vladimirova, E. Ya., Kuznetsov, G. V. & Halikov, R. F. (2025). Analytical properties of distribution functions for relative velocities of molecules in a shock-compressed binary mixture of gases. In: Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics, 1, 52-65. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-52-65

Введение

Известно, что поступательная неравновесность внутри фронтов ударных волн, проявляющаяся в «забросе» (или что тоже самое в «перехлёсте» – термин, используемый в иностранной литературе) величин макроскопических параметров, например, таких как температура или концентрации молекул, участвующих в энергетически активированных кинетических процессах, представляет большой интерес в ряде авиационных и физико-химических технологий. Например, повышение скорости горения топлива в детонационной волне позволит обойтись без камеры сгорания и сделать экологически чистыми выбросы продуктов реакции. В лабораторных условиях повышение числа энергетически активных молекул внутри фронтов ударных волн может способствовать увеличению выхода количества новых нано- и мета-материалов.

В предыдущих работах авторов основное внимание уделялось лабораторному способу использования эффектов перехлёста в перспективных технологиях [1; 2].

В аэродинамических проблемах, таких как спуск космических аппаратов в атмосферах планет Солнечной системы, эффект перехлёста также представляет большой интерес, например, в связи с ускорением процессов обменных химических реакций. С экологической точки зрения даже небольшое увеличение выхода «ядов»: окислов азота, углерода и т. д. может стать губительным для живой биосферы.

В последнее время эффекты перехлёста стали представлять интерес и для фармакологии, поскольку спекание «летучих металлов» с углеродными наноматериалами в ударных волнах приводило к образованию веществ, обладающих лечебными онкологическими свойствами.

В настоящей работе модифицированная бимодальная модель ударно-сжатых смесей газов, предложенная ранее в работе [3] и развитая в предыдущих работах авторов до уровня аналитического определения функций распределения молекул по относительным скоростям, применена к исследованию проблемы существования эффектов перехлёста для величин этих функций.

1. Функции распределения по модулю относительной скорости молекул внутри фронта ударной волны в бинарной смеси газов

Функции распределения пар молекул по модулю относительной тепловой скорости и пространственной координате внутри фронта ударной волны были получены ранее в работах авторов [1; 2]. Для аналитического представления этих функций была использована модифицированная бимодальная модель Тамма - Мотт-Смита, априорно задающая аналитическую аппроксимацию функций распределений отдельных молекул в ударно сжатой смеси газов [3]. Построенные авторами на основе этих одночастичных распределений аналитические представления двухчастичных распределений имели различный вид в зависимости от молекулярного состава взаимодействующих пар молекул. В бинарной смеси газов можно составить три сорта пар взаимодействующих молекул и соответствующих им три сорта двухчастичных распределений [4]. Эти двухчастичные распределения являются плотностями вероятностей H₁₁, H₂₂, H₁₂, относящихся соответственно к парам частиц лёгкой компоненты (молекулярная масса m₁), тяжёлой компоненты (молекулярная масса m₂) и парам частиц (с различной молекулярной массой m₁ и m₂):

ISSN 2949-5083

1.1. Плотность вероятности взаимодействий частиц лёгкой компоненты бинарной смеси Н₁₁:

$$\begin{split} &H_{11}(\mathbf{c},\mathbf{x}) = \varepsilon^{2}N_{1}^{-2}(x) < \Phi_{1}^{(-)}(\vec{c})\Phi_{1}^{(-)}(\vec{c}) > + \varepsilon N_{1}^{-2}(x) < \Phi_{1}^{(-)}(\vec{c})\Delta_{1}(\vec{c}) > a(x) \\ &+ \varepsilon N_{1}^{-1}(x)N_{2}^{-1}(x)\rho_{12} < \Phi_{1}^{(-)}(\vec{c})\Delta_{2}(\vec{c}) > \tilde{a} (x) + \varepsilon N_{1}^{-2}(x) < \Phi_{1}^{(-)}(\vec{c})\Delta_{1}(\vec{c}) > a(x) + \\ &N_{1}^{-2}(x) < \Delta_{1}(\vec{c})^{2} > a(x)^{2} + N_{1}^{-1}(x) N_{2}^{-1}(x)\rho_{12} < \Delta_{1}(\vec{c})\Delta_{2}(\vec{c}) > a(x)\tilde{a} (x) + \varepsilon \\ &N_{1}^{-1}(x)N_{2}^{-1}(x)\rho_{12} < \Phi_{1}^{(-)}(\vec{c})\Delta_{2}(\vec{c}) > \tilde{a} (x) + N_{1}^{-1}(x)N_{2}^{-1}(x)\rho_{12} < \Delta_{1}(\vec{c})\Delta_{2}(\vec{c}) > \\ &a(x)\tilde{a}(x) + N_{2}^{-2}(x)\rho_{12}^{-2} < \Delta_{2}(\vec{c})^{2} > \tilde{a}(x)^{2} \end{split}$$

1.2. Плотность вероятности взаимодействий частиц тяжёлой компоненты H₂₂:

 $\begin{aligned} &H_{22} (\mathbf{c}, \mathbf{x}) = N_2^{-2}(x) \left\{ \epsilon^2 < \Phi_2^{(-)}(\vec{c}) \Phi_2^{(-)}(\vec{c}) > + \epsilon \left[< \Phi_2^{(-)}(\vec{c}) \Delta_2(\vec{c}) > + < \Phi_2^{(-)}(\vec{c}) \right. \\ &\Delta_2(\vec{c}) > \left] a(x) + < \Delta_2(\vec{c}) \Delta_2(\vec{c}) > a^2(x) + \epsilon \left[\rho_{21} < \Phi_2^{(-)}(\vec{c}) \Delta_2(\vec{c}) > + \rho_{21} < \Phi_2^{(-)}(\vec{c}) \right. \\ &\Delta_2(\vec{c}) > \left] \tilde{a}(x) + \rho_{21}\rho_{21} < \Delta_1(\vec{c}) \Delta_1(\vec{c}) > \tilde{a}^2(x) + \rho_{21} < \Delta_1^2(\vec{c}) > a(x)\tilde{a}(x) + \rho_{21} < \Delta_1^2(\vec{c}) \right. \\ &> \tilde{a}(x)a(x) \right\} \end{aligned}$

1.3. Плотность вероятности взаимодействий частиц лёгкой и тяжёлой компонент H₁₂:

$$\begin{split} &H_{12} (\mathbf{c}, \mathbf{x}) = N_1^{-1}(x) N_2^{-1}(x) \left\{ \epsilon^2 < \Phi_1^{(-)}(\vec{c}) \Phi_2^{(-)}(\vec{c}) > + \epsilon \left[< \Phi_1^{(-)}(\vec{c}) \Delta_2(\vec{c}) > + < \right. \right. \\ &\Phi_2^{(-)}(\vec{c}) \Delta_1(\vec{c}) > \right] a(x) + < \Delta_1(\vec{c}) \Delta_2(\vec{c}) > a^2(\mathbf{x}) + \epsilon \left[\rho_{21} < \Phi_1^{(-)}(\vec{c}) \Delta_1(\vec{c}) > + \rho_{12} < \right. \\ &\Phi_2^{(-)}(\vec{c}) \Delta_2(\vec{c}) > \right] \tilde{a}(x) + \rho_{12} \rho_{21} < \Delta_2(\vec{c}) \Delta_1(\vec{c}) > \tilde{a}^2(\mathbf{x}) + \rho_{21} < \Delta_1^2(\vec{c}) > a(x) \tilde{a}(x) + \rho_{12} < \right. \\ &\Phi_{12}^{(-)}(\vec{c}) \Delta_2^2(\vec{c}) > \tilde{a}(x) a(x) \right\}$$

где є⁻¹ – степень сжатия в ударной волне, ρ_{12} – отношение молекулярных масс компонентов бинарной смеси, $\rho_{12} = m_2 / m_1 = \rho_{21}^{-1}$, величины в угловых скобках:

Спонили $\Delta_1(\vec{c}) = [\Phi_1^{(+)}(\vec{c}) - \varepsilon \Phi_1^{(-)}(\vec{c})], \Delta_2(\vec{c}) = [\Phi_2^{(+)}(\vec{c}) - \varepsilon \Phi_2^{(-)}(\vec{c})]; \Phi_1^{(-)}(\vec{c}), \Phi_2^{(-)}(\vec{c}), \Phi_1^{(+)}(\vec{c}), \Phi_2^{(+)}(\vec{c})$ и их произведения представляют собой подинтегральные функции, интегрируемые по всем угловым переменным в трёхмерном пространстве тепловых скоростей молекул, зависящие после интегрирования от модуля относительной скорости пар молекул; плотности вероятностей $\Phi_1^{(-)}(\vec{c}), \Phi_2^{(-)}(\vec{c}), \Phi_1^{(+)}(\vec{c}), \Phi_2^{(+)}(\vec{c})$ являются максвелловскими распределениями обоих сортов газа 1 и 2 (нижний индекс) на входе в ударную волну (верхний индекс минус) и выходе из неё (верхний индекс плюс); величины N₁ и N₂, равные N₁(x) = $\varepsilon + (1-\varepsilon)a(x) + (1-\varepsilon)\tilde{a}(x)\rho_{12}, N_2(x) = \varepsilon + (1-\varepsilon)a(x) + (1-\varepsilon)\tilde{a}(x)\rho_{21} (1.4),$

являются нормировочными множителями; коэффициенты a(x) и $\tilde{a}(x)$ зависят только от координаты x внутри фронта ударной волны и изменяются в диапазоне от 0 до 1 [1–3].

Для удобства выполнения последующих преобразований и уменьшения громоздкости равенств (1.1–1.3) введём следующие компактные обозначения:

Функции модуля относительной скорости пар молекул g вычислялись ранее. Для однокомпонентного газа в работах [5; 6], для смесей – в [7–9]. В соответствии с терминами, введёнными в [5; 6], функции $G_{ii}^{(-)}$, $G_{ij}^{(+)}$, $G_{ij}^{(-,+)}$, $G_{ij}^{(+,-)}$ могут быть названы как «холодная», «горячая» и «перекрёстная» моды распределений пар молекул. При этом среди «перекрёстных» мод оказываются одинаковыми следующие:

$$G_{ij}^{(-,+)} = G_{ji}^{(+,-)}; \qquad G_{ji}^{(-,+)} = G_{ij}^{(+,-)}$$
(1.6)

Приведём эти моды распределения пар молекул для рассматриваемого случая:

$$G_{12}^{(+)}(g) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (\frac{\mu}{2kT_c})^{3/2} g^2 \exp(-\frac{\mu}{2kT_c} g^2), \qquad G_{12}^{(-)}(g) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (\frac{\mu}{2kT_b})^{3/2} g^2 \exp(-\frac{\mu}{2kT_b} g^2),$$

$$G_{11}^{(+)}(g) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_1}{4kT_c})^{3/2} g^2 \exp(-\frac{m_1}{4kT_c} g^2), \qquad G_{11}^{(-)}(g) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_1}{4kT_b})^{3/2} g^2 \exp(-\frac{m_1}{4kT_b} g^2),$$

$$G_{22}^{(+)}(g) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_2}{4kT_c})^{3/2} g^2 \exp(-\frac{m_2}{4kT_c} g^2), \qquad G_{22}^{(-)}(g) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_2}{4kT_b})^{3/2} g^2 \exp(-\frac{m_2}{4kT_b} g^2),$$

$$G_{12}^{(+,-)}(g) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (\frac{\mu}{2kT_{c1}})^{1/2} (\frac{g}{u}) \exp(-\frac{\mu(g-u)^2}{2kT_{c1}}), \qquad G_{21}^{(+,-)}(g) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{\mu}{2kT_{c2}})^{1/2} (\frac{g}{u}) \exp(-\frac{\mu(g-u)^2}{2kT_{c2}}),$$

$$G_{11}^{(+,-)}(g) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_1}{2kT_{cb}})^{1/2} (\frac{g}{u}) \exp(-\frac{m_1(g-u)^2}{2kT_{cb}}), \quad G_{22}^{(+,-)}(g) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_2}{2kT_{cb}})^{1/2} (\frac{g}{u}) \exp(-\frac{m_2(g-u)^2}{2kT_{cb}}), \quad (1.7)$$

где µ – приведённая масса, µ = $m_1 m_2/(m_1 + m_2)$, u = (u_b - u_c), u_b, T_b – скорость и температура смеси газов на входе в волну, u_c , T_c – скорость и температура на выходе, T_{c1} , T_{c2} , T_{cb} – т. н. эффективные температуры, $T_{c1} = (m_1 T_c + m_2 T_b)/(m_1 + m_2)$, $T_{c2} = (m_2 T_c + m_1 T_b)/(m_1 + m_2)$, $T_{cb} = (T_c + T_b)/2$.

、56 /

Учитывая формулы (1.5), (1.6) и аналогичные им (в которых для краткости опустим аргументы), представим равенства (1.1) – (1.3) следующим образом: $H_{11} = \varepsilon^2 N_1^{-2} G_{11}^{(-)} + 2\varepsilon N_1^{-2} \{G_{11}^{(-,+)} - \varepsilon G_{11}^{(-)}\} a + 2\varepsilon N_1^{-1} N_2^{-1} \rho_{12} \{G_{12}^{(-,+)} - \varepsilon G_{12}^{(-)}\} \tilde{a} + N_1^{-2} \{G_{11}^{(+)} - 2\varepsilon G_{11}^{(+,-)} + \varepsilon^2 G_{11}^{(-)}\} a^2 + 2N_1^{-1} N_2^{-1} \rho_{12} \{G_{12}^{(+)} - \varepsilon G_{12}^{(+,-)} + \varepsilon^2 G_{11}^{(-)}\} a^2 + 2N_1^{-1} N_2^{-1} \rho_{12} \{G_{12}^{(+)} - \varepsilon G_{12}^{(+,-)} + \varepsilon^2 G_{12}^{(-)}\} a^2 + (1.8)$

$$\begin{split} &H_{22}\left(g,x\right) = N_{2}^{-2}(x) \left\{ \varepsilon^{2} \left(G_{22}^{(+)} - 2 \varepsilon G_{22}^{(+,-)} + \varepsilon^{2} G_{22}^{(-)}\right) + \varepsilon \left[\left(G_{22}^{(-,+)} - \varepsilon G_{22}^{(-)}\right) + \varepsilon G_{22}^{(-)}\right) \right\} \\ &\varepsilon \left[G_{22}^{(-,+)} - \varepsilon G_{22}^{(-)}\right] \left[\tilde{a}(x) + \rho_{21} - \rho_{21}(G_{11}^{(+)} - 2 \varepsilon G_{11}^{(+,-)} + \varepsilon^{2} G_{11}^{(-)}\right) \right] \\ &\tilde{a}^{2}(x) + \rho_{21} - \left(G_{11}^{(+)} - 2 \varepsilon G_{11}^{(+,-)} + \varepsilon^{2} G_{11}^{(-)}\right) - a(x)\tilde{a}(x) + \rho_{12} - \left(G_{11}^{(+)} - 2 \varepsilon G_{11}^{(+)}\right) \right] \\ &\tilde{a}^{2}(x) + \rho_{21} - \left(G_{11}^{(+)} - 2 \varepsilon G_{11}^{(+,-)} + \varepsilon^{2} G_{11}^{(-)}\right) - a(x)\tilde{a}(x) + \rho_{12} - \left(G_{11}^{(+)} - 2 \varepsilon G_{11}^{(+)}\right) \right] \\ &H_{12}\left(g,x\right) = N_{1}^{-1}(x)N_{2}^{-1}(x) \left\{ \varepsilon^{2} G_{12}^{(-)} + \varepsilon \left[G_{12}^{(+,-)} - \varepsilon G_{12}^{(-)} + G_{21}^{(-,+)} - \varepsilon G_{12}^{(-)}\right] a(x) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\Pi_{12}(\mathbf{g},\mathbf{x}) = N_1^{-1}(\mathbf{x})N_2^{-1}(\mathbf{x}) \left\{ \varepsilon \ G_{12}^{-1} + \varepsilon \ G_{12}^{-1} \right\} d(\mathbf{x}) \\ &+ \left[G_{12}^{(+)} - \varepsilon \ G_{12}^{(+,-)} - \varepsilon \ G_{12}^{(-,+)} + \varepsilon^2 G_{12}^{(-)} \right] a^2(\mathbf{x}) + \varepsilon \left[\rho_{21}(\ G_{11}^{(-,+)} - \varepsilon \ G_{11}^{(-)}) + \rho_{12}(\ G_{22}^{(-,+)}) \right] a(\mathbf{x}) + \rho_{12} \rho_{21}(\ G_{21}^{(+)} - \varepsilon \ G_{21}^{(+,-)} - \varepsilon \ G_{21}^{(-,+)} + \varepsilon^2 G_{21}^{(-)}) \tilde{a}^2(\mathbf{x}) + \rho_{21}(\ G_{11}^{(+)} - \varepsilon \ G_{11}^{(+)}) a(\mathbf{x}) \tilde{a}(\mathbf{x}) + \rho_{12}(\ G_{22}^{(+,-)} - \varepsilon \ G_{22}^{(+,-)} + \varepsilon^2 G_{22}^{(-)}) \tilde{a}(\mathbf{x}) a(\mathbf{x}) \right\} (1.10) \end{aligned}$$

В более кратком виде формулы (1.8) – (1.10) можно представить следующим образом:

 $H_{11}(g,x) = N_1^{-2}G_{11},$ $H_{22}(g,x) = N_1^{-2}G_{22},$ $H_{12}(g,x) = N_1^{-1}N_2^{-1}G_{12},$ (1.11) где множители G_{12}, G_{11}, G_{22} соответствуют выражениям, записанным в фигурных скобках правых частей равенств (1.8) – (1.10).

2. Структура функций распределения пар молекул по модулю относительной скорости, когда параметр *ρ* равен единице

Далее для упрощения задачи рассмотрим подмножество значений параметра *р*12, когда

$$\rho_{12} = \rho_{21} = \rho = 1, \tag{2.1}$$

Этот случай часто встречается в численных расчётах структур ударно-сжатых смесей газов методом прямого статистического моделирования Монте-Карло [10]. Нормировочные функции (1.4) приобретут более простой вил:

$$N_1(x) = N_2(x) = N(x) = \varepsilon + (1-\varepsilon)[a(x) + \tilde{a}(x)], \qquad (2.2)$$

Формулы (1.11) можно представить следующим образом:

$$H_{12}(g,x) = N^{-2}G_{12}, \qquad H_{11}(g,x) = N^{-2}G_{11}, \qquad H_{22}(g,x) = N^{-2}G_{22},$$
 (2.3)

Статистические распределения по модулю относительной скорости пар молекул G₁₁, G₂₂, G₁₂, (1.6) приобретут следующий структурный вид:

$$G_{11} = \{ \epsilon^2 G_{11}^{(-)} + Q_1 a + Q_2 a^2 + Q_3 \tilde{a} + Q_4 \tilde{a}^2 + Q_5 a \tilde{a} \}$$
(2.4)

2025 / № 1

$$G_{22} = \{ \varepsilon^2 G_{22}^{(-)} + \varepsilon R_1 a + R_2 a^2 + \varepsilon R_3 \tilde{a} + R_4 \tilde{a}^2 + R_5 a \tilde{a} \}$$
(2.5)

$$G_{12} = \{ \varepsilon^2 G_{12}^{(-)} + \varepsilon G_1 a + G_2 a^2 + \varepsilon G_3 \tilde{a} + G_4 \tilde{a}^2 + G_5 a \tilde{a} + G_6 \tilde{a} a \}$$
(2.6)

В формуле (2.4) коэффициенты Q_1, Q_2, Q_3, Q_4, Q_5 соответственно равны:

$$Q_{1}=2\varepsilon \{G_{11}^{(+)} - \varepsilon G_{11}^{(-)}\}$$

$$Q_{2}=\{G_{11}^{(+)} - 2\varepsilon G_{11}^{(+,-)} + \varepsilon^{2} G_{11}^{(-)}\}$$

$$Q_{3}=2\varepsilon \{G_{12}^{(-,+)} - \varepsilon G_{12}^{(-)}\}$$

$$Q_{4}=\{G_{22}^{(+)} - 2\varepsilon G_{22}^{(+,-)} + \varepsilon^{2} G_{22}^{(-)}\}$$

$$Q_{5}=2\{G_{12}^{(+)} - \varepsilon G_{12}^{(+,-)} - \varepsilon G_{12}^{(-,+)} + \varepsilon^{2} G_{12}^{(-)}\}$$

$$(2.7)$$

Проведём асимптотическое упрощение коэффициентов функций распределения пар молекул (зависящих от модуля относительной скорости) при использовании высокоскоростного предельного перехода $\varepsilon \to 0$, $T_b \to 0$, $\beta = m_2 / m_1 > 1$, g=u, используя значения из (1.7).

$$\begin{aligned} & Q_{l} = 2\varepsilon \{G_{11}^{(-,+)} - \varepsilon G_{11}^{(-)}\} \rightarrow Q_{l} = 2\varepsilon G_{11}^{(-,+)} = 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{1}}{2kT_{cb}})^{1/2} (\frac{m_{1}}{y}) \exp(-\frac{m_{1}(g-u)^{2}}{2kT_{cb}}) \rightarrow \\ & Q_{l} = 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{1}}{2kT_{cb}})^{1/2} \\ & \rightarrow Q_{l} = 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{1}}{kT_{c}})^{1/2} \\ & Q_{2} \rightarrow Q_{2} = G_{11}^{(+)} - 2\varepsilon G_{11}^{(+,-)} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{1}}{kT_{c}})^{3/2} g^{2} \exp(-\frac{m_{1}}{4kT_{c}} g^{2}) - 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{1}}{2kT_{cb}})^{1/2} (\frac{g}{u}) \exp(-\frac{m_{1}(g-u)^{2}}{2kT_{cb}}) , \\ & \rightarrow Q_{2} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{1}}{kT_{c}})^{3/2} g^{2} \exp(-\frac{m_{1}}{4kT_{c}} g^{2}) - 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{1}}{2kT_{cb}})^{1/2} , \rightarrow Q_{2} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (\frac{m_{1}}{kT_{c}})^{3/2} g^{2} \exp(-\frac{m_{1}}{4kT_{c}} g^{2}) - 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{1}}{kT_{c}})^{3/2} g^{2} \exp(-\frac{m_{1}}{4kT_{c}} g^{2}) - 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{1}}{kT_{c}})^{1/2} , \\ & Q_{3} \rightarrow Q_{3} = 2\varepsilon G_{12}^{(-,+)} = 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{2}}{2kT_{c2}})^{1/2} (\frac{g}{u}) \exp(-\frac{\mu(g-u)^{2}}{2kT_{c2}}) , \rightarrow Q_{3} = 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{1}}{2kT_{c2}})^{1/2} \\ & \qquad Q_{4} \rightarrow Q_{4} = G_{22}^{(+)} - 2\varepsilon G_{22}^{(+,-)} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{2}}{4kT_{c}})^{3/2} g^{2} \exp(-\frac{m_{2}}{4kT_{c}} g^{2}) - 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{2}}{kKT_{c}})^{1/2} (\frac{g}{u}) \exp(-\frac{m_{2}}{2kT_{cb}})^{1/2} \\ & \qquad Q_{5} = 2\{G_{12}^{(+,-)} - \varepsilon G_{12}^{(+,-)} - \varepsilon G_{12}^{(-,+)}\} = \frac{8}{\sqrt{\pi}} (\frac{\mu}{kKT_{c}})^{3/2} g^{2} \exp(-\frac{\mu}{2kT_{cb}})^{1/2} g \\ & \qquad Q_{5} = 2\{G_{12}^{(+)} - \varepsilon G_{12}^{(+,-)} - \varepsilon G_{12}^{(-,+)}\} = \frac{8}{\sqrt{\pi}} (\frac{\mu}{kKT_{c}})^{3/2} g^{2} \exp(-\frac{\mu}{2kT_{cb}} g^{2}) - 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{2}}{kKT_{c}})^{3/2} g^{2} \exp(-\frac{\mu}{2kT_{cb}} g^{2}) - 2\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\frac{m_{2}}{kKT_{c}})^{3/2} g^{2} \exp(-\frac{\mu}{2kT_{c}} g^{2})$$

ISSN 2949-5083

$$R_{1}=2\{G_{22}^{(-,+)}-\varepsilon G_{22}^{(-)}\}$$

$$R_{2}=\{G_{22}^{(+)}-2\varepsilon G_{22}^{(+,-)}+\varepsilon^{2} G_{22}^{(-)}\}$$

$$R_{3}=2\{G_{21}^{(-,+)}-\varepsilon G_{21}^{(-)}\}$$

$$R_{4}=\{G_{11}^{(+)}-2\varepsilon G_{11}^{(+,-)}+\varepsilon^{2} G_{11}^{(-)}\}$$

$$R_{5}=2\{G_{21}^{(+)}-\varepsilon G_{21}^{(+,-)}-\varepsilon G_{21}^{(-,+)}+\varepsilon^{2} G_{21}^{(-)}\}$$
(2.9)

Наконец, коэффициенты G₁, G₂, G₃, G₄, G₅, G₆ в формуле (2.6) равны:

$$G_{1} = G_{12}^{(+,-)} - \varepsilon \ G_{12}^{(-)} + G_{21}^{(-,+)} - \varepsilon \ G_{12}^{(-)} = 2[G_{12}^{(+,-)} - \varepsilon \ G_{12}^{(-)}],$$

$$G_{2} = G_{12}^{(+)} - \varepsilon \ G_{12}^{(+,-)} - \varepsilon \ G_{12}^{(-,+)} + \varepsilon^{2}G_{12}^{(-)},$$

$$G_{3} = G_{11}^{(-,+)} - \varepsilon \ G_{11}^{(-)} + G_{22}^{(-,+)} - \varepsilon \ G_{22}^{(-)},$$

$$G_{4} = G_{21}^{(+)} - \varepsilon \ G_{21}^{(+,-)} - \varepsilon \ G_{21}^{(-,+)} + \varepsilon^{2}G_{21}^{(-)},$$

$$G_{5} = G_{11}^{(+)} - 2\varepsilon G_{11}^{(+,-)} + \varepsilon^{2}G_{11}^{(-)},$$

$$G_{6} = G_{22}^{(+)} - 2\varepsilon G_{22}^{(+,-)} + \varepsilon^{2}G_{22}^{(-)}$$
(2.10)

Для количественной оценки эффектов перехлёста функций пар молекул H_{12} , H_{11} , H_{22} найдём отличия их Δ H_{12} , Δ H_{11} , Δ H_{22} от своих соответствующих равновесных значений:

$$\Delta H_{12} = (H_{12} - G_{12}^{(+)}) > 0, \quad \Delta H_{11} = (H_{11} - G_{11}^{(+)}) > 0, \quad \Delta H_{22} = (H_{22} - G_{22}^{(+)}) > 0 \quad (2.11)$$

Положительные значения величин (2.10) будут соответствовать абсолютным значениям величин перехлёста функций распределения соответствующих пар молекул. Ясно, что для относительных величин эффектов перехлёста будет:

$$(\Delta H_{12}) |_{ref} = (\Delta H_{12}) / G_{12}^{(+)} > 0, \quad (\Delta H_{11}) |_{ref} = (\Delta H_{11}) / G_{11}^{(+)} > 0, \quad (\Delta H_{22}) |_{ref} = (\Delta H_{22}) / G_{22}^{(+)} > 0,$$

$$(2.12)$$

3. Сокращение числа макроскопических параметров в модифицированной бимодальной модели

В настоящей работе предлагается уменьшить в модифицированной модели [3] число параметров, меняющихся по ширине фронта ударной волны, сведя его, как и в классической модели, к одному.

При этом число остальных необходимых допущений, использованных для формулировки априорной аппроксимации, остаётся тем же, что и в [11].

Ниже предлагается представить второй параметр \tilde{a} модели [1] в виде следующей функциональной зависимости от первого параметра a:

$$\tilde{a} = a(1 - a) \tag{3.1}$$

Более общий вид аналитической зависимости второго параметра \tilde{a} как функции первого параметра a, который соответствовал бы исходной модифицированной модели [3], можно представить как

$$\tilde{a} = a^m (1 - a)^n f(a) \tag{3.2}$$

Здесь степени *m* или *n* – целые или дробные положительные числа (в зависимости от исследования особенностей на входе в ударную волну при a = 0 и выходе из неё при a = 1), f(a) – некоторая гладкая аналитическая функция.

Ниже мы используем выражение (3.1) для оценки существования эффекта перехлёста функции распределения по модулю относительной скорости пар молекул тяжёлого компонента ударно сжатой смеси газов.

Термин «эффект перехлёста», используемый в научной литературе по кинетике частиц различных сред, означает преобладание во фронте ударной волны количества энергетически активных молекул над количеством аналогичных молекул за её фронтом. Под энергетически активными молекулами понимаются молекулы с кинетической энергией значительно большей, чем средняя энергия теплового движения.

4. Оценка эффекта перехлёста в бинарной смеси ударно сжатых газов

Рассмотрим с аналитических позиций эффект перехлёста в тяжёлом компоненте ударно сжатой бинарной смеси газов (m₂ > m₁), в котором, судя по результатам численных исследований, указанный эффект существует и наиболее значителен по сравнению с лёгким компонентом. Численные результаты не дают полной информации об условиях существования эффекта перехлёста.

Покажем, что в рамках модифицированной бимодальной модели такие условия можно установить.

Ранее в работах авторов [1; 2] были найдены функции распределения пар молекул по модулю их относительных тепловых скоростей для всех трёх их возможных сортов. Пары, составленные из молекул: лёгкого компонента, тяжёлого компонента и смешанного состава компонента. Соответствующие им функции распределения обозначались как H₁₁, H₂₂ и H₁₂. Однако для последующих аналитических преобразований они оказались слишком громоздкими. Громоздкость формул для функций H₁₁, H₂₂ и H₁₂ удалось устранить, воспользовавшись теми же физическими условиями, которые реализуются в высокоскоростном газодинамическом эксперименте на ударных трубах при наблюдении структур сильных ударных волн.

Эти условия можно записать в следующем математическом виде:

$$\varepsilon \to 0, T_b \to 0, \beta = m_2 / m_1 > 1, g = u, \qquad \rho_{12} = 1,$$
 (4.1)

где ε – обратная величина степени сжатия, T_b – температура «холодной» бинарной смеси газов в потоке, набегающем на ударную волну со скоростью и, g – модуль относительной скорости в парах молекул, приближённо равный $(2E_a/\mu)^{1/2}$, где E_a – энергия активации барьерного кинетического процесса, ρ_{12} – основной параметр подобия в исследованиях эффекта перехлёста [5], $\rho_{12} = n_2 m_2 / n_1 m_1$ ISSN 2949-5083

В силу условий (4.1) выражения для H₁₁, H₂₂ и H₁₂ сильно упрощаются.

Далее для выявления наличия или отсутствия эффекта перехлёста удобно перейти к относительным значениям функций пар молекул H₁₁|_{ref}, H₂₂|_{ref} и H₁₂|_{ref}, поделив H₁₁, H₂₂ и H₁₂ на соответствующие им поступательно равновесные значения. В частности для H₂₂|_{ref} будет:

$$\begin{aligned} H_{22}|_{ref} &= N^{-2} \left[\varepsilon K \{ a - a^2 + (\frac{1}{\beta})^{1/2} \ \tilde{a} - (\frac{1}{\beta})^{1/2} \ \tilde{a}^2 - (1 + (\frac{1}{\beta})^{1/2}) \ a\tilde{a} \} + a^2 \right] = \\ &= N^{-2} \left[\varepsilon K \{ (a + (\frac{1}{\beta})^{1/2} \ \tilde{a}) [1 - a - \tilde{a}] \} + a^2 \right], \end{aligned}$$

$$(4.2)$$

где N = ε + (1- ε)a + (1- ε) \tilde{a} , K = $(\frac{2\varepsilon(1-\varepsilon)}{(\beta+1)})$ exp $(\frac{\beta+1}{4\varepsilon(1-\varepsilon)})$, a и \tilde{a} – коэффициенты в модифицированном бимодальном представлении функций распределения по тепловым скоростям молекул лёгкого и тяжёлого компонентов ударно сжатой бинарной смеси. Эти коэффициенты являются функциями координаты х внутри фронта волны [1–3].

В поступательно равновесном состоянии за ударной волной, когда a = 1, $\tilde{a} = 0$ из формулы (4.2) непосредственно следует, что $H_{22}|_{ref}$ равно 1, что совпадает с точным значением $H_{22}|_{ref}$ в равновесии.

Таким образом, наличие эффекта перехлёста будет зависеть от выполнения довольно простого неравенства:

$$(H_{22}|_{ref} - 1) > 0 \tag{4.3}$$

или

$$[\varepsilon K \{ (a + (\frac{1}{\beta})^{1/2} \tilde{a}) [1 - a - \tilde{a}] \} + a^2] > N^2$$
(4.4)

Выполнение неравенств (4.3) или (4.4) и является достаточным условием реализации эффекта перехлёста.

Проверим выполнение неравенства (4.4) при аппроксимации параметра \tilde{a} в виде (3.1)

$$\begin{split} & [\varepsilon \operatorname{K} \{ (a + (\frac{1}{\beta})^{1/2} \ a(1 - a) \) [1 - a - a(1 - a)] \} + a^2] > \operatorname{N}^2 \\ & [\varepsilon \operatorname{K} \{ (a + (\frac{1}{\beta})^{1/2} \ a(1 - a) \) [1 - 2 \ a + a^2] \} + a^2] > (\varepsilon + (1 - \varepsilon)a + (1 - \varepsilon) \ a(1 - a))^2 \\ & [\varepsilon \operatorname{K} \{ (a + (\frac{1}{\beta})^{1/2} \ a(1 - a) \) (1 - a)^2 \} + a^2] > (\varepsilon + (1 - \varepsilon)(2a - a^2))^2 \\ & [\varepsilon \operatorname{K} \{ (a + (\frac{1}{\beta})^{1/2} \ a(1 - a) \) (1 - a)^2 \} + a^2] > \{\varepsilon + (1 - \varepsilon)[1 + 2a - a^2 - 1] \}^2 \\ & [\varepsilon \operatorname{K} \{ (a + (\frac{1}{\beta})^{1/2} \ a(1 - a)^3 \} + a^2] > \{\varepsilon + (1 - \varepsilon)[1 - (1 - a)^2] \}^2 \end{split}$$

Видно, что при а, стремящемся к единице, неравенство всегда выполняется.

5. Численное значение эффекта перехлёста в точке максимума второго макроскопического параметра модифицированной модели \tilde{a}

Аналитические свойства модифицированной бимодальной модели тесно связаны с теоремами математического анализа о функциях, дифференцируемых на отрезке.

61

Так, второй параметр модели \tilde{a} (*a*), в силу необходимости выполнения граничных условий

$$\tilde{a}(0) = \tilde{a}(1) = 0$$
(5.1)

и теоремы Ролля, должен в общем случае иметь нулевую производную по первому параметру a(x).

В табл. 1 для соответствующих параметров задачи приведены относительные значения функции пар молекул тяжёлого компонента H₂₂|_{ref}, свидетельствующие о наличии значительной величины эффекта перехлёста.

Таблица 1 / Table 1

γ	ε	β	а	ã	H ₂₂ _{ref}
5/3	1/4	2	1/2	1/4	2,052
5/3	1/4	3	1/2	1/4	5,780
7/5	1/6	2	1/2	1/4	4,334
7/5	1/6	3	1/2	1/4	19,479
9/7	1/8	2	1/2	1/4	11,274
9/7	1/8	3	1/2	1/4	82,296

Значения эффекта перехлёста H22|ref для тяжёлого компонента смеси / Values of the overlap effect H22|ref for the heavy component of the mixture

Выводы

Для модифицированной бимодальной модели ударной волны аналитически построены функции пар молекул в бинарных смесях газов. Показано, что модифицированная модель сохраняет простоту классической бимодальной модели Тамма – Мотт-Смита для однокомпонентных ударно сжатых газов. Это позволяет при её применении получить окончательные обозримые результаты до конца аналитически.

ЛИТЕРАТУРА

- Аналитические модели поступательно-неравновесной динамики ударно-сжатых бинарных смесей газов / М. М. Кузнецов, Г. В. Кузнецов, В. И. Парёнкина, Д. Г. Сатюков, Р. Ф. Халиков // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2023. № 4. С. 34–48. DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-34-48.
- 2. Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д., Сатюков Д. Г. Статистические распределения пар молекул в модифицированной бимодальной модели ударно-сжатой смеси газов // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 3. С. 50–57. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-3-50-57.
- Bratos M., Herczynski R. Shock waves in noble gases and their mixtures // Archives of Mechanics (Archiwum Mechaniki Stosowanej). 1983. Vol. 35. No. 2. P. 215–239.

- 4. Функция распределения пар молекул модифицированной бимодальной модели ударной волны / М. М. Кузнецов, Ю. Д. Кулешова, В. И. Парёнкина, Д. Г. Сатюков // Х Поляховские чтения: материалы международной научной конференции по механике (Санкт-Петербург, 23-27 сентября 2024 г.). СПб.: Издательство BBM, 2024. С. 424–427.
- 5. Куликов С. В., Терновая О. Н., Черешнев С. Л. Специфика поступательной неравновесности во фронте ударной волны в однокомпонентном газе // Химическая физика. 1993. Т. 12. № 3. С. 340–342.
- 6. Куликов С. В., Терновая О. Н., Черешнев С. Л. Специфика эволюции распределения молекул однокомпонентного газа по относительным скоростям во фронте УВ // Физика горения и взрыва. 1994. Т. 30. № 4. С. 140–144.
- Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D. Increase in rates of kinetic processes inside the bimodal hypersonic shock wave // Heat Transfer Research. 2012. Vol. 43. Iss. 3. P. 228–236. DOI: 10.1615/HeatTransRes.v43.i3.30.
- 8. Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д., Смотрова Л. В. Эффект высокоскоростной поступательной неравновесности в бимодальной ударной волне // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2012. № 2. С. 108-115.
- 9. Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д., Смотрова Л. В. Эффект поступательной неравновесности в Тамм Мотт-Смитовской модели ударной волны // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2012. № 3. С. 84–86.
- 10. Бёрд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: МИР, 1981. 319 с.
- 11. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.

REFERENCES

- Kuznetsov, M. M., Kuznetsov, G. V., Parenkina, V. I., Satyukov, D. G. & Halikov, R. F. (2023). Analytical models of translationally nonequilibrium dynamics of shock-compressed binary gas mixtures. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 4, 34–48. DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-34-48 (in Russ.).
- Kuznetsov, M. M, Kuleshovaa, Ju. D. & Satyukov, D. G. (2024). Analytical models of translationally nonequilibrium dynamics of shock-compressed binary gas mixtures. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 3, 50– 57. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-3-50-57 (in Russ.).
- 3. Bratos, M. & Herczynski, R. (1983). Shock waves in noble gases and their mixtures. In: *Archives of Mechanics (Archiwum Mechaniki Stosowanej)*, 35 (2), 215–239.
- Kuznetsov, M. M., Kuleshovaa, Ju. D., Parenkina, V. I. & Satyukov, D. G. (2024). Distribution function of pairs of molecules of the modified bimodal shock wave model. In: *X Polyakhov readings: proceedings of the international scientific conference on mechanics* (*St. Petersburg, September 23-27, 2024*). St. Petersburg: VVM publ., pp. 424–427 (in Russ.).
- Kulikov, S. V., Ternovaya, O. N. & Chereshnev, S. L. (1993). Specificity of Translational Nonequilibrium in the Shock Wave Front Propagating through a Single-Component Gas. In: *Soviet Journal of Chemical Physics*, 12 (3), 340–342 (in Russ.).

- 6. Kulikov, S. V., Ternovaya, O. N. & Chereshnev, S. L. (1994). Specificity of the evolution of the distribution of one-component gas molecules by relative velocities in the shock wave front. In: *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 30 (4), 140–144 (in Russ.).
- Kuznetsov, M. M. & Kuleshova, Yu. D. (2012). Increase in rates of kinetic processes inside the bimodal hypersonic shock wave. In: *Heat Transfer Research*, 43 (3), 228–236. DOI: 10.1615/HeatTransRes.v43.i3.30.
- 8. Kuznetsov, M. M., Kuleshova, Ju. D. & Smotrova, L. V. (2012). On the increase of the kinetic processes rates in Tamm-Mott-Smith shock wave model. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2, 108–115 (in Russ.).
- 9. Kuznetsov, M. M., Kuleshova, Ju. D. & Smotrova, L. V. (2012). Theorems on the maximum of relative high velocity overshoot in bimodal shock wave. In: *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 3, 84–86 (in Russ.).
- 10. Bird, G. (1981). Molecular Gas Dynamics. Moscow: MIR publ. (in Russ.).
- 11. Kogan, M. N. (1967). Dynamics of Rarefied Gas. Moscow: Nauka publ. (in Russ.)

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Кузнецов Михаил Михайлович (г. Москва) – доктор физико-математических наук, профессор кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения;

e-mail: kuznets-omn@yandex.ru

Сатюков Дмитрий Геннадьевич (г. Москва) – аспирант кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения; e-mail: dsatyukov@gmail.com

Кулешова Юлия Дмитриевна (г. Жуковский, Московская обл.) – кандидат физикоматематических наук, доцент, доцент кафедры высшей алгебры, математического анализа и геометрии Государственного университета просвещения; https://orcid.org/0000-0001-8556-9340; e-mail: juliaybogdanova@mail.ru

Владимирова Елена Яковлевна (г. Москва) – аспирант кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения; https://orcid.org/0009-0000-3382-1516; e-mail: e.vladimirova7@gmail.com

Кузнецов Глеб Витальевич (г. Москва)– аспирант кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения; https://orcid.org/0000-0002-6878-8346; e-mail: glebwow7@yandex.ru

Халиков Руслан Фанусович (г. Москва) – аспирант кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения; e-mail: rustek95@gmail.com

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Mihail M. Kuznetsov (Moscow) – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education; e-mail: kuznets-omn@yandex.ru

Dmitry G. Satyukov (Moscow) – Postgraduate student, Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education; e-mail: dsatyukov@gmail.com

Juliya D. Kuleshova (Zhukovsky, Moscow region) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Higher Algebra, Mathematical Analysis and Geometry, Federal State University of Education;

https://orcid.org/0000-0001-8556-9340; e-mail: juliaybogdanova@mail.ru

Elena Ya. Vladimirova (Moscow) – Postgraduate student, Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education; https://orcid.org/0009-0000-3382-1516; e-mail: e.vladimirova7@gmail.com

Gleb V. Kuznetsov (Moscow) – Postgraduate student, Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education; https://orcid.org/0000-0002-6878-8346, e-mail: glebwow7@yandex.ru

Ruslan F. Halikov (Moscow) – Postgraduate student, Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education; e-mail: rustek95@gmail.com

МАТЕМАТИКА

Научная статья УДК 517'442 DOI: 10.18384/2949-5067-2025-1-66-77

НОВАЯ ФОРМУЛИРОВКА ТЕОРЕМЫ ЗАПАЗДЫВАНИЯ ИЗ КУРСА ОПЕРАЦИОННОГО ИСЧИСЛЕНИЯ

Оникийчук В. Н.¹*, Оникийчук И. В.²

¹ Государственный университет просвещения, г. Москва, Российская Федерация ² Независимый исследователь, г. Москва, Российская Федерация *Корреспондирующий автор, e-mail: valeryonikiychuk@yandex.ru

> Поступила в редакцию 06.02.2025 Принята к публикации 17.02.2025

Аннотация

Цель. Классическая теорема запаздывания из курса операционного исчисления показала неудовлетворительные результаты на множестве конкретных примеров, составленных из элементарных функций. В статье представлена новая формула теоремы запаздывания, которая даёт корректные результаты.

Процедура и методы. Метод состоит в том, что определяются образы функций с запаздыванием путём непосредственного вычисления с интеграла Лапласа, или с помощью линейной комбинации табличных образов. Полученные решения сравниваются с образами, полученными с помощью классической теоремы запаздывания. Сравнение результатов, полученных двумя способами, оказались для всех примеров неудовлетворительными.

Результаты. Сформулирована новая, корректная теорема запаздывания и представлена соответствующая ей формула. Результаты применения новой формулы дали корректные результаты. Установлена ошибка, которая возникла при выводе классической формулы запаздывания. Она состоит в том, что в процессе вывода формулы было неправомерно удалено одно интегральное слагаемое.

Теоретическая и практическая значимость. Операционное исчисление применяется в теории автоматического управления и в расчётах электротехнических схем. Скорректированная теорема запаздывания позволяет получить корректные результаты в названных системах, где присутствуют сигналы с запаздыванием.

[©] СС ВҮ Оникийчук В. Н., Оникийчук И. В., 2025.

Ключевые слова: теорема запаздывания, операционное исчисление, интеграл Лапласа, некорректная формула, функция-оригинал

Для цитирования.

Оникийчук В. Н., Оникийчук И. В. Новая формулировка теоремы запаздывания из курса операционного исчисления // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2025. № 1. С.66–77. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-66-77

Original research article

A NEW FORMULATION OF THE LAG THEOREM FROM THE COURSE OF OPERATIONAL CALCULUS

V. Onikiychuk¹*, I. Onikiychuk²

¹ Federal State University of Education, Moscow, Russian Federation ² Independent researcher, Moscow, Russian Federation *Corresponding author, e-mail: valeryonikiychuk@yandex.ru

> *Received by the editorial office 06.02.2025 Accepted for publication 17.02.2025*

Abstract

Aim. The classical lag theorem from the course of operational calculus has shown unsatisfactory results on a variety of specific examples made up of elementary functions. The article presents a new formula for the delay theorem, which gives correct results.

Methodology. The method consists in determining the images of functions with a delay by direct calculation from the Laplace integral, or using a linear combination of tabular images. The solutions obtained are compared with the images obtained using the classical delay theorem. The comparison of the results obtained by the two methods turned out to be unsatisfactory for all the examples.

Results. A new, correct delay theorem is formulated and the corresponding formula is presented. The results of applying the new formula gave correct results. An error has been identified that occurred during the derivation of the classical delay formula. It consists in the fact that in the process of deducing the formula, one integral term was unlawfully deleted.

Research implications. Operational calculus is used in automatic control theory and in electrical circuit calculations. The corrected delay theorem allows one to obtain correct results in the named systems, where signals with delay are present.

Keywords. lag theorem, operational calculus, Laplace integral, incorrect formula, original function *For citation:*

Onikiychuk ,V. N. & Onikiychuk, I. V. (2025). A new formulation of the lag theorem from the course of operational calculus. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 1, 66–77. https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-1-66-77

Введение

В учебном курсе операционного исчисления существует *теорема запаздывания*, которая даёт неудовлетворительные ответы при вычислениях.

Теорема запаздывания. Пусть f(t) – оригинал, а F(p) – её изображение. Тогда для каждого $\tau > 0$ образ для функции $f(t-\tau)$ определяется по формуле [1, с. 507]:

$$f(t-\tau) \xrightarrow{\bullet} e^{-p\tau} F(p) \tag{1}$$

Аналогично см.: [2, с. 351; 3, с. 10; 4, с. 182; 5, с. 230; 6, с. 40; 7, с. 33; 8, с. 57–58; 9, с. 11-12].

В Разделе 1 и Приложении 1 представлены семь примеров, которые демонстрируют неудовлетворительные результаты формулы (1). Ошибка в формуле (1) допущена в процессе её вывода. В Разделе 2 проводится анализ допущенной ошибки при доказательстве теоремы запаздывания. Корректировка теоремы запаздывания представлена в Разделе 3. Выведена новая формула вычисления образа для функции $f(t-\tau), \tau > 0$. Проверка корректности новой формулы запаздывания проведена на нескольких примерах, представленных в Приложении 2.

1. О некорректных результатах применения теоремы запаздывания

В данной работе рассматривается задача сравнения результатов с применением теоремы запаздывания (1) и без неё для простейших примеров. Так, например, для элементарных функций e^t и $e^{t-\tau+\tau}$ результаты с применением формулы (1) и в сравнении с табличными образами получаются разные, хотя эти функции тождественно равны $e^t \equiv e^{t-\tau+\tau}$ (см. Приложение 1, Пример 1). Аналогичная ситуация наблюдается и для функции t-a: изображение этой функции с применением формулы запаздывания отличается от табличного изображения (см. Приложение 1, Примеры 2 и 5).

Такая же ситуация несоответствия результатов наблюдается для тождества $\sin(t-\pi) \equiv -\sin t$ (см. Приложение 1, Пример 3). Для функции $\sin\left(t-\frac{\pi}{2}\right)$ образ функции не соответствует табличному образу функции $-\cos t \sin(t-\pi) \equiv -\sin t$ (см. Приложение 1, Пример 4). Изображение для функции $(t-a)^2$, полученное с помощью теоремы запаздывания (1), также отличается от табличного значения для функции $t^2 - 2at + a^2$ (см. Приложение 1, Пример 6). Для функции-оригинала $\sin(t+2\pi k)$, k = 0,1,2... теорема запаздывания (1) даёт бесконечное множество ответов, отличающихся от табличного образа $\sin t \xrightarrow{*} \frac{1}{p^2+1}$ (см. Приложение 1, Пример 7). Множественность решений противоречит теореме единственности и не соответствует табличному образу функции sin t.

ISSN 2949-5083

Предназначение каждой математической формулы, главным образом в том, чтобы помочь сократить объём проводимых операций, ссылаясь на уже проведённый объём работы в виде формулы. При этом формула, естественно, должна давать один и тот же результат (с применением формулы или без неё).

Однако в данном случае наблюдается неудовлетворительный результат сравнения операций, выполненных с помощью теоремы запаздывания. Формула запаздывания (1) даёт *некорректные* результаты для всех без исключения примеров.

2. О некорректном доказательстве теоремы запаздывания

Принято считать, что для функции-оригинала f(t) в интеграле Лапласа $\int_{0}^{\infty} f(t) e^{-pt} dt$ должно применяется условие $f(t) \equiv 0, \forall t < 0$ (см. рис.1).



Рис. 1 / Fig. 1. Функция-оригинал / Original function *Источник*: составлено авторами

Для функции с запаздывающим аргументом $f(t - \tau)$, $\tau > 0$ в интеграле $\int_{0}^{\infty} f(t-\tau)e^{-pt}dt$ было решено применить аналогичное условие $\int_{0}^{0} f(t-\tau) \equiv 0$ $\forall t < \tau$ (см. рис. 2). Основанием для такого решения стало то, что для интеграла $\int_{0}^{\infty} f(t-\tau)e^{-pt}dt$ функция $f(t-\tau)$ также считается оригиналом, и поэтому применение условия $f(t-\tau) \equiv 0$ $\forall t < \tau$ считается правомерным.

В этом случае $\int_{0}^{t} f(t-\tau)e^{-pt}dt = 0, \forall t < \tau$ и интеграл Лапласа для функции $f(t-\tau)$ преобразуется так:

$$\int_{0}^{\infty} f(t-\tau)e^{-pt}dt = \int_{0}^{\tau} f(t-\tau)e^{-pt}dt + \int_{\tau}^{\infty} f(t-\tau)e^{-pt}dt = \int_{\tau}^{\infty} f(t-\tau)e^{-pt}dt$$
(2)

2025 / № 1

В обоснование такой операции положены и дополнительные рассуждения. Рассмотрим новую переменную $\xi = t - \tau$, и правую часть (2) в этом случае можно преобразовать так:

$$\int_{\tau}^{\infty} f(t-\tau)e^{-pt}dt = e^{-p\tau} \int_{t-\xi}^{0} f(\xi)e^{-p\xi}d\xi + e^{-p\tau}F(p), \qquad (3)$$

где $F(p) = \int_{0}^{\infty} f(t) e^{-pt} dt$

Поскольку $t \ge 0$, то выражение $\int_{0}^{0} f(\xi) e^{-p\xi} d\xi$ (3) принято трактовать как «интеграл Лапласа на отрезке отрицательной полуоси t < 0, где $f(t) \equiv 0$. Это ошибочная трактовка, поскольку из выражения (2) видно, что искусственно обнуляется функция $f(t - \tau)$ на участке $[0, \tau]$ положительной полуоси $t \ge 0$ (см. рис. 2).



Рис. 2 / **Fig. 2.** Функция $f(t - \tau)$ / Function $f(t - \tau)$

Источник: составлено авторами

Вывод: Необходимость условия $f(t-\tau) \equiv 0, \forall t < \tau$ для интеграла $\int_{0}^{\tau} f(t-\tau)e^{-pt}dt$ приводит к ошибочной формуле запаздывания (1). Следует отметить, что в литературе наличие условия $f(t-\tau) \equiv 0, \forall t < \tau$ не является обязательным:

«Условие (имеется ввиду условие $[f(t) \equiv 0, \forall t < 0]$) на первый взгляд кажется искусственным. Однако следует иметь в виду, что операционный метод

ISSN 2949-5083

2025 / № 1

приспособлен к задачам, приводящим к решению дифференциальных уравнений с данными начальными условиями. В таких задачах вся информация о ходе процесса до момента начала наблюдения, за который можно принять момент t = 0, содержится в начальных условиях. Таким образом, условие $\lceil f(t) \equiv 0, \forall t < 0 \rceil$ физически вполне естественно» [1, с. 494–495].

Аналогичное мнение: «... второе условие определения (имеется в виду $[f(t) \equiv 0, \forall t < 0]$) не имеет большого значения для практических задач» [9, с. 5].

3. Коррекция теоремы запаздывания. Теорема запаздывания.

Пусть f(t) – функция-оригинал, f(t) = 0 при условии t < 0, а F (p) – её изображение по Лапласу, при этом Re $p > s_0$, где s_0 – показатель роста функции f(t). В этом случае для любого положительного числа $\tau > 0$ изображение функции $f(t - \tau)$ по Лапласу определяется формулой :

$$\int_{0}^{\infty} f(t-\tau) e^{-pt} dt = e^{-p\tau} F(p) + e^{-p\tau} \int_{-\tau}^{0} f(\xi) e^{-p\xi} d\xi$$
(4)

Доказательство. В интеграле Лапласа $\int_{0}^{\infty} f(t-\tau)e^{-pt}dt$ сделаем замену

переменных $\xi = t - \tau$. В этом случае

$$\int_{0}^{\infty} f(t-\tau)e^{-pt}dt = e^{-p\tau} \int_{-\tau}^{\infty} f(\xi)e^{-p\xi}d\xi = \\ = e^{-p\tau} \left(\int_{-\tau}^{0} f(\xi)e^{-p\xi}d\xi + \int_{0}^{\infty} f(\xi)e^{-p\xi}d\xi \right) = e^{-p\tau}F(p) + e^{-p\tau} \int_{-\tau}^{0} f(\xi)e^{-p\xi}d\xi$$

Здесь $F(p) = \int f(t)e^{-pt}dt$. Теорема доказана.

Заключение

Проведённый анализ показал, что доказательство классической теоремы запаздывания (1) является некорректным. В подобных случаях, когда принимаются «очевидные» условия (искусственное обнуление функции $f(t) \equiv 0$ на участке $t \in [0, \tau]$), необходимо оценивать такое «упрощающее» решение по конечному результату. Этот критерий должен быть главным в процессе вывода формулы: принимать это «упрощение» или нет. В приведённом случае оказалось, что классическая формула запаздывания (1) ни в одном примере не даёт правильного ответа из-за ошибочно принятого условия, что $f(t) \equiv 0, \forall t < \tau$.

. 71 /
Приложение 1. Примеры некорректных результатов в связи с применением общепринятой *теоремы запаздывания*

Пример 1. Пусть оригиналом будет функция $f(t) = e^t$. В этом случае, в соответствии с таблицей [10, с. 235] образом является функция $F(p) = \frac{1}{p-1}$. Однако, функцию-оригинал можно представить так: $e^t = e^{t-\tau+\tau}$, $\forall \tau > 0$. В этом случае изображение для функции e^t можно получить с помощью формулы запаздывания (1) $e^{\tau}e^{t-\tau} \xrightarrow{\bullet} \frac{e^{-(p-1)\tau}}{p-1} \neq \frac{1}{p-1}$. Вывод: табличный образ $e^t \xrightarrow{*} \frac{1}{p-1}$ не соответствует образу $\frac{e^{-(p-1)\tau}}{p-1}$,

полученному в результате применения теоремы запаздывания (1).

Пример 2. Решим обратную задачу: найдём функцию-оригинал для изображения $F(p) = \frac{2-p\pi}{p^2} = \frac{2}{p^2} - \frac{\pi}{p}$. Поскольку $t \xrightarrow{\bullet} \frac{1}{p^2}, \pi \xrightarrow{\bullet} \frac{\pi}{p}$, то для образа F(p) оригиналом является функция $(t-\pi) \xrightarrow{*} \frac{2-p\pi}{p^2}$. Изображение для функции $f(t) = t - \pi$ можно получить с помощью формулы запаздывания (1): $\Phi(p) = \int_{0}^{\infty} (t-\pi) e^{-pt} dt \xrightarrow{*} \frac{2e^{-p\tau}}{p^2} \neq \frac{2-p\pi}{p^2}$

Вывод: терема запаздывания (1) даёт результат, не соответствующий табличному образу.

Пример 3. Найдём изображение функции $\sin(t - \pi) = -\sin t$, вычисляя непосредственно интегралы Лапласа. Для произвольного параметра $\tau > 0$ первообразная для интеграла $\int \sin(t - \tau) e^{-pt} dt$ известна:

$$\int \sin(t-\tau) e^{-pt} dt = -\frac{e^{-pt}}{p^2 + 1} \left(\left(\cos(t-\tau) \right) + p \sin(t-\tau) \right).$$

Таким образом, для функции sin (t – π) получаем табличный результат:

$$\int_{0}^{\infty} \sin(t-\pi) e^{-pt} dt = \frac{e^{-pt}}{p^2+1} (\cos t + p\sin t) \Big|_{0}^{\infty} = -\frac{1}{p^2+1} \stackrel{*}{\longleftarrow} (-\sin t)$$

. 72 /

С другой стороны, $-\sin t = \sin(t - \pi)$ и поэтому можно получить изображение с помощью теоремы запаздывания (1): $\sin(t - \pi) \xrightarrow{*}{} \frac{e^{-p\pi}}{p^2 + 1} \neq -\frac{1}{p^2 + 1}.$

Вывод: применение теоремы запаздывания даёт результат, не соответствующий табличному образу.

Пример 4. Поскольку
$$\sin\left(t - \frac{\pi}{2}\right) = -\cos t$$
 и $\cos t - \frac{*}{*} + \frac{p}{p^2 + 1}$, то

 $\sin\left(t-\frac{\pi}{2}\right) \xrightarrow{*}{} - \frac{p}{p^2+1}$. С помощью теоремы запаздывания (1) находим образ

функции $\sin\left(t - \frac{\pi}{2}\right) \xrightarrow{*}{} \frac{pe^{\frac{-p\pi}{2}}}{p^2 + 1}.$

Вывод: следовательно, результат не соответствует табличному образу $-\frac{p}{n^2+1}$.

Пример 5. Для произвольного числа *a* образ линейной функции f(t-a) = t-a легко определить с помощью стандартной таблицы образов в силу линейности оператора Лапласа: $t \xrightarrow{*} \frac{1}{p^2}$, $a \xrightarrow{*} \frac{a}{p}$. Таким образом, $t-a \xrightarrow{*} \frac{1}{p^2} - \frac{a}{p}$. Если использовать теорему запаздывания (1), то $t-a \xrightarrow{*} \frac{e^{-pa}}{p^2} \neq \frac{1-ap}{p^2}$.

Вывод: Применение теоремы запаздывания даёт некорректный результат.

Пример 6. Аналогично находим образ функции $(t-a)^2 = t^2 - 2at + a^2$. В соответствии со свойством линейности $t^2 \xrightarrow{*} \frac{2}{p^3}, \ 2at \xrightarrow{*} \frac{2a}{p^2}, \ a^2 \xrightarrow{*} \frac{a^2}{p},$ изображение для неё выглядит так: $(t-a)^2 \xrightarrow{*} \frac{2}{p^3} - \frac{2a}{p^2} + \frac{a^2}{p}$

73 /

ISSN 2949-5083

С другой стороны, в соответствии с теоремой запаздывания (1) изображением функции $(t-a)^2$ является $\frac{2e^{-pa}}{p^3}$.

Вывод: Поскольку $\left(\frac{2}{p^3} - \frac{2a}{p^2} + \frac{a^2}{p}\right) \neq \frac{2e^{-pa}}{p^3}$, то формула запаздывания (1)

некорректна.

Пример 7. Для функции-оригинала $f(t) = \sin t$ интеграл Лапласа находится по таблице образов, и этот ответ известен: $\int_{0}^{\infty} \sin t e^{-pt} dt = \frac{1}{p^2 + 1}$. Поскольку $\sin t \equiv \sin(t - 2\pi k), k = 0, 1, 2, ...,$ то к выражению $\sin(t - 2\pi k)$ можно применить теорему запаздывания: $\int_{0}^{\infty} \sin(t - 2\pi k) e^{-pt} dt = \frac{e^{-p^2\pi k}}{p^2 + 1}, k = 0, 1, 2...$

Таким образом, функция $\sin(t + 2\pi k)$ имеет бесконечное количество образов. Это противоречит теореме единственности образов. Кроме того, ни один из этих ответов не равен табличному образу $\frac{1}{p^2+1}$.

Приложение 2. Проверка корректности новой формулы теоремы

Теперь продемонстрируем, что формула (4) математически корректна и даёт правильные результаты.

Пример 1. Пусть
$$f(t) = e^t$$
. В этом случае $e^t \xrightarrow{*}{*} \frac{1}{p-1}$. Поскольку $e^t = e^{t-\tau}e^{\tau}$,
го $e^t \xrightarrow{*}{*} e^{\tau} \Phi(p)$, где $e^{t-\tau} \xrightarrow{*}{*} \Phi(p)$

Применим формулу (4) для нахождения образа
$$\Phi(p)$$
. Поскольку $e^{-p\tau} \int_{-\tau}^{0} e^{t} e^{-pt} dt = -\frac{e^{-p\tau} \left(1 - e^{p\tau-\tau}\right)}{p-1} = -\frac{\left(e^{-p\tau} - e^{-\tau}\right)}{p-1}$, то $\Phi(p) = \int_{0}^{\infty} e^{t-\tau} e^{-pt} dt = e^{-p\tau} \int_{-\tau}^{0} e^{t} e^{-pt} dt + \frac{e^{-p\tau}}{p-1} = \frac{e^{-\tau}}{p-1}$

Следовательно, $e^{t} \xrightarrow{*}{*} e^{\tau} \Phi = \frac{1}{p-1}$. Полученный результат соответствует табличному значению.

. 74 /

Пример 2. Пусть $f(t) = t, t \xrightarrow{\bullet} \frac{1}{p^2}$. В соответствии с формулой (4) получаем изображение функции $t - \pi$:

$$\int_{0}^{\infty} (t-\pi) e^{-pt} dt = e^{-p\pi} \int_{-\pi}^{0} t e^{pt} dt + \frac{e^{-p\pi}}{p^2}$$
Поскольку $e^{-p\pi} \int_{-\pi}^{0} t e^{-pt} dt = -\frac{e^{-p\pi}}{p^2} + \frac{1}{p^2} (1-p\pi)$, то
$$\int_{0}^{\infty} (t-\pi) e^{-pt} dt = e^{-p\pi} \int_{-\pi}^{0} t e^{pt} dt + \frac{e^{-p\pi}}{p^2} = \frac{1}{p^2} - \frac{\pi}{p}$$

Вывод: полученный результат совпадает с табличным образом.

Пример 3. Для функции-оригинала $f(t) = \sin t$ изображение можно получить с помощью теоремы запаздывания (4), поскольку $\sin(t - \pi) = -\sin t$. В соответствии с формулой (4) получаем:

$$\int_{0}^{\infty} \sin(t-\pi) e^{-pt} dt = e^{-p\pi} \int_{-\pi}^{0} \sin t e^{-pt} dt + \frac{e^{-p\pi}}{p^{2}+1}$$

Поскольку

$$p^{pt}dt = -\frac{1}{p^2 + 1} (\cos t + p \sin t) e^{-pt},$$
 to

$$e^{-p\pi} \int_{-\pi}^{0} \sin t e^{-pt} dt = -\frac{e^{-p\pi}}{p^2 + 1} (\cos t + p \sin t) e^{-pt} \Big|_{-\pi}^{0} = -\frac{e^{-p\pi}}{p^2 + 1} - \frac{1}{p^2 + 1}.$$

 $\int \sin t e^{-}$

Таким образом,
$$\int_{0}^{\infty} \sin(t-\pi)e^{-pt}dt = -\int_{0}^{\infty} \sin t e^{-pt}dt = -\frac{1}{p^2+1}$$
, что

соответствует табличному результату.

ЛИТЕРАТУРА

- Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного. М.: Наука, 1973. 736 с.
- 2. Шабунин М. И., Половинкин Е. С., Карлов М. И. Сборник задач по теории функций комплексного переменного; 6-е изд., испр. М.: Лаборатория знаний, 2022. 362 с.
- Краснов М. Л., Киселев А. И., Макаренко Г. И. Операционное исчисление. Теория устойчивости. Задачи и примеры с подробными решениями: учебное пособие; изд. 3-е, испр. и доп. М.: Эдиториал УРСС, 2003, 176 с.
- 4. Эйдерман В. Я. Основы теории функций комплексного переменного и операционного исчисления: учебное пособие. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. 256 с.

- Вся высшая математика. Т. 4: учебник / М. Л. Краснов, А. И. Киселев, Г. И. Макаренко, Е. В. Шикин, В. И. Заляпин; изд. 2, испр. М.: Эдиториал УРСС, 2005. 352 с.
- 6. Плескунов М. А. Операционное исчисление: учебное пособие. Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2014. 143 с.
- Корзников А. Д., Королева О. М. Операционное исчисление: учебно-методическое пособие. Минск: БНТУ, 2021. 85 с.
- 8. Щитов И. Н., Галкина В. Г., Непомнящая Е. Ю. Функции комплексной переменной и операционное исчисление: учебное пособие. СПб.: СПбГИКиТ, 2011. 80 с.
- 9. Подолян С. В., Юрченко И. В. Высшая математика. Операционное исчисление и его применение: учебно-методическое пособие. Могилёв: УО МГУП, 2009. 56 с.
- Корн Т., Корн Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1977. 831 с.

REFERENCES

- 1. Lavrentiev, M. A. & Shabat, B. V. (1973). *Methods of the Theory of Functions of a Complex Variable*. Moscow: Nauka publ. (in Russ.).
- 2. Shabunin, M. I., Polovinkin, E. S. & Karlov, M. I. (2022). *Collection of problems in the theory of functions of a complex variable*. Moscow: Laboratoriya znaniy publ. (in Russ.).
- 3. Krasnov, M. L., Kiselev, A. I. & Makarenko, G. I. (2003). *Operational calculus. Stability theory. Problems and examples with detailed solutions.* Moscow: Editorial URSS publ. (in Russ.).
- 4. Eiderman, V. Ya. (2002). Fundamentals of the theory of functions of a complex variable and operational calculus. Moscow: FIZMATLIT publ. (in Russ.).
- 5. Krasnov, M. L., Kiselev, A. I., Makarenko, G. I., Shikin, E. V. & Zalyapin, V. I. (2005). *All Higher Mathematics. Vol. 4*. Moscow: Editorial URSS publ. (in Russ.).
- 6. Pleskunov, M. A. (2014). *Operational Calculus*. Yekaterinburg: Ural University Publ. (in Russ.).
- 7. Korznikov, A. D. & Koroleva, O. M. (2021). *Operational Calculus*. Minsk: Belarusian National Technical University publ. (in Russ.).
- 8. Shchitov, I. N., Galkina, V. G. & Nepomnyashchaya, E. Yu. (2011). *Functions of a complex variable and operational calculus*. St. Petersburg: Saint-Petersburg State University of Film and Television publ. (in Russ.).
- 9. Podolyan, S. V. & Yurchenko, I. V. (2009). *Higher Mathematics. Operational calculus and its application.* Mogilev: Mogilev State University of Food Science publ. (in Russ.).
- 10. Korn, T. & Korn, G. (1977). *Handbook of Mathematics for scientists and engineers*. Moscow: Nauka publ. (in Russ.).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Оникийчук Валерий Николаевич (г. Королев, Московская обл.) – кандидат физикоматематических наук, старший преподаватель кафедры высшей алгебры, математического анализа и геометрии Государственного университета просвещения; https://orcid.org/0000-0002-5600-0865; e-mail: valeryonikiychuk@yandex.ru *Оникийчук Игорь Валерьевич* (г. Королев, Московская обл.) – инженер-математик, руководитель проектов Группа компаний «Аэрофлот»; https://orcid.org/0000-0002-2255-8860, e-mail: ionikv@inbox.ru

INFORMATION ABOUT AUTHORS

Valeriy N. Onikiychuk (Korolev, Moscow region) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Lecturer, Department of Higher Algebra, Mathematical Analysis and Geometry, Federal State University of Education;

https://orcid.org/0000-0002-5600-0865; e-mail: valeryonikiychuk@yandex.ru

Igor V. Onikiychuk (Korolev, Moscow region) – Mathematician Engineer, Project Manager Aeroflot Group of Companies;

https://orcid.org/0000-0002-2255-8860, e-mail: ionikv@inbox.ru



ВЕСТНИК ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

СЕРИЯ: ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА 2025. № 1

Над номером работали:

Ответственный редактор И. А. Потапова Литературный редактор М. С. Тарасова Переводчик В. А. Дворянов Корректор М. С. Тарасова Компьютерная вёрстка – Д. А. Заботина

Адрес редакции:

105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, стр. 2, офис 98 тел. (495) 780-09-42 доб. 6101 e-mail: sj@guppros.ru Сайт: www.physmathmgou.ru

Формат 70х108/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура "Minion Pro". Тираж 500 экз. Усл. п. л. 5, уч.-изд. л. 4,5. Подписано в печать:14.04.2025 г. Дата выхода в свет: 18.04.2025 г. Заказ № 2025/03-10. Отпечатано в Государственном университете просвещения 105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, стр. 2