МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

Том 14, №3
2021

Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого
2021

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;

Глухих В.А., академик РАН;

Жуков А.Е., чл.-кор. РАН;

Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН;

Рудской А.И., академик РАН;

Сурис Р.А., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор;

Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора;

Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;

Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр Техасского университета, Даллас, США;

Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США;

Дубов В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Карасёв П.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Лобода О.С., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия;

Малерб Й.Б., Dr.Sc. (Physics), профессор, университет Претории, ЮАР;

Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Привалов В.Е., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Смирнов Е.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Научно-исследовательский центр мезобионаносистем (MBN), Франкфурт-на-Майне, Германия;

Таганцев А.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, Швейцарский федеральный институт технологий, Лозанна, Швейцария;

Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Тропп Э.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Хейфец А.С., Ph.D. (Physics), профессор, Австралийский национальный университет, Канберра, Австралия;

Черепанов А.С., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия.

Журнал с 2002 г. входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук.

Сведения о публикациях представлены в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

С 2008 года выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ».

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.

Распространяется по Каталогу стран СНГ, Объединенному каталогу «Пресса России» и по Интернет-каталогу «Пресса по подписке». Подписной индекс 71823.

Журнал индексируется в базе данных **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index), а также включен в базу данных «**Российский индекс научного цитирования**» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте

http://www.elibrary.ru

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства:
Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.
Тел. редакции (812) 294-22-85.
http://ntv.spbstu.ru/physics

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

Physics and Mathematics

VOLUME 14, No.3, 2021

Peter the Great St. Petersburg
Polytechnic University
2021

**ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS**

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;

V.A. Glukhikh – full member of RAS;

D.A. Indeitsev – corresponding member of RAS;

A.I. Rudskoy – full member of RAS;

R.A. Suris – full member of RAS;

A.E. Zhukov – corresponding member of RAS.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – editor-in-chief;

A.E. Fotiadi – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – deputy editor-in-chief;

V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;

V.I. Antonov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

I.B. Bezprozvanny – Dr. Sci. (biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;

A.V. Blinov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

A.S. Cherepanov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

D.V. Donetski – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;

V.V. Dubov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

D.A. Firsov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

P.A. Karasev – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

A.S. Kheifets – Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia;

O.S. Loboda – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

J.B. Malherbe – Dr. Sci. (physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;

V.M. Ostryakov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

V.E. Privalov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

E.M. Smirnov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

A.V. Solov'yov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;

A.K. Tagantsev – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;

I.N. Toptygin – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

E.A. Tropp – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

The journal is included in the List of leading peer-reviewed scientific journals and other editions to publish major findings of theses for the research degrees of Doctor of Sciences and Candidate of Sciences.

The publications are presented in the VINITI RAS Abstract Journal and Ulrich's Periodical Directory International Database.

The journal is published since 2008 as part of the periodical edition 'Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPb-GPU'.

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate ПИ № ФС77-52144 issued December 11, 2012.

The journal is distributed through the CIS countries catalogue, the «Press of Russia» joint catalogue and the «Press by subscription» Internet catalogue. The subscription index is **71823**.

The journal is in the **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index) and the **Russian Science Citation Index** (RSCI) databases.

© Scientific Electronic Library (http://www.elibrary.ru).

No part of this publication may be reproduced without clear reference to the source.

The views of the authors may not represent the views of the Editorial Board.

Address: 195251 Politekhnicheskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: (812) 294-22-85.

http://ntv.spbstu.ru/physics

© Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2021

Содержание

Физика конденсированного состояния

Гороховатский Ю.А., Темнов Д.Э., Шабанова Н.С., Нечаев А.Н., Россоу А. *Термоактивационная спектроскопия пленок полиэтилентерефталата, облученных тяжелыми ионами ксенона*..... 8

Математическое моделирование физических процессов

Смирнов Е.М., Смирнов С.И., Абрамов А.Г., Галаев С.А. *Турбулентная смешанная конвекция в быстровращающихся обогреваемых кольцевых полостях при прохождении через них осевого потока*..... 21

Булович С.В. *Численное моделирование термоакустических колебаний газа в трубе с теплообменными элементами тороидальной формы*..... 36

Борисенко В.А., Семенов А.С., Вальмерспергер Т. *Анализ влияния характеристик ползучести и пластичности на процесс искрового плазменного спекания*..... 49

Дудоладов С.О., Ларионов Н.В. *Условие применения интеграла Крокко при математическом описании плазменного факела при лазерной сварке*..... 63

Куцова Д.С., Богатиков Е.В., Шебанов А.Н., Бормонтов Е.Н. *Сравнение потенциальных функций для молекулярно-динамического моделирования сорбции метана в силикалите*..... 79

Степашева Е.Д., Засимова М.А., Иванов Н.Г. *Влияние формы теплового манекена на течение и теплообмен в модельном помещении с вытесняющей вентиляцией*..... 94

Приборы и техника физического эксперимента

Петров В.Н., Габдуллин П.Г., Павлов А.В., Устинов А.Б., Строков В.Н., Дил Ж.Х. *Проекционный классический детектор Мотта*..... 112

Физическая электроника

Дюбо Д.Б., Макаров С.Б., Кулешов Ю.В., Гончаров П.С., Шуневич Н.А., Мартынов В.В., Цыбин О.Ю. *Модель ионно-плазменного электрического ракетного двигателя с системой удаленного контроля и управления*..... 122

Кожевников В.А., Привалов В.Е., Фотиади А.Э. *Новый подход к оценке мощности излучения гелий-неонового лазера с различной геометрией поперечного сечения активного элемента*..... 133

Биофизика и медицинская физика

Манойлов В.В., Новиков Л.В., Кузьмин А.Г., Титов Ю.А., Заруцкий И.В. *Алгоритм обработки данных масс-спектрометрического анализа для первичной диагностики заболеваний по выдыхаемым газам*..... 146

Ядерная физика

Митранкова М.М., Банников Е.В., Бердников А.Я., Бердников Я.А., Дубов А.В., Котов Д.О., Митранков Ю.М. *Анализ рождения φ-мезонов в столкновениях пучков протонов с ядрами алюминия и золота при энергиях 200 ГэВ*..... 158

Теоретическая физика

Федосин С.Г. *О метрике ковариантной теории гравитации внутри тела в релятивистской однородной модели (статья на английском языке)*..... 168

Contents

Condensed matter physics

Gorokhovatsky Yu.A., Temnov D.E., Shabanova N.S., Nechaeff A.N., Rossouw A. *Thermoactivated current spectroscopy of polyethylene terephthalate films irradiated by heavy xenon ions*..... 8

Simulation of physical processes

Smirnov E.M., Smirnov S.I., Abramov A.G., Galaev S.A. *Turbulent mixed convection within rapidly rotating heated annular cavities with an axial throughflow*..... 21

Bulovich S.V. *Numerical simulation of thermoacoustic gas oscillations in a pipe with toroidal heat exchange elements*..... 36

Borisenko V.A., Semenov A.S., Wallmersperger T. *An influence analysis of creep and plasticity characteristics on the spark plasma sintering process*..... 49

Dudoladov S.O., Larionov N.V. *The condition for application of the Crocco integral in the mathematical description of a laser welding plasma plume*..... 63

Kutsova D.S., Bogatikov E.V., Shebanov A.N., Bormontov E.N. *A comparison of potential functions for molecular dynamic simulation of methane sorption in the silicalite*..... 79

Stepasheva E.D., Zasimova M.A., Ivanov N.G. *Thermal manikin shape influence on airflow and heat transfer in the model room with displacement ventilation*..... 94

Experimental technique and devices

Petrov V.N., Gabdullin P.G., Pavlov A.V., Ustinov A.B., Strocov V.N., Dil J.H. *Projecting classical Mott polarimeter*..... 112

Physical electronics

Dyubo D.B., Makarov S.B., Kuleshov Yu.V., Goncharov P.S., Shunevich N.A., Martynov V.V., Tsybin O.Yu. *A model of an ion plasma electrically powered spacecraft propulsion with a remote monitoring and a control system*..... 122

Kozhevnikov V.A., Privalov V.E., Fotiadi A.E. *A new approach to the assessment of the output power for a helium-neon gas laser with different cross-sectional geometry of the active element*..... 133

Biophysics and medical physics

Manoilov V.V., Novikov L.V., Kuzmin A.G., Titov Yu.A., Zarutskiy I.V. *An algorithm for processing mass spectrometric analysis data for initial diagnostics of diseases by exhaled gases*..... 146

Nuclear physics

Mitrankova M.M., Bannikov E.V., Berdnikov A.Ya., Berdnikov Ya.A., Dubov A.V., Kotov D.O., Mitrankov Iu.M. *An analysis of φ meson production in the collisions of proton beams with aluminum and gold nuclei at energies of 200 GeV*..... 158

Theoretical physics

Fedosin S.G. *The relativistic uniform model: the metric of the covariant theory of gravitation inside a body*..... 168

DOI: 10.18721/JPM.14301
УДК 53.08

ТЕРМОАКТИВАЦИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПЛЕНОК ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА, ОБЛУЧЕННЫХ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ КСЕНОНА

Ю.А. Гороховатский[1], **Д.Э. Темнов**[1],
Н.С. Шабанова[1], **А.Н. Нечаев**[2], **А. Россоу**[2]

[1] Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация;

[2] Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна Московской области, Российская Федерация

Методом термостимулированной токовой спектроскопии в работе проанализировано электретное состояние в облученных на циклотроне пленках полиэтилентерефталата. Изучено поведение термостимулированных токов деполяризации в образцах пленок, полученных на разных технологических стадиях изготовления трековых мембран. Результаты исследования указывают на существенное изменение спектров энергетических состояний электрического заряда, накопленного при поляризации пленок после их облучения ускоренными тяжелыми ионами ксенона, затем последующей ультрафиолетовой обработки и щелочного травления латентных треков. С помощью метода Эйринга рассчитаны параметры релаксационных процессов (энергия активации и эффективный частотный фактор), возникающих в трековых мембранах. Указанные существенные изменения спектров свидетельствуют о возможности создания электретного состояния в облученных пленках и трековых мембран на их основе.

Ключевые слова: электрет, трековая мембрана, полиэтилентерефталат, термостимулированный ток деполяризации, метод Эйринга

Ссылка при цитировании: Гороховатский Ю.А., Темнов Д.Э., Шабанова Н.С., Нечаев А.Н., Россоу А. Термоактивационная спектроскопия пленок полиэтилентерефталата, облученных тяжелыми ионами ксенона // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 8–20. DOI: 10.18721/JPM.14301

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

THERMOACTIVATED CURRENT SPECTROSCOPY OF POLYETHYLENE TEREPHTHALATE FILMS IRRADIATED BY HEAVY XENON IONS

Yu.A. Gorokhovatsky[1], **D.E. Temnov**[1],
N.S. Shabanova[1], **A.N. Nechaeff**[2], **A. Rossouw**[2]

[1] Herzen State Pedagogical University of Russia, St. Petersburg, Russian Federation;

[2] Joint Institute for Nuclear Research, Dubna of Moscow region, Russian Federation

The paper analyzes the electret state of polyethylene terephthalate (PET) films irradiated on the IC-100 cyclotron (JINR LAR) using thermostimulated spectroscopy methods. Thermally stimulated discharge currents (thermally stimulated depolarization) of PET film samples obtained at different technological stages of track membrane manufacturing are studied. The results of the analysis of thermally stimulated

depolarization currents indicate a significant change in the spectra of the energy states of the electric charge accumulated during the polarization of PET films, during irradiation with accelerated heavy Xe ions, ultraviolet treatment, and alkaline etching of latent tracks. The parameters of relaxation processes (activation energy and effective frequency factor) occurring in track membranes are calculated using the Eyring method. A significant change in the energy state spectra of the electric charge accumulated during the polarization of PET films as a result of ion-track processes in them indicates the possibility of creating an electret state in PET films and track membranes irradiated with heavy ions on their basis.

Keywords: electret, track membrane, polyethylene terephthalate, thermal-stimulated discharge current, Eyring method

Citation: Gorokhovatsky Yu.A., Temnov D.E., Shabanova N.S., Nechaeff A.N., Rossouw A., Thermoactivated current spectroscopy of polyethylene terephthalate films irradiated by heavy xenon ions, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 8–20. DOI: 10.18721/JPM.14301

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Результаты фундаментальных и прикладных исследований, полученные в последнее время с использованием пучков тяжелых ионов низких и средних энергий, убедительно свидетельствуют об актуальности и перспективности применения тяжелых ионов в наукоемких промышленных технологиях. Изучение фундаментальных физических процессов взаимодействия частиц с твердым телом лежит в основе их практического использования для радиационно-ионной модификации материалов [1].

Пучки ускоренных тяжелых ионов можно использовать как уникальный инструмент для преобразования нано- и микроструктуры твердых тел, в том числе для получения трековых мембран [2 – 4, 7].

Создание полимерных трековых мембран с помощью ускорителей тяжелых ионов – это одно из важнейших направлений применения ионно-трековых технологий. Трековые мембраны, полученные на основе полиэфирных пленок из полиэтилентерефталата (ПЭТФ) и поликарбоната (ПК) эффективно используются в процессах глубокой переработки воды, в биотехнологии для получения вакцин и сывороток, в медицине в качестве ключевого фильтрующего элемента плазмофильтров, в аналитической химии и санитарно-биологическом анализе окружающей среды [10, 11].

Современные трековые мембраны в основном получают на основе пленок из полиэфиров, таких как полиэтилентерефталат (ПЭТФ) и поликарбонат. Так, ПЭТФ – полимер, который представляет собой сложный термопластичный полиэфир терефталевой кислоты и этиленгликоля. Пленки ПЭТФ, из которых изготавливают трековые мембраны, представляют собой композицию, структура которой включает как аморфную, так и кристаллическую фазы. ПЭТФ в аморфном состоянии характеризуется взаимным беспорядочным расположением цепей макромолекул с единичными отдельными образованиями упорядоченной структуры. Кристаллическое состояние ПЭТФ характеризуется наличием в материале кристаллитов – сложенных пучков макромолекул в виде складчатых пачек. Размер кристаллитов в пленках составляет около 5 – 10 нм, а степень кристалличности – примерно 40 – 50 %.

Структурные и физико-химические характеристики трековых мембран на основе ПЭТФ, облученных тяжелыми ионами, зависят от параметров ионного пучка, химического состава облучаемой полимерной пленки и ее структуры, а также методов физико-химической обработки в ней латентных треков. Формирование трека тяжелого иона в полимерном материале является комплексным физико-химическим процессом. Высокоэнергетичный многозаряд-

ный ион, проходя через пленку ПЭТФ, вступает в кулоновское взаимодействие с его электронной подсистемой. В результате облучения тяжелыми ионами наблюдается аморфизация ПЭТФ и уменьшение размеров кристаллитов. Кроме того, деструкция макромолекул ПЭТФ сопровождается ростом числа карбоксильных групп в полимере [8, 9].

Треки в ПЭТФ обладают способностью к избирательному химическому травлению при воздействии водных растворов щелочных металлов. В сложноэфирных полимерах, в том числе в ПЭТФ, протекает химическая реакция взаимодействия травителя с разрывом сложноэфирных связей, отщеплением молекул этиленгликоля и терефталат-иона с образованием на поверхности карбоксильной и гидроксильной групп, определяющих отрицательный электрический заряд поверхности материала. В целях повышения избирательности травления треков используют метод фотоокисления продуктов радиолиза в треках под действием «мягкого» ультрафиолетового (УФ) излучения в присутствии кислорода [4, 5, 12, 15].

Следует отметить, пленки из ПЭТФ также используются для производства электретов с устойчивым электрическим зарядом. Электрет представляет собой диэлектрик, длительное время сохраняющий поляризованное состояние после снятия внешнего воздействия, которое привело к поляризации этого диэлектрика, и создающий в окружающем пространстве квазипостоянное электрическое поле. Электретное состояние присуще в разной мере всем диэлектрикам, в том числе и ПЭТФ.

Анализ литературных источников показал, что методы ионно-трекового электретирования полимерных пленок изучены недостаточно. Можно предположить, что в результате бомбардировки ускоренными тяжелыми ионами, по аналогии с представленными выше воздействиями УФ-облучения и щелочного травления треков, будут также изменяться электретные свойства полимерной пленки. Это будет связано с изменением морфологии и химической структуры ПЭТФ пленки после воздействия на нее как процессов ионизирующего излучения, так и высокощелочного термического гидролиза.

Для анализа влияния ионно-трековой обработки ПЭТФ на изменение электретных свойств, в представленной работе с помощью методов термостимулированной деполяризации исследовались изменения свойств трековых мембран на основе полиэтилентерефталата (ПЭТФ) [17 – 21].

Термоактивационная токовая спектроскопия широко применяется для исследования процессов электрической релаксации и, в частности, электретного состояния в различных диэлектрических материалах [17 – 22]. Одним из наиболее популярных методов термоактивационной спектроскопии, применяемым для исследования релаксации заряда в электретах, является метод термостимулированного тока разрядки, или термостимулированной деполяризации (ТСД). Измерение термостимулированных токов разрядки осуществляется в режиме короткого замыкания внешней цепи (т. е. в случае, когда сопротивление внешней измерительной цепи много меньше сопротивления исследуемого диэлектрика). Анализ формы кривой ТСД (температурная зависимость начального участка пика тока, температурное положение максимума тока и т. п.) позволяет определить на основе экспериментальных данных наиболее вероятную энергию активации электрически активных дефектов и их эффективный частотный фактор (способы обработки данных ТСД подробно описаны в статье [21]).

В качестве мотивации представленной работы следует отметить, что авторы ставят задачу понять, как изменяются свойства заряженной поверхности пленок ПЭТФ и трековых мембран на их основе, для того чтобы расширить спектр их практического применения. Трековые мембраны, обладающие свойствами электрета, могут найти дальнейшее применение в преобразователях различного назначения, например в системах герметизации, в фильтрах и мембранах, в биомедицинской технологии.

Материалы и методы

Образцы были изготовлены из пленки ПЭТФ марки Hostaphan RNK толщиной 30 мкм производства компании Mitsubishi Polyester Films (Германия). Облучение ионами ксенона $^{132}Xe^{+26}$ проводилось пучком с энергией 1,16 МэВ под углами +/– 35° последовательно с каждой стороны на циклотроне ИЦ-100 Лаборатории ядерных реакций имени Г.Н. Флёрова Объединенного института ядерных исследований (г. Дубна Московской области, Россия). Длина пробега иона в ПЭТФ составляла около 20 мкм. Поверхностная плотность пор с каждой стороны составляла $N = 4{,}5 \cdot 10^8$ см$^{-2}$. После циклотронного облучения, перед химическим травлением все образцы подвергали действию УФ-излучения в течение 2 ч с каждой стороны. УФ-излучение выполняли на воздухе, применяя лампы ЛЭ-30 (производства завода «Лисма», г. Саранск, Россия); в качестве фильтра использовали исходную ПЭТФ-пленку, периодически заменяя ее на свежую. Интенсивности УФ-излучения, измеренные радиометром ТПК-ПКМ, составляли 3 – 4 Вт/м^2 в диапазоне УФ-А (315 – 400 нм) и 1 Вт/м^2 в диапазоне УФ-В (280 – 315 нм). Плотность нано- и микропор на поверхности определяли с помощью растрового электронного микроскопа (РЭМ) Hitachi SU8020. Помимо этого, исследовали под указанным микроскопом сколы мембран, полученных при помощи техники охрупчивания полимерной матрицы мягким фотоокислением.

В данной работе методом термостимулированной деполяризации были исследованы различные образцы пленок ПЭТФ и трековых мембран на его основе.

Образцы № 1 – № 6 сначала облучали УФ-светом; время экспозиции составляло по 2 ч с каждой стороны пленки. Затем их подвергали химическому травлению. Последнее проводили в термостате при температуре 80 °С при концентрации раствора гидроксида натрия NaOH, равной 1 моль/л в течение разных периодов времени: от 1 до 6 мин.

Измерения диаметра пор на поверхности образцов проведены методом РЭМ, и результаты представлены в табл. 1.

Для измерения термостимулированных токов деполяризации использовалась установка TSC-II фирмы Setaram (Франция).

Процесс измерения токов деполяризации образцов включал в себя следующие этапы:

поляризация образцов при постоянной температуре $T_p = 90$ °С в электрическом поле напряженностью 5 кВ/мм в течение времени $t_p = 0{,}5$ мин;

их охлаждение со скоростью 4 °С/мин в электрическом поле до достижения температуры $T_0 = 10$ °С;

Таблица 1

Структурные характеристики облученных пленок ПЭТФ после травления в щелочных растворах

Номер образца	Время травления, мин	Средний диаметр пор на поверхности, нм	Данные РЭМ
1	1,0	25	Нет сквозного протравливания
2	2,0	36	
3	3,0	57	
4	4,0	78	
5	5,0	160	Сквозное протравливание
6	6,0	232	

Примечание. Образцы № 7, 8, 9 – исходные пленки, не подвергнутые травлению; образец № 8 был экспонирован УФ-лучами, образец № 9 – УФ-лучами и ионами ксенона.

их выдержка при температуре T_0 в отсутствие электрического поля в течение времени $t_0 = 1$ мин;

нагревание образцов с заданной скоростью (4, 7 или 9 К/мин) до температуры $T_f = 130$ °С с одновременным измерением токов деполяризации (использовался электрометр Keithley 6517E).

С целью исключения доступа кислорода к образцам, все измерения проводились в вакуум-камере в атмосфере газообразного гелия.

Экспериментальные результаты

В работе были исследованы образцы, полученные на разных стадиях изготовления трековых мембран (см. процедуру работы с образцами в предыдущем разделе), а также проводилось сравнение результатов с соответствующими данными по исходной полимерной пленке ПЭТФ.

На рис. 1 представлены кривые ТСД исходной полимерной пленки, полученные при двух различных скоростях нагревания образца.

На представленных зависимостях отчетливо наблюдается несколько максимумов, связанных с релаксационными процессами, которые, как правило, относятся к различным молекулярным движениям внутри полимера:

высокотемпературный α-процесс (дипольно-сегментальный) в области 90 °С, обусловленный ориентационными поворотами полярных звеньев макромолекулы в условиях, когда возможно сегментальное движение, т. е. в высокоэластическом состоянии;

β- и γ-процессы (дипольно-групповые) в областях температуры 60 и 25 °С соответственно, обусловленные подвижностью концевых и боковых полярных групп макромолекул (они могут проявляться и в стеклообразном состоянии).

Для определения энергии активации этих процессов использована методика, согласно которой применяются различные линейные скорости нагревания образца и затем используются численные методы решения на основе регуляризирующих алгоритмов Тихонова – Арсеньева. Нахождение искомых параметров – частотного фактора ω и энергии E активации электрически активных дефектов (ЭАД) по экспериментальной зависимости означает в математическом плане решение следующего интегрального уравнения:

$$j(T) \sim \int_0^{\omega_m} d\omega \int_0^{E_m} G(E,\omega)\xi(E,\omega,T,\beta)\,dE, \qquad (1)$$

где T – температура образца; β – скорость его нагревания; $G(E, \omega)$ – функция распределения ЭАД; $\xi(E, \omega, T, \beta)$ – подынтегральная функция, конкретный вид которой определяется физической моделью, заложенной в теорию явления термостимулированной деполяризации.

Анализ уравнения (1) показывает, что решение данной задачи возможно только в том случае, если известно значение частотного фактора ω. Однако на практике эта величина неизвестна заранее и решение оказывается неоднозначным. Чтобы обойти указанную трудность, в статье [5] предложен способ сопоставления энергетических спектров, которые численно восстановлены по кривым тока ТСД, измеренным для данного образца при двух скоростях нагревания и прочих равных условиях. Если значение частотного фактора выбрано правильно, то виды энергетических спектров не должны различаться для разных скоростей нагревания. Напротив, различие восстановленных спектров для разных скоростей нагревания свидетельствует о необходимости подбора другого значения частотного фактора.

Таким образом, применение данной методики позволяет с достаточной степенью достоверности определять параметры ЭАД в исследуемом материале даже в случае, когда наблю-

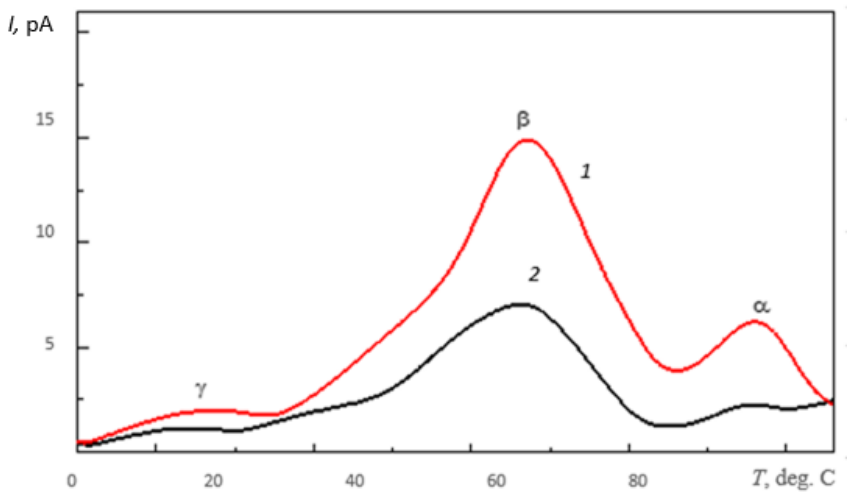


Рис. 1. Спектры ТСД исходных пленок ПЭТФ
при двух скоростях нагревания образцов: 9 К/мин (*1*) и 7 К/мин (*2*)

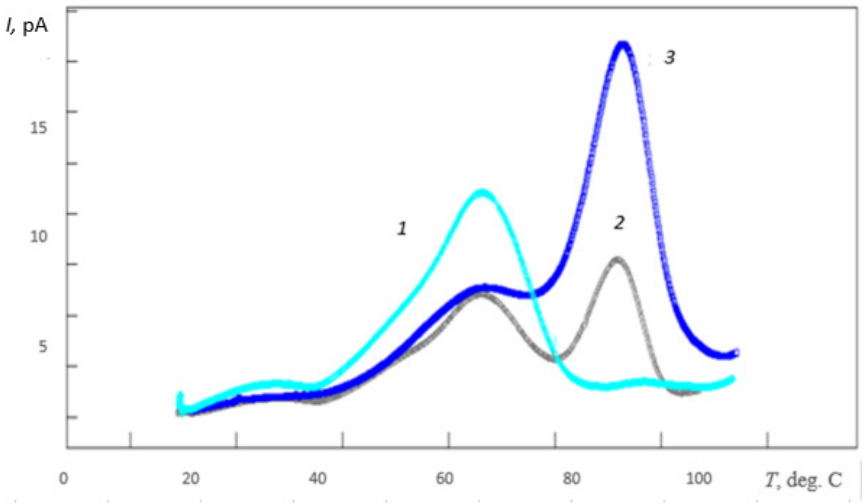


Рис. 2. Спектры ТСД пленок исходного ПЭТФ (*1*), облученного ионами ксенона (*2*)
и затем УФ-фотонами (*3*) при скорости нагревания образцов 7 К/мин

даемые в нем релаксационные процессы не являются моноэнергетическими, а электрически активные дефекты имеют сложное энергетическое распределение.

Энергии активации релаксационных процессов по результатам обработки спектров ТСД оказались равными (в эВ): 1,24, 0,93 и 0,45; они также соответствуют уменьшению температуры максимума деполяризационного пика.

Облучение пленок ПЭТФ ионами ксенона и фотонами УФ-диапазона существенно увеличивает интенсивность α-релаксации, что означает увеличение сегментальной подвижности полярных звеньев макромолекул в облученных образцах (рис. 2), что, по-видимому, обусловлено аморфизацией образцов при облучении ионами [17].

Дальнейшее травление пленок с увеличением его продолжительности от 0,5 до 6 мин существенно меняет спектр токов ТСД как по температурной шкале, так и по интенсивности

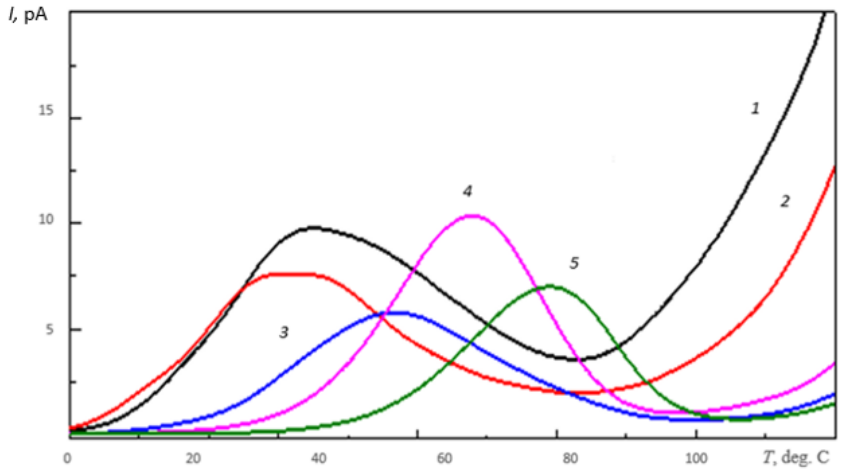


Рис. 3. Спектры ТСД пленок ПЭТФ, облученных ионами ксенона и УФ-фотонами при последующем химическом травлении образцов № 1 – № 5 (номера кривых соответствуют номерам образцов). Скорость нагревания образцов – 7 К/мин

(рис. 3). Можно предположить, что в этом случае наиболее существенным для релаксации заряда становится другой процесс, связанный, по всей видимости, сначала с образованием зарядовых ловушек на стенках треков, а затем с их опустошением.

Как видно из данных, приведенных на рис. 3, максимум токов ТСД смещается в высокотемпературную область с увеличением времени травления, а его интенсивность остается примерно одинаковой.

Для всех использованных времен травления были вычислены параметры данного релаксационного процесса: энергия активации и эффективный частотный фактор (табл. 2); для этого применялся метод Эйринга [6].

Как известно [4], увеличение времени травления приводит к увеличению среднего диаметра пор, образуемых в трековых мембранах. Это подтверждается данными, представленными в табл. 2.

Можно обратить внимание, что зависимость энергии активации от среднего диаметра пор практически линейна (рис. 4,*a*), а соответствующая зависимость эффективного частотного фактора носит ярко выраженный нелинейный характер (рис. 4,*b*).

Таблица 2

Параметры дипольно-группового релаксационного процесса, наблюдаемого в пленках ПЭТФ при различных временах травления

Время травления, мин	Средний диаметр пор, нм	Энергия активации, эВ	Эффективный частотный фактор, 10^{10} $с^{-1}$
1	36	0,70	2,4
2	57	0,73	4,4
3	78	0,76	5,4
4	160	0,88	150
5	232	0,97	1100

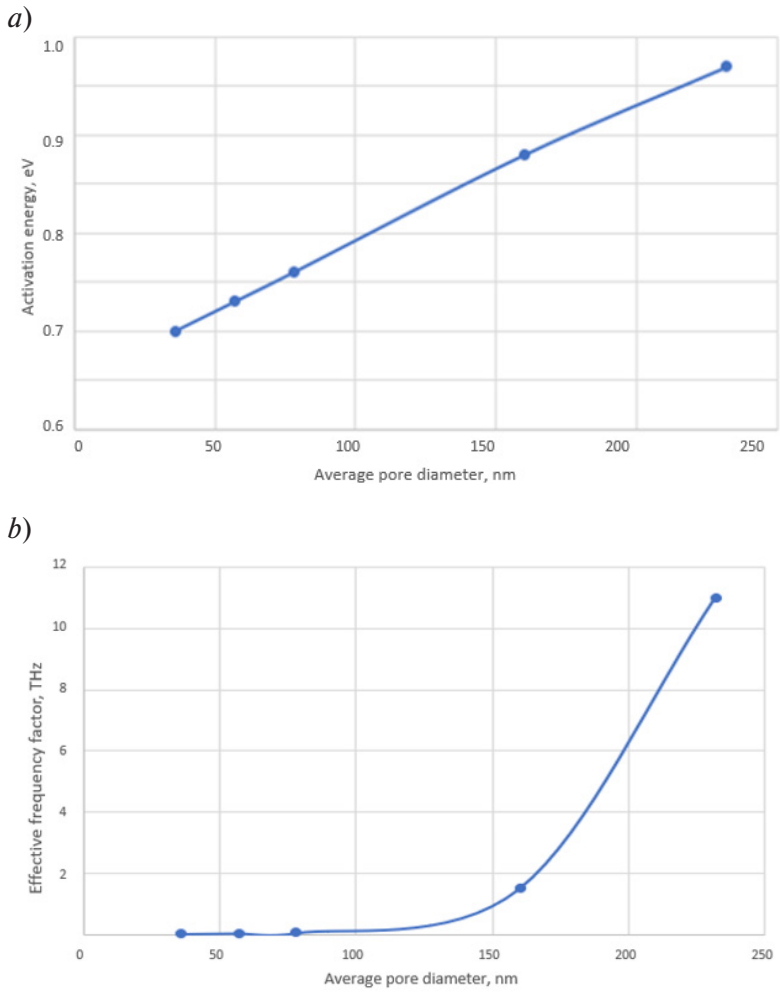


Рис. 4. Зависимости энергии активации (*a*) и эффективного частотного фактора (*b*) от среднего диаметра пор при увеличении времени травления образцов

Резкий рост частотного фактора при увеличении среднего диаметра пор, по всей видимости, может свидетельствовать об образовании сквозных пор в пленках ПЭТФ при времени травления, достаточном для этого явления, и об увеличении свободного объема полимера. Рост энергии активации позволяет предположить, что при увеличении времени травления происходит образование все более и более глубоких ловушек носителей заряда.

С помощью метода релаксационных карт [7] была рассчитана степень разупорядоченности полимерной системы. При увеличении времени травления она возрастает с 25,2 (время травления 1 мин) до 36,6 (это время составляет 5 мин), и это означает, что степень разупорядоченности может служить характеристикой общего объема «рыхлого» полимера вдоль стенок пор, образующегося в процессе травления.

Заключение

Метод термоактивационной спектроскопии впервые был применен в настоящем исследовании к трековым мембранам, изготовленным на основе пленок ПЭТФ. Показано существенное влияние процессов ионно-трековой технологии, таких как облучение тяжелыми ионами ксенона $^{132}Xe^{+26}$, УФ-сенсибилизация и травление треков пленок ПЭТФ, на спектры токов ТСД. По полученным спектроскопическим данным рассчитаны значения параме-

тров релаксаторов, а также степень разупорядоченности полимерной системы для трековых мембран с различным диаметром пор. Для исходных ПЭТФ-пленок отчетливо наблюдается несколько релаксационных процессов, которые, как правило, связываются исследователями с различными молекулярными движениями внутри полимера; в частности, имеет место высокотемпературный процесс (дипольно-сегментальный) в области температур 90 °С, который обусловлен ориентационными поворотами полярных звеньев макромолекулы в условиях, когда возможно сегментальное движение. Облучение пленок ПЭТФ ионами ксенона и УФ-фотонами существенно увеличивает интенсивность α-релаксации, что означает увеличение сегментальной подвижности в облученных образцах. Дальнейшее травление пленок с увеличением времени травления существенно меняет спектр токов ТСД как по температурной шкале, так и по пиковой интенсивности. Можно предположить, что в этом случае наиболее существенным для релаксации заряда становится другой процесс, связанный, по всей видимости, с образованием и дальнейшим опустошением зарядовых ловушек на стенках треков. Максимум спектра токов ТСД смещается с увеличением времени травления в высокотемпературную область, при этом зависимость энергии активации от среднего диаметра пор практически линейна, а соответствующая зависимость эффективного частотного фактора носит ярко выраженный нелинейный характер.

Резкое увеличение частотного фактора, скорее всего, свидетельствует об образовании сквозных пор в пленках ПЭТФ при достаточном для этого времени травления. Увеличение энергии активации позволяет предположить, что происходит образование все более и более глубоких ловушек носителей заряда при увеличении времени травления. Результаты могут свидетельствовать о существенном изменении спектра энергетических состояний накопленного при поляризации таких пленок электрического заряда и возможности создания в подобных материалах электретного состояния. Параметры релаксационных процессов трековых мембран могут быть поставлены в соответствие структурным особенностям таких объектов.

Благодарности

Авторы благодарят сотрудников Центра прикладной физики Лаборатории ядерных реакций им. Г.Н. Флёрова (г. Дубна Московской области) за помощь в реализации исследований: О.М. Иванова (за облучение пленок на циклотроне ИЦ-100), Т.И. Мамонову (за синтез мембран), Н.В. Лизунова (за РЭМ-исследования) и П.Ю. Апеля (за реализацию идеи эксперимента и плодотворное обсуждение экспериментальных данных).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (государственное задание, проект № FSZN-2020-0026).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Флёров Г.Н., Апель П.Ю., Дидык А.Ю., Кузнецов В.И., Оганесян Р.Ц.** Использование ускорителей тяжелых ионов для изготовления ядерных мембран // Атомная энергия. 1989. Т. 67. № 4. С. 274–280.

2. **Bouffard S., Gervais B., Leroy C.** Basic phenomena induced by swift heavy ions in polymers // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. 1995. Special Issue. Vol. 105. No. 1–4. Pp. 1–4.

3. **Li Ch., Sun Y., Jin Y., Liu G., Hou M., Ma F., Patnaik A.** Latent track effect of swift argon ions in polyimide // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. 1998. Vol. 135. No. 1–4. Pp. 234–238.

4. **Enge W.** On the question of nuclear track formation in plastic material // Radiation Measurements. 1995. Vol. 25. No. 1–4. Pp. 11–26.

5. **Ditlov V.A., Gaatchegov A.U., Enge W. et al.** The radial etching velocity for tracks in polymer films // Radiation Measurements. 1997. Vol. 28. No. 1–6. Pp. 137–144.

6. **Митерев А.М.** Теоретические представления о формировании и эволюции треков заряженных частиц // Успехи физических наук. 2002. Т. 172. № 10. С. 1131–1164.

7. **Апель П.Ю.** Треки ускоренных тяжелых ионов в полимерах. Дис. ... д-ра хим. наук. Спец. 02.00.09. Химия высоких энергий. Москва: Лаборатория ядерных реакций им. Г.Н. Флёрова Объединенного института ядерных исследований, 1998. 194 с.

8. **Apel P., Schulz A., Spohr R., Trautmann C., Vutsadakis V.** Track size and track structure in polymer irradiated by heavy ions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. 1998. Vol. 146. No. 1–4. Pp. 468–474.

9. **Apel P., Spohr R., Trautmann C., Vutsadakis V.** Track structure in polyethylene terephthalate irradiated by heavy ions: LET dependence of track diameter // Radiation Measurements. 1999. Vol. 31. No. 1–6. Pp. 51–56.

10. **Mchedlishvili B.V., Beryozkin V.V., Oleinikov V.A., Vilensky A.I., Vasilyev A.B.** Structure, physical and chemical properties and applications of nuclear filters as a new class of membranes // Journal of Membrane Science. 1993. Vol. 79. No. 2–3. Pp. 285–304.

11. **Kuznetsov V.I., Kuznetsov L.V., Shestakov V.D.** Track membranes of the third generation (TMG-3), their properties and industrial application // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. 1995. Special Issue. Vol. 105. No. 1–4. Pp. 250–253.

12. **Apel P.** Track etching technique in membrane technology // Radiation Measurements. 2001. Vol. 34. No. 1–6. Pp. 559–566.

13. **Kaur S.A., Amrita J.** Track etched membranes for electronic applications // International Journal of Science and Research. 2015. Vol. 4. No. 1. Pp. 1414–1417.

14. **Martin C.R.** Nanomaterials: A membrane based synthetic approach // Science. 1994. Vol. 266. No. 5193. Pp. 1961–1966.

15. **Apel P., Spohr R.** Introduction to ion track etching in polymers. Ion-tracks.de. Available: http://www.ion-tracks.de/ introduction1/ Retrieved 2013-01-21.

16. **Speight J.G., Lange N.A.** Lange's handbook of chemistry. 16th edition. New York, Chicago, San Francisco, Lisbon, London, Madrid, Mexico City, Milan, New Delhi, San Juan, Seoul, Singapore, Sydney, Toronto: McGraw-Hill Education, 2005. Pp. 2758–2807.

17. **Schneidearn W.A., Wendorff J.H.** Physical mechanism of the electrical polarization of polyethylene terephthalate // Colloid and Polymer Science. 1984. Vol. 262. No. 10. Pp. 761–768.

18. **Cañadas J.C., Diego J.A., Mudarra M., Parsa S.E., Sellarès J.** Effects of UV radiation on the charge trapping capability of PET // Journal of Physics. D. 2019. Vol. 52. No. 15. P. 155301.

19. **Gasanov A.Sh., Magerramov A.M., Nuriev M.A., Orudzhev I.A.** Relaxation of the electret charges of PET films after the action of the aerosol particles // Surface Engineering and Applied Electrochemistry. 2012. Vol. 48. No. 4. Pp. 343–347.

20. **Lacabanne C., Chatain D., Monpagens J.C.** Thermally stimulated current and creep in poly(ethylene terephthalate) // Journal of Applied Physics. 1979. Vol. 50. No. 4. Pp. 2723–2731.

21. **Гужова А.А., Темнов Д.Э., Галиханов М.Ф.** Влияние параметров электретирования на поверхностные и электретные свойства полиэтилентерефталата // Известия Российского государственного педагогического университета имени А.И. Герцена. 2013. № 157. С. 55–60.

22. **Van Turhout I.** Thermally stimulated discharge of polymer electrets. Amsterdam: Elsevier, 1975. 340 p.

23. **Vanderschuren J.G.** Thermally stimulated relaxations in solids. Edited by P. Briunlich. Berlin: Springer-Verlag, 1979.

24. **Gorokhovatsky Yu., Temnov D., Marat-Mendes J.N., Dias C.J.M., Das-Gupta D.K.** On the nature of thermally stimulated discharge current spectra in polyethylene terephthalate // Journal of Applied Physics. 1998. Vol. 83. No. 10. Pp. 5337–5341.

25. **Temnov D., Fomicheva E., Tazenkov B., Karulina E., Gorokhovatsky Yu.** Electrets properties of polyethylene films with starch and aerosil // Journal of Materials Science and Engineering (David Publishing). A. 2013. Vol. 3. No. 7. Pp. 494–498.

26. **Гороховатский Ю.А., Бордовский Г.А.** Термоактивационная токовая спектроскопия высокоомных полупроводников и диэлектриков. М.: Наука, 1991. 248 с.

27. **Eyring H., Gibbs P.** Nonclassical reaction kinetics // Science. 1951. Vol. 113. No. 2926. Pp. 104–105.

28. **Doulut S., Bacharan C., Demont P., Bernes A., Lacabanne C.** Physical aging and tacticity effects on the α relaxation mode of amorphous polymers by thermally stimulated techniques // Journal of Non-Crystalline Solids. 1998. Vol. 235 –237. 2 August. Pp. 645–651.

Статья поступила в редакцию 15.06.2021, принята к публикации 22.06.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОРОХОВАТСКИЙ Юрий Андреевич – *доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48

gorokh-yu@yandex.ru

ТЕМНОВ Дмитрий Эдуардович – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48

tde@herzen.spb.ru

ШАБАНОВА Наталья Сергеевна – *аспирантка кафедры общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48

natashshabanov@yandex.ru

НЕЧАЕВ Александр Николаевич – *кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник Лаборатории ядерных реакций им. Г.Н. Флёрова Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна Московской области, Российская Федерация.*

141980, Российская Федерация, г. Дубна Московской области, ул. Жолио-Кюри, 6

nechaeffalexander@yandex.ru

РОССОУ Арно – *аспирант Лаборатории ядерных реакций им. Г.Н. Флёрова Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна Московской области, Российская Федерация.*

141980, Российская Федерация, г. Дубна Московской области, ул. Жолио-Кюри, 6

arnoux.rossouw@gmail.com

REFERENCES

1. **Flerov G.N., Apel P.Yu., Didyk A.Yu., et al.,** Use of heavy-ion accelerators to produce nuclear membranes, Soviet Atomic Energy. 67 (4) (1989) 763–770.

2. **Bouffard S., Gervais B., Leroy C.,** Basic phenomena induced by swift heavy ions in polymers, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, Special Issue. 105 (1–4) (1995) 1–4.

3. **Li Ch., Sun Y., Jin Y., et al.,** Latent track effect of swift argon ions in polyimide, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 135 (1–4) (1998) 234–238.

4. **Enge W.,** On the question of nuclear track formation in plastic material, Radiat. Meas. 25 (1–4) (1995) 11–26.

5. **Ditlov V.A., Gaatchegov A.U., Enge W., et al.,** The radial etching velocity for tracks in polymer films, Radiat. Meas. 28 (1–6) (1997) 137–144.

6. **Miterev A.M.,** Theoretical aspects of the formation and evolution of charged particle tracks, Physics-Uspekhi. 45 (10) (2002) 1019–1050.

7. **Apel P.Yu.,** Treki uskorennykh tyazhelykh ionov v polimerakh [Tracks of accelerated heavy ions in polymers]: Thesis for Dr. of Sci. (Chem. Sci.), Spec. 02.00.09. High Energy Chemistry, Joint Institute for Nuclear Research, Moscow, 1998 (in Russian).

8. **Apel P., Schulz A., Spohr R., et al.,** Track size and track structure in polymer irradiated by heavy ions, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 146 (1–4) (1998) 468–474.

9. **Apel P., Spohr R., Trautmann C., Vutsadakis V.,** Track structure in polyethylene terephthalate irradiated by heavy ions: LET dependence of track diameter, Radiat. Meas. 31 (1–6) (1999) 51–56.

10. **Mchedlishvili B.V., Beryozkin V.V., Oleinikov V.A., et al.,** Structure, physical and chemical properties and applications of nuclear filters as a new class of membranes, J. Membr. Sci. 79 (2–3) (1993) 285–304.

11. **Kuznetsov V.I., Kuznetsov L.V., Shestakov V.D.,** Track membranes of the third generation (TMG-3), their properties and industrial application, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. Special Issue. 105 (1–4) (1995) 250–253.

12. **Apel P.,** Track etching technique in membrane technology, Radiat. Meas. 34 (1–6) (2001) 559–566.

13. **Kaur S.A., Amrita J.,** Track etched membranes for electronic applications, Intern. J. Sci. Res. 4 (1) (2015) 1414–1417.

14. **Martin C.R.,** Nanomaterials: A membrane based synthetic approach, Sci. 266 (5193) (1994) 1961–1966.

15. **Apel P., Spohr R.,** Introduction to ion track etching in polymers. Ion-tracks.de. Available: http://www.ion-tracks.de/ introduction1/ Retrieved 2013-01-21.

16. **Speight J.G., Lange N.A.,** Lange's handbook of chemistry, 16th edition, McGraw-Hill Education, New York, Chicago, San Francisco, Lisbon, London, Madrid, Mexico City, Milan, New Delhi, San Juan, Seoul, Singapore, Sydney, Toronto (2005) 2758–2807.

17. **Schneidearn W.A., Wendorff J.H.,** Physical mechanism of the electrical polarization of polyethylene terephthalate, Colloid and Polymer Science. 262 (10) (1984) 761–768.

18. **Cañadas J.C., Diego J.A., Mudarra M., et al.,** Effects of UV radiation on the charge trapping capability of PET, J. Phys. D. 52 (15) (2019) 155301.

19. **Gasanov A.Sh., Magerramov A.M., Nuriev M.A., Orudzhev I.A.,** Relaxation of the electret charges of PET films after the action of the aerosol particles, Surf. Eng. Appl. Electrochem. 48 (4) (2012) 343–347.

20. **Lacabanne C., Chatain D., Monpagens J.C.**, Thermally stimulated current and creep in poly(ethylene terephthalate), J. Appl. Phys. 50 (4) (1979) 2723–2731.

21. **Guzhova A.A., Temnov D.E., Galikhanov M.F.,** Influence of electreting parameters on the surface and electret properties of polyethylene terephthalate, Izvestia: Herzen University Journal of Humanities & Sciences. Physics. (157) (2013) 55–60 (in Russian).

22. **Van Turhout I.,** Thermally stimulated discharge of polymer electrets, Elsevier, Amsterdam, 1975.

23. **Vanderschuren J.G.,** Thermally stimulated relaxations in solids. Ed. by P. Briunlich, Springer-Verlag, Berlin, 1979.

24. **Gorokhovatsky Yu., Temnov D., Marat-Mendes J.N., et al.,** On the nature of thermally stimulated discharge current spectra in polyethylene terephthalate, J. Appl. Phys. 83 (10) (1998) 5337–5341.

25. **Temnov D., Fomicheva E., Tazenkov B., et al.,** Electrets properties of polyethylene films with starch and aerosol, J. Mater. Sci. Eng. A (David Publishing). 3 (7) (2013) 494–498.

26. **Gorokhovatsky Yu.A., Bordovsky G.A.,** Thermal activation current spectroscopy of high-resistance semiconductors and dielectrics, Nauka Publishing, Moscow, 1991 (in Russian).

27. **Eyring H., Gibbs P.,** Nonclassical reaction kinetics, Sci. 1951. Vol. 113 (2926) (1951) 104–105.

28. **Doulut S., Bacharan C., Demont P., et al.,** Physical aging and tacticity effects on the α relaxation mode of amorphous polymers by thermally stimulated techniques, J. Non-Cryst. Sol. 235 –237 (2 August) (1998) 645–651.

Received 15.06.2021, accepted 22.06.2021.

THE AUTHORS

GOROKHOVATSKY Yuriy A.
Herzen State Pedagogical University of Russia
48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation
gorokh-yu@yandex.ru

TEMNOV Dmitry E.
Herzen State Pedagogical University of Russia
48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation
tde@herzen.spb.ru

SHABANOVA Natalya S.
Herzen State Pedagogical University of Russia
48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation
natashshabanov@yandex.ru

NECHAEFF Alexander N.
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie, Dubna of Moscow region, 141980, Russian Federation
nechaeffalexander@yandex.ru

ROSSOUW Arnoux
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie, Dubna of Moscow region, 141980, Russian Federation
arnoux.rossouw@gmail.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14302
УДК 536.25, 532.517

ТУРБУЛЕНТНАЯ СМЕШАННАЯ КОНВЕКЦИЯ В БЫСТРОВРАЩАЮЩИХСЯ ОБОГРЕВАЕМЫХ КОЛЬЦЕВЫХ ПОЛОСТЯХ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЧЕРЕЗ НИХ ОСЕВОГО ПОТОКА

Е.М. Смирнов, С.И. Смирнов, А.Г. Абрамов, С.А. Галаев

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Представлены результаты вихреразрешающего численного моделирования турбулентной смешанной конвекции в системе из трех одинаковых, быстровращающихся кольцевых полостей. Полости обогреваются со стороны дисковых поверхностей и с периферии (для всех полостей задано одно и то же распределение поверхностной температуры), а теплосъем осуществляется транзитным осевым потоком воздуха, протекающим по узкому (в пределах системы полостей) кольцевому каналу. Расчеты на основе метода Implicit LES проведены с учетом условий эксперимента, известных из литературы. Вращательное число Рейнольдса составляло 200 тыс., размерность сетки – 17 млн. ячеек. Обсуждается сложная многомасштабная структура течения и влияние на локальную теплоотдачу с дисковых поверхностей входных аэродинамических и тепловых условий, не являющихся идентичными для включенных в систему полостей.

Ключевые слова: смешанная конвекция, быстровращающаяся кольцевая полость, транзитный осевой поток, глобальная циркуляция

Ссылка при цитировании: Смирнов Е.М., Смирнов С.И., Абрамов А.Г., Галаев С.А. Турбулентная смешанная конвекция в быстровращающихся обогреваемых кольцевых полостях при прохождении через них осевого потока // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 21–35. DOI: 10.18721/JPM.14302

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creative-commons.org/licenses/by-nc/4.0/)

TURBULENT MIXED CONVECTION WITHIN RAPIDLY ROTATING HEATED ANNULAR CAVITIES WITH AN AXIAL THROUGHFLOW

E.M. Smirnov, S.I. Smirnov, A.G. Abramov, S.A. Galaev

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russian Federation

The results of eddy-resolving numerical simulation of a turbulent mixed convection in a system of three identical, rapidly rotating annular cavities are presented. The cavities are heated from the side of the disk surfaces and from the periphery (the same distribution of the surface temperature is set for all the cavities), and heat removal proceeds by an axial air throughflow in the narrow channel, annular within the cavity system. The computations based on the Implicit LES method have been carried out in view of the conditions close to the experiments known from the literature for a single cavity; the rotational Reynolds number was 200,000, the grid dimension was 17 million cells. The complex multiscale flow structure and the influence of the input aerodynamic and thermal conditions, which are not identical for the cavities included in the system, on the local heat transfer from disk surfaces are discussed.

Keywords: mixed convection, rapidly rotating annular cavity, axial throughflow, global circulation

Citation: Smirnov E.M., Smirnov S.I., Abramov A.G., Galaev S.A., Turbulent mixed convection within rapidly rotating heated annular cavities with an axial throughflow, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 21–35. DOI: 10.18721/JPM.14302

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Глубокие и достоверные знания об особенностях локального теплообмена в быстровращающихся кольцевых полостях, обогреваемых со стороны дисковых поверхностей, при наличии приосевого транзитного потока охлаждающего газа, имеют самостоятельное фундаментальное значение и критически важны в области турбомашиностроения, где подобные конфигурации широко используются для охлаждения роторов осевых компрессоров газотурбинных двигателей [1 – 4].

Быстрое вращение и непрозрачность дисковых поверхностей, ограничивающих полости, вызывают затруднения для получения надежных количественных экспериментальных данных, характеризующих особенности конвекции, которая развивается в этих полостях, и локальную нестационарную теплоотдачу. Экспериментальные исследования, как правило, ограничиваются визуальными наблюдениями и измерениями локальной и интегральной теплоотдачи, осредненной во времени [1 – 3, 5, 6].

В этих условиях особые надежды возлагаются на современные методы вычислительной гидродинамики и теплообмена, а также суперкомпьютерные технологии, позволяющие проводить высокоточное вихреразрешающее моделирование. Наибольшие ожидания связаны с применением метода прямого численного моделирования (*англ.* Direct Numerical Simulation, DNS) и неявного (Implicit) метода крупных вихрей (*англ.* Large Eddy Simulation, LES), т. е. ILES-метода, в котором роль физической диссипации на малых масштабах заменяется диссипативными свойствами численной схемы.

Первоначальный опыт использования метода ILES представлен в работах [7 – 10]. Соответствующие расчеты проводились на сетках умеренной размерности (до 100 тыс. ячеек) и не позволяли получать приемлемого согласия с данными экспериментов по локальной теплоотдаче на дисках, что связывалось с неаккуратностью моделирования турбулентного течения в зоне смешения осевого потока с газом, циркулирующим в полости.

Расчеты турбулентной смешанной конвекции в одиночной быстровращающейся кольцевой вентилируемой полости, обогреваемой со стороны дисков [11 – 13], проведенные недавно с помощью методов ILES и RANS/ILES (RANS – Reynolds-averaged Navier – Stokes, т. е. уравнения Навье – Стокса, осредненные по Рейнольдсу), где использовались сетки размерностью до нескольких миллионов ячеек, позволили воспроизвести известные из литературы характерные особенности структуры течения, но оставили открытым вопрос о причинах постоянного расхождения между результатами моделирования и экспериментальными данными по теплоотдаче с поверхностей дисков.

Здесь следует отметить, что возникающие неопределенности с заданием граничных условий препятствуют в расчетах полному воспроизведению условий экспериментов. В частности, это относится к аэродинамическим и термическим условиям на входе в полость: в расчетах, проводимых для одиночной полости, как правило, задается однородный невозмущенный профиль скорости и постоянная температура во входном сечении канала, подводящего охладитель, однако в экспериментах поток на входе в полость является неоднородным и турбулизованным.

В связи с вышеизложенным, особый интерес вызывают численные исследования смешанной конвекции в системе последовательно расположенных полостей, когда возникает возможность аккуратнее смоделировать условия экспериментов, что, совместно с детальным разрешением процессов (значимых для задачи) на подробных сетках, как представляется, позволит обоснованно рассчитывать на лучшее согласие с данными измерений. Многоступенчатые полости становятся предметом изучения и в экспериментальных работах; так, в статье [14] для системы из четырех полостей были проведены измерения осредненной во времени температуры и локальной теплоотдачи на поверхностях дисков и выделены два основных режима течения, характеризующиеся двумя областями: вынужденной конвекции на малых радиусах и конвекции рэлей-бенаровского типа на средних и больших радиусах.

В настоящей работе представляются результаты вихреразрешающих расчетов турбулентной смешанной конвекции в системе обогреваемых быстровращающихся кольцевых полостей, периодически расположенных вокруг внутреннего вала сравнительно большого диаметра, при наличии приосевого потока охлаждающего воздуха.

Расчеты проведены для условий, приближенных к экспериментальным, которые создавались в работе [5], но для случая одиночной полости. Численное решение получено нами методом ILES на сетках, существенно более подробных, по сравнению с использованными ранее [7, 8]. Анализируются структуры нестационарного течения и температурных полей в полостях и в канале, подводящем охладитель, динамика крупномасштабных вихревых структур и турбулентных пульсаций. Также исследуется влияние условий на входе в полость, оказываемое на интенсивность локальной теплоотдачи от поверхностей дисков.

Постановка задачи и вычислительные аспекты

Рассматривается задача о течении и теплообмене воздуха (число Прандтля Pr = 0,69) в системе из трех быстровращающихся, обогреваемых со стороны обеих дисковых поверхностей и с периферии, междисковых полостей одинаковой формы при последовательном прохождении через них транзитного приосевого потока охлаждающего газа (рис. 1). Система вращается вокруг оси z с постоянной угловой скоростью Ω.

Расчетная область включает в себя три соосные полости (идентифицируются латинскими буквами A, B, C в порядке их следования по потоку) и поочередно прерывающийся внутри них узкий кольцевой канал, состоящий из входной части, двух коротких участков между полостями и относительно протяженной выходной части.

Геометрия полостей и радиальный размер осевого канала (высота) заимствованы из работы [5], в которой представлены результаты экспериментов для одиночной полости (табл. 1).

Таблица 1

Значения расчетных геометрических параметров (см. рис. 1)

Параметр	Обозначение	Значение, м
Внешний радиус полости	r_0	0,40
Ширина полости	s	0,08
Внутренний радиус кольцевого канала	r_i	0,12
Высота кольцевого канала	Δr	0,018
Длина частей кольцевого канала:		
входной	l_1	0,10
выходной	l_2	0,28
Расстояние между полостями	Δl	0,04

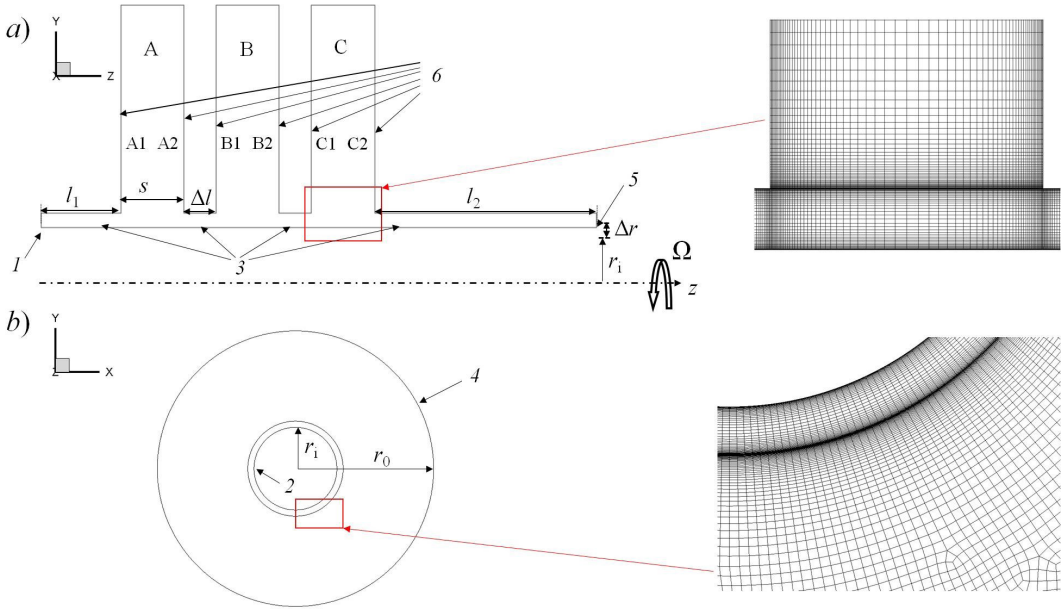


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая постановку задачи для системы из трех кольцевых полостей (A, B, C); представлены меридиональное сечение системы (*a*) и аксиальное сечение одного из дисков (*b*): *1* – вход; *2*, *3* – внутренняя и внешняя поверхности трубы; *4* – кожух; *5* – выход; *6* – дисковые поверхности (A1 A2, B1 B2, C1 C2); даны также геометрические параметры. Справа показаны фрагменты расчетной сетки для одной из полостей

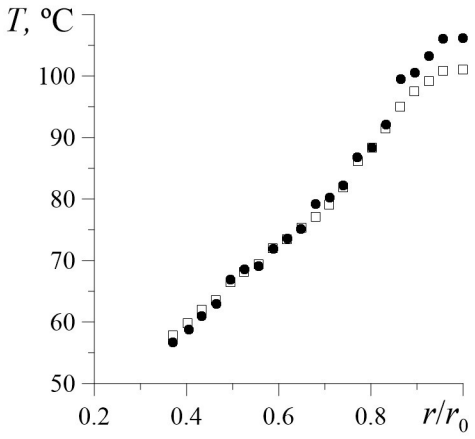


Рис. 2. Экспериментальные радиальные распределения температуры по поверхностям дисков [5]: первого (затушеванные кружки) и второго (пустые квадратики) по потоку. Радиальная координата *r* отсчитывается от центральной оси

На входе в канал (поз. *1* на рис. 1) задается постоянная температура T_{in} и однородный профиль осевой скорости W_{in} (без возмущений); окружная составляющая относительной скорости во входном сечении полагается нулевой. На обогреваемых поверхностях *6* дисков каждой полости задаются радиальные распределения температуры (см. рис. 2, где представлены экспериментальные данные [5]; радиальная координата *r* отсчитывается от центральной оси), несколько различные для первого и второго по потоку дисков (upstream & downstream disks [5]). В настоящей работе пары дисков, относящиеся к разным полостям, идентифицируются как A1 A2, B1 B2, C1 C2. В окружном направлении температура считается постоянной. На поверхностях цилиндрических кожухов (поз. *4* на рис. 1) задается линейное распределение температуры (она слабо изменяется в пределах между максимальными значениями на дисках, при $r/r_0 = 1$). Внутренняя (*2*) и внешняя (*3*) цилиндрические поверхности каналов полагаются теплоизолированными. На выходе *5* из канала задается постоянное давление.

В настоящей работе численное решение получено при наборе параметров, представленном в табл. 2.

Таблица 2

Набор остальных расчетных параметров задачи

Параметр	Обозначение	Единица измерения	Значение
Осевая скорость потока	W_{in}	м/с	0,95
Угловая скорость вращения системы	Ω	рад/с	14,2
Температура на входе в канал	T_{in}	°C	25
Средняя температура при $r = r_0$	T_0		104
Температурный фактор	ε_T	–	0,27
Числа Рейнольдса: вращательное транзитного потока	 Re_Ω Re_z		 $2\cdot10^5$ $2\cdot10^4$
Число Россби	Ro		0,56
Число Прандтля	Pr		0,69

Данные, представленные в табл. 2, соответствуют набору определяющих (безразмерных) параметров задачи, который отвечает одному из вариантов, известных из литературы [5, Case 4].

Традиционные гидродинамические числа подобия (см. табл. 2) определяются следующим образом:

$$\mathrm{Re}_\Omega = \Omega r_0^2 / \nu;\ \mathrm{Re}_z = 2 r_i W_{in} / \nu;\ \mathrm{Ro} = W_{in} / \Omega r_i,$$

где ν – коэффициент кинематической вязкости воздуха (при входной температуре).

Температурный фактор оценивается согласно выражению

$$\varepsilon_T = \beta \Delta T,$$

где β – коэффициент объемного температурного расширения (также оцениваемый при входной температуре), $\Delta T = T(r = r_0) - T_{in}$.

Исходя из приведенных на рис. 2 опытных данных, значение $T_0 = T(r = r_0)$ принято равным 104 °C.

Расчеты выполнялись с применением программного комплекса ANSYS Fluent 19.3. Задача решалась в относительной системе отсчета, вращающейся с угловой скоростью Ω, на основе приближения Буссинеска с постоянными значениями коэффициентов вязкости и теплопроводности (оцененных по значению температуры на входе в канал), без учета действия силы тяжести.

Использовался вычислительный алгоритм, базирующийся на методе совместного решения уравнений баланса массы и количества движения с коррекцией давления. Пространственная дискретизация конвективных членов уравнений осуществлялась на основе схемы QUICK третьего порядка точности. Диффузионные слагаемые аппроксимировались по центрально-разностной схеме со вторым порядком точности. Продвижение по физическому времени производилось на основе безытерационного метода дробных шагов второго порядка. Шаг по времени задавался равным $4\cdot10^{-4}$ с, что обеспечивало во всей расчетной области для числа Куранта значение меньше единицы. По истечении переходного периода накапли-

валась представительная статистика по полям скорости и температуры и характеристикам теплопередачи (за время, соответствующее примерно 100 оборотам системы полостей).

Неструктурированная расчетная сетка, фрагменты которой показаны на рис. 1, состояла из шестигранников, включала в себя около 17 млн. ячеек и имела сильное сгущение ко всем стенкам расчетной области. Использованная (весьма подробная) сетка обеспечила, в том числе, возможность качественного воспроизведения явлений, важных для адекватного предсказания процесса теплообмена:

течения в зонах смешения приосевого потока с течением в полостях;

динамики разномасштабных вихревых структур в полости;

их взаимодействия с тонкими квазиламинарными экмановскими слоями, которые формируются у дисковых поверхностей.

Результаты расчетов и их обсуждение

Отдельные особенности трехмерной вихревой картины течения, развивающегося в рассматриваемой системе, иллюстрируются рис. 3 с помощью изоповерхностей Q-критерия ($Q = 400$ с$^{-1}$). Видно, что в каждой из полостей формируется течение с двумя рукавами сильно турбулизованной среды и множеством отдельных вихревых образований в зонах транзитного потока и у стенок полости. Причина формирования наблюдаемых турбулентных рукавов поясняется ниже.

Специального обсуждения заслуживают особенности структуры транзитного течения в кольцевом канале. Здесь следует еще раз отметить, что выраженные кольцевые каналы имеются только на входной и выходной частях рассматриваемой конфигурации. Во входном канале, в силу заданных условий однородного невозмущенного потока и относительно малой длины канала, пограничные слои не успевают нарасти и турбулизации течения не происходит; в результате этого в первую полость входит почти однородный транзитный поток.

Однако уже на выходе из первой полости транзитный поток становится турбулентным в результате его взаимодействия с находящейся в полости средой, которое имеет место в слоях смешения. Далее транзитный поток, обтекая острую кромку, поступает в короткий участок канала между полостями, и на входе во вторую полость (как и в третью) течение существенно турбулизовано.

Для всех полостей на рис. 4 приведены мгновенные поля относительной тангенциальной скорости и температуры в среднем аксиальном сечении (с нанесенными на них линиями тока).

Здесь стоит отметить, что, в соответствии с картиной общей циркуляции потока в быстровращающихся полостях, которая сформирована по результатам экспериментов 1990-х гг. для полостей с центральной аксиальной трубой, по которой протекал охлаждающий газ [1 – 3], принято выделять эволюционирующие крупномасштабные циклонические и антициклонические вихри рэлей-бенаровского типа, разделенные радиальными рукавами холодного газа, движущегося в направлении периферии области [7, 8, 11 – 13].

В представляемых расчетах для кольцевой полости получено решение с «глобальным» антициклоническим вихрем, окружающим транзитный поток, и парой циклонических вихрей, оттесненных на периферию (см. рис. 4). Примечательно также, что турбулизованные рукава холодного газа располагаются внутри глобального антициклонического вихря, определяя формирование пары локальных «внутренних» антициклонических вихрей. Вихревая структура ядра потока в общих чертах сохраняется во времени, совершая при этом азимутальное перемещение (прецессию) в направлении, противоположном направлению вращения.

На рис. 5 для среднего сечения каждой из полостей приведены радиальные распределения тангенциальной скорости и температуры, осредненных по времени и окружной координате (угловые скобки – знак осреднения). Ядро потока в среднем заметно отстает от переносного

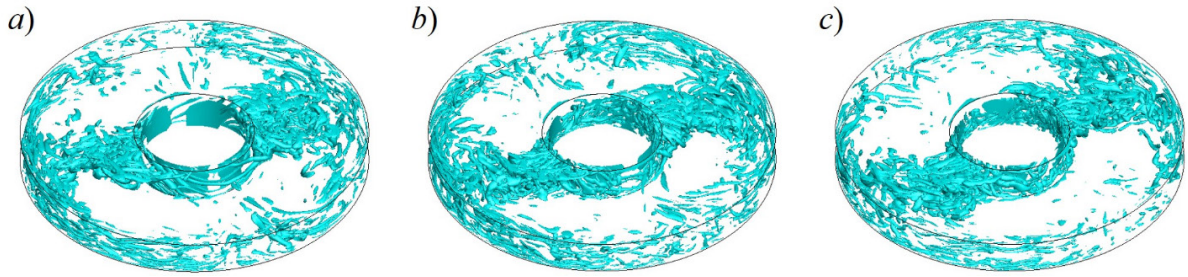


Рис. 3. Визуализация трехмерной вихревой картины течения через мгновенные изоповерхности Q-критерия в полостях A (a), B (b) и C (c) (см. рис. 1); $Q = 400$ с$^{-1}$

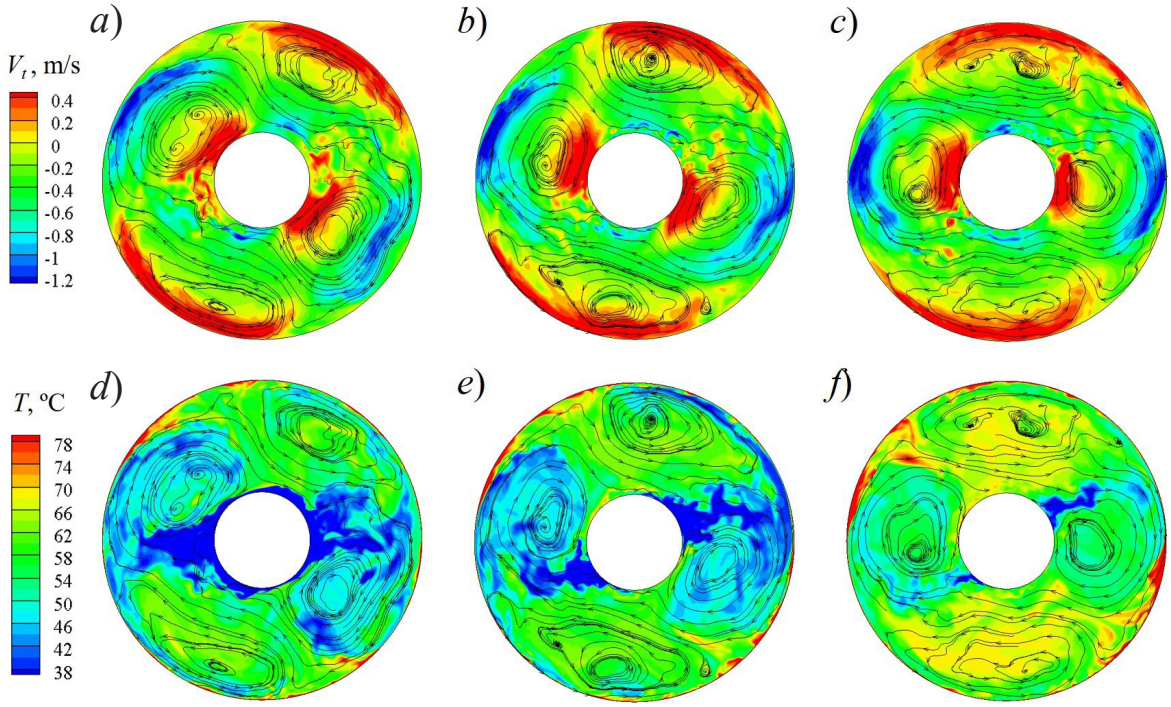


Рис. 4. Мгновенные поля тангенциальной скорости (a – c) и температуры (d – f) в среднем аксиальном сечении между дисками в полостях A (a, d), B (b, e), C (c, f) (см. рис. 1)

движения глобального вращения системы (рис. 5,a). Отметим, что близкий уровень такого отставания показали результаты измерений окружной скорости, выполненных в работе [15] для родственной конфигурации с одиночной быстровращающейся полостью, нагреваемой со стороны только одного диска; других опытных данных по скорости отставания не обнаружено.

Средняя температура ядра потока (рис. 5,b) меняется по радиусу неравномерно: в большей части полости она почти постоянна, а сильные градиенты имеют место у горячего кожуха с подтекающими к нему областями относительно холодного газа.

Для всех трех полостей рис. 6 иллюстрирует колебания во времени температуры в точках мониторинга, расположенных в центральных аксиальных сечениях на расстоянии $r = 0{,}75r_0$ от оси, а также энергетический спектр колебаний в тех же точках для первой и второй полостей. Представленные графики подтверждают, что во всех полостях течение имеет выра-

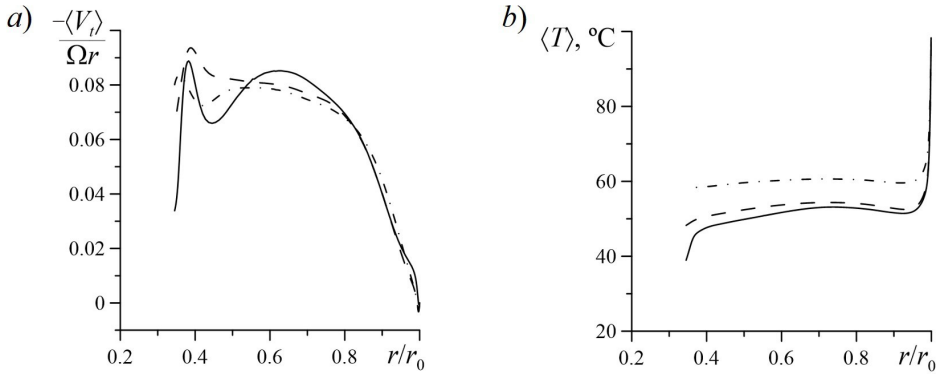


Рис. 5. Расчетные радиальные распределения осредненных тангенциальной скорости (*a*) и температуры (*b*) в среднем аксиальном сечении между дисками в полостях A (сплошная линия), B (пунктирная) и C (штрихпунктир)

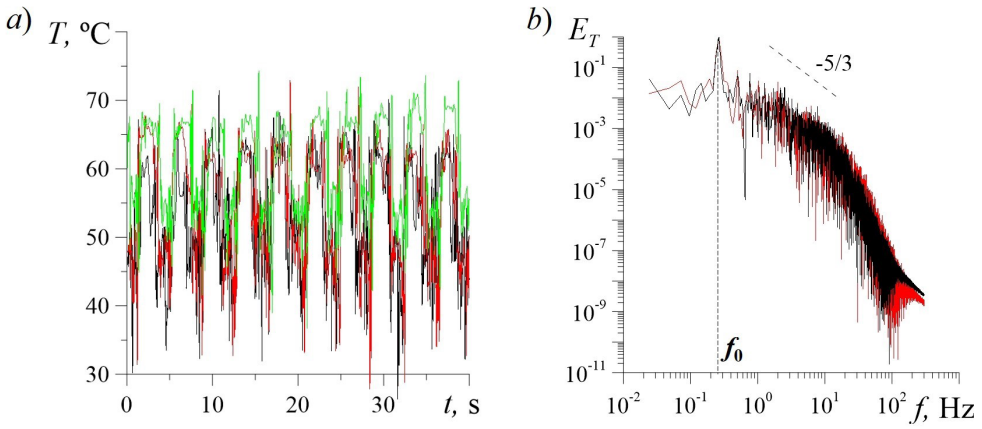


Рис. 6. Колебания во времени температуры в точках мониторинга, расположенных в центральных сечениях полостей между дисками на расстоянии $r = 0{,}75r_0$ от оси (*a*) и соответствующий энергетический спектр для точек в полостях A и B (*b*). Показаны результаты вычислений для полостей A, B и C (кривые черного, красного и зеленого цветов соответственно)

женный турбулентный характер. В целом общая структура колебаний в полостях схожа, а их амплитуда достигает 0,6 от температурного перепада. Наличие низкочастотных колебаний (с ведущей частотой f_0 = 0,26 Гц) отражает отмеченную выше глобальную прецессию ядра потока.

Переходя к обсуждению мелкомасштабного движения, во многом связанного с явлениями в слоях Экмана, образующихся на дисковых поверхностях, оценим, прежде всего, толщину этих слоев. Хорошо известно (см., например, монографию [3]), что характерную толщину δ «классического» слоя Экмана можно оценить как $\delta = (\nu/\Omega)^{0,5}$, а общая толщина слоя δ_E составляет примерно 3δ. Соответствующие оценки для рассматриваемого случая дают значения δ = 0,9 мм и δ_E = 2,7 мм.

Рис. 7 демонстрирует мгновенные распределения аксиальной скорости в сечениях, расположенных во второй полости вблизи дисков A1 и A2 у внешних границ слоев Экмана, выделенных по данным оценкам, а также в центральном аксиальном сечении между дисками. Как видно на рис. 7, *a* и *b*, в слоях Экмана формируются продольно ориентированные вихревые

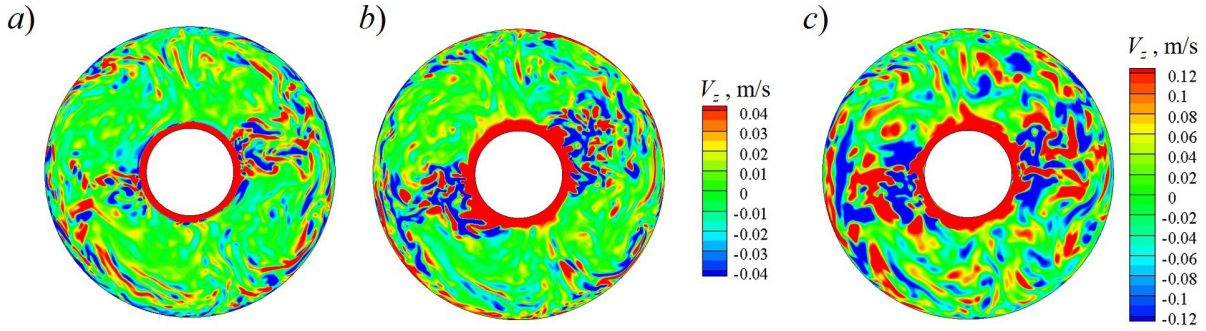


Рис. 7. Мгновенные распределения аксиальной скорости на расстояниях 2,7 мм от первого (*a*) и от второго (*b*) по потоку дисков, а также в центральном аксиальном сечении между дисками в первой полости (*c*)

структуры, что с очевидностью говорит о развитии гидродинамических неустойчивостей в этих слоях. Отметим, что аналогичные структуры были получены нами в недавних расчетах свободной конвекции в быстровращающейся замкнутой полости при введении приосевых стоков тепла, моделирующем теплоотводящее действие транзитного потока в исходной задаче о смешанной конвекции (см. работу [16]). На данный момент можно лишь предположить, что в условиях неизотермичности слоя Экмана эти структуры выступают своего рода «затравкой» для развития осевого движения среды поперек полости в виде локальных разнонаправленных потоков с интенсивностью, составляющей десятки процентов от характерных значений относительной окружной скорости и обеспечивающей эффективный обмен теплом между экмановскими слоями и ядром потока. Глубокое проникновение в существо этого вопроса требует специальных обстоятельных исследований.

На рис. 8 приведены осредненные по времени и окружному направлению поля температуры в меридиональном сечении рассматриваемой системы полостей. Видно, что имеет место существенный рост температуры транзитного потока по мере последовательного прохождения через полости. Значения прироста среднемассовой температуры после прохождения полостей A, B и C составляют 13,1, 12,9 и 9,6 °C, соответственно. Таким образом, значения температурного фактора ε_T для трех включенных в систему полостей различны и составляют: $\varepsilon_{T,A} = \varepsilon_{T,in} = 0{,}27$; $\varepsilon_{T,B} = 0{,}21$; $\varepsilon_{T,C} = 0{,}17$ (при оценках величин $\varepsilon_{T,B}$ и $\varepsilon_{T,C}$ характерный перепад температуры ΔT и значения коэффициента объемного расширения β вычислялись по среднемассовой температуре на входе в соответствующую полость).

Табл. 3 содержит расчетные данные по тепловой мощности, снимаемой с дисковых (величины Q_1 и Q_2) и внешней цилиндрической (Q_3) поверхностей каждой из полостей. В последнем столбце табл. 3 приведены значения суммарного теплосъема Q_Σ со стенок полости. Примечательно, что суммарное количество тепла, отводимое в единицу времени от стенок второй полости, близко к величине, предсказываемой для первой, при том, что во вторую полость входит поток, уже прогретый (на 13,1 °C) относительно условий входа в первую полость. Скорее всего, этот, несколько неожиданный, результат обусловлен тем, что транзитный поток, входящий во вторую полость, сильно турбулизован, в то время как на входе в первую полость турбулентные образования (при принятых граничных условиях) практически отсутствуют. Со стенок третьей полости, как и ожидалось, снимается уже существенно меньшее количество тепла.

Другой интересный результат заключается в выравнивании интегрального теплосъема с дисков, образующих полость, по мере перехода от полости A к полости B, и далее – к поло-

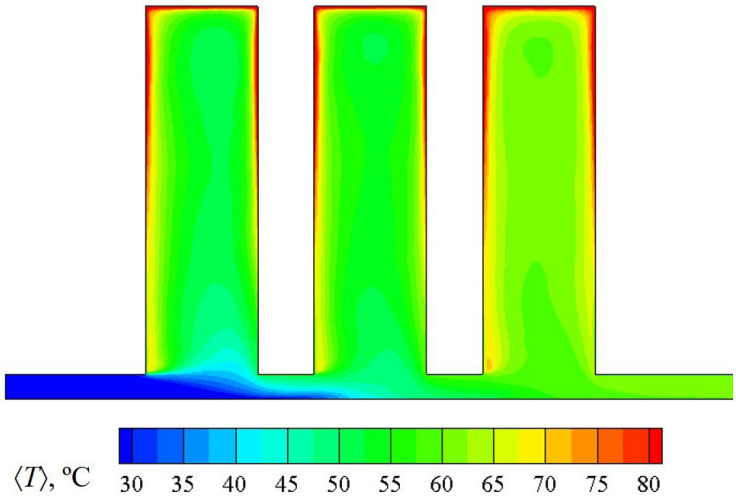


Рис. 8. Расчетное поле осредненной температуры в меридиональном сечении системы

Таблица 3

Расчетные данные по интегральной тепловой мощности (Вт), снимаемой с поверхностей полостей

Полость	Q_1	Q_2	Q_3	Q_Σ
A	54,4	84,7	79,7	218,8
B	61,4	71,8	81,9	215,1
C	46,3	48,6	65,1	160,0

Обозначения: Q_1, Q_2 – мощности, снимаемые с дисковых поверхностей; Q_3 – мощность, снимаемая с внешней цилиндрической поверхности; Q_Σ – значения суммарного теплосъема со стенок полости.

сти C. Различие величин Q_1 и Q_2 для первой полости составляет 22 % (относительно среднего значения), и снижается до 2,5 % для третьей полости.

Обращаясь к расчетным результатам для локальной интенсивности теплоотдачи, отметим, прежде всего, что локальное число Нуссельта на поверхности дисков было рассчитано на основании перепада температуры между локальным значением на стенке и среднемассовым значением на входе в полость, индивидуальным для каждой полости.

На рис. 9 приведены рассчитанные радиальные, осредненные по времени и окружной координате, распределения локального числа Нуссельта по поверхностям всех шести дисков в сравнении с данными экспериментов для одиночной полости [5].

Локальные значения числа Nu, предсказанные для первой полости, вполне удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными, особенно с учетом значительного разброса последних. Наибольшие отличия от эксперимента наблюдаются для первого по потоку диска, где на малых радиусах предсказывается участок «отрицательной» теплоотдачи, отсутствующий в опытных данных.

Можно видеть также, что отмеченные ранее различия в условиях на входных границах полостей оказывают заметное влияние на результаты расчетов. Сильная турбулизованность транзитного потока, поступающего во вторую и третью полости, способствует росту нормированной теплоотдачи с дисковых поверхностей на средних и больших радиусах. Понижение

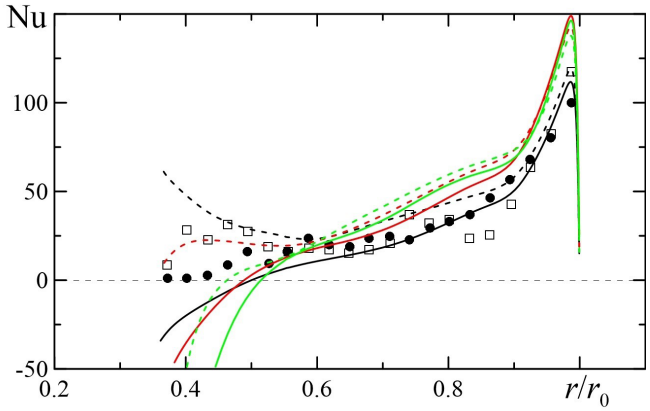


Рис. 9. Сравнение расчетных радиальных изменений локального числа Нуссельта Nu на поверхностях дисков (линии) с экспериментальными данными [5] (символы). Показаны результаты вычислений для полостей A, B и C (кривые черного, красного и зеленого цветов соответственно; сплошные линии – для A1, B1 и C1, пунктиры – для A2, B2 и C2). Отображение экспериментальных данных идентично приведенному на рис. 2

температурного фактора для конвекции, которая развивается в третьей полости, особенно сказывается на утолщении приповерхностного температурного слоя у диска C1 (это отчетливо видно из представленного на рис. 8 температурного поля) и появлению зоны «отрицательной» теплоотдачи, все более существенной по протяженности.

Заключение

В настоящей работе проведено на основе вихреразрешающего подхода ILES, на подробной расчетной сетке (размерность 17 млн. ячеек), численное моделирование турбулентной смешанной конвекции в многоступенчатой системе из трех быстровращающихся кольцевых полостей, обогреваемых со стороны дисковых поверхностей и с периферии и охлаждаемых транзитным потоком воздуха, который протекает по узкому приосевому кольцевому каналу.

Предсказана не наблюдавшаяся ранее в расчетах данной направленности крупномасштабная структура течения, формирующегося в полостях с глобальным антициклоническим вихрем, который окружает транзитный поток, и циклоническими вихрями, которые локализованы на больших радиусах. Представляется, что правильное описание в расчетах динамики крупномасштабных вихрей в сочетании с воспроизведением мелкомасштабных структур, отвечающих за теплообмен между придисковыми слоями и ядром потока, стало одной из ключевых причин полученного удовлетворительного согласия с опытными данными. Важным результатом является также установление факта высокой чувствительности характеристик теплоотдачи к условиям на входе в полость.

Исследования по проблеме, продолжающиеся в настоящее время, нацелены на дальнейшую отработку вихреразрешающей методики расчета течений данного класса, обладающих повышенной сложностью. Указанная методика претендует на получение достоверных и воспроизводимых результатов. Новые расчеты предполагается провести на основе модели сжимаемого газа для системы из двух-трех полостей с варьированием динамических и температурных условий на входе в полость, включая задание входной «синтетической» турбулентности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта «Вихреразрешающее моделирование свободной и смешанной конвекции в быстровращающихся кольцевых полостях» № 20-08-01090.

Результаты расчета получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра СПбПУ (https://scc.spbstu.ru).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Farthing P.R., Long C.A., Owen J.M., Pincombe J.R.** Rotating cavity with axial throughflow of cooling air: Flow structure // J. Turbomach. 1992. Vol. 114. No. 1. Pp. 237–246.

2. **Long C.A.** Disk heat transfer in a rotating cavity with an axial throughflow of cooling air // Int. J. Heat Fluid Flow. 1994. Vol. 15. No. 4. Pp. 307–316.

3. **Owen J.M., Rogers R.H.** Flow and heat transfer in rotating-disk systems. Vol. 2: Rotating cavities. New York: John Wiley & Sons, 1995. 295 p.

4. **Harmand S., Pelle J., Poncet S., Shevchuk I.V.** Review of fluid flow and convective heat transfer within rotating disk cavities with impinging jet // Int. J. Thermal Sciences. 2013. Vol. 67. No. 1. Pp. 1–30.

5. **Bohn D., Deutsch G., Simon B., Burkhardt C.** Flow visualization in a rotating cavity with axial throughflow // Proc. ASME Turbo Expo 2000, May 8–11, 2000, Munich, Germany. Paper No. GT2000-280. 8 p.

6. **Jackson R.W., Luberti D., Tang H., Pountney O.J., Scobie J.A., Sangan C.M., Owen J.M., Lock G.D.** Measurement and analysis of buoyancy-induced heat transfer in aero-engine compressor rotor // J. Eng. Gas Turbines Power. 2021. Vol. 143. No. 6. P. 061004.

7. **Bohn D.E., Bouzidi F., Burkhardt C., Kitanina E.E., Ris V.V., Smirnov E.M., Wolff M.W.** Numerical and experimental investigations of the air flow and heat transfer in rotating cavities // Proc. 9th Int. Symp. on Transport Phenomena and Dynamics of Rotating Machinery; February 10–14, 2002, Honolulu, Hawaii. Paper No. 2002.02.10-14. 8 p.

8. **Kitanina E.E., Ris V.V., Smirnov E.M., Goryachev V.D.** Numerical visualization technique for field processing of unsteady natural convection in rotating cavities // Proc. Eurotherm Seminar 71; October 28–30, 2002, Reims, France. Pp. 275–280.

9. **Bohn D., Ren J., Tuemmers C.** Investigation of the unstable flow structure in a rotating cavity // Proc. ASME Turbo Expo 2006; 8–11 May, 2006, Barcelona, Spain. Paper No. GT2006-90494. 10 p.

10. **Smirnov E.M.** Recent advances in numerical simulation of 3D unsteady convection controlled by buoyancy and rotation // Proc. 12th International Heat Transfer Conference; August 18–23, 2002, Grenoble, France. 12 p.

11. **Abramov A.G., Zaitsev D.K., Smirnov E.M., Smirnovsky A.A.** An experience in eddy resolving simulation of mixed convection in a rotating annular cavity with one heated disk and axial throughflow // J. Phys.: Conf. Ser. 2020. Vol. 1683. P. 022089.

12. **Абрамов А.Г., Смирнов С.И., Китанина Е.Э., Смирнов Е.М.** Нестационарные вихревые структуры, формирующиеся в нагреваемой быстровращающейся кольцевой полости с транзитным осевым потоком охлаждающего воздуха // Пермские гидродинамические научные чтения. Материалы VII Всероссийской конференции с международным участием, посвященной памяти профессоров Г.З. Гершуни, Е.М. Жуховицкого и Д.В. Любимова. Пермь: Пермский государственный национальный исследовательский университет, 2020. С. 28–37.

13. **Smirnov S.I., Abramov A.G., Kitanina E.E., Smirnov E.M.** Numerical study of turbulent mixed convection in a rotating inter-disk cavity with axial throughflow of cooling air // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. Vol. 1809. P. 012013.

14. **Quan Y., Han D., Xu G., Wen J., Luo X.** Convective heat transfer of a rotating multi-stage cavity with axial throughflow // Int. J. Heat Mass Transf. 2018. Vol. 119. April. Pp. 117–127.

15. **Owen J.M., Powell J.** Buoyancy-induced flow in a heated rotating cavity // J. Eng. Gas Turbines Power. 2006. Vol. 128. No. 1. Pp. 128–134.

16. **Smirnov S.I., Smirnov E.M., Kolesnik E.V.** Structure of turbulent natural convection in a heated rapidly rotating inter-disk cavity with near-axis heat sinks // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. Vol. 1959. P. 012045.

Статья поступила в редакцию 29.06.2021, принята к публикации 26.07.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СМИРНОВ Евгений Михайлович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики, главный научный сотрудник Научно-исследовательской лаборатории гидроаэродинамики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
smirnov_em@spbstu.ru

СМИРНОВ Сергей Игоревич – *кандидат физико-математических наук, инженер Научно-образовательного центра «Компьютерные технологии в аэродинамике и теплотехнике» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sergeysmirnov92@mail.ru

АБРАМОВ Алексей Геннадьевич – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
abramov_ag@spbstu.ru

ГАЛАЕВ Сергей Александрович – *кандидат технических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
galaev@spbstu.ru

REFERENCES

1. **Farthing P.R., Long C.A., Owen J.M., Pincombe J.R.,** Rotating cavity with axial throughflow of cooling air: Flow structure, J. Turbomach. 114 (1) (1992) 237–246.

2. **Long C.A.,** Disk heat transfer in a rotating cavity with an axial throughflow of cooling air, Int. J. Heat Fluid Flow. 15 (4) (1994) 307–316.

3. **Owen J.M., Rogers R.H.,** Flow and heat transfer in rotating-disk systems, Vol. 2: Rotating cavities, John Wiley & Sons, New York, 1995.

4. **Harmand S., Pelle J., Poncet S., Shevchuk I.V.,** Review of fluid flow and convective heat transfer within rotating disk cavities with impinging jet, Int. J. Thermal Sciences. 67 (1) (2013) 1–30.

5. **Bohn D., Deutsch G., Simon B., Burkhardt C.,** Flow visualization in a rotating cavity with axial throughflow, In: Proc. ASME Turbo Expo 2000, May 8–11, 2000, Munich, Germany, Paper No. GT2000-280.

6. **Jackson R.W., Luberti D., Tang H., et al.,** Measurement and analysis of buoyancy-induced heat transfer in aero-engine compressor rotor, J. Eng. Gas Turbines Power. 143 (6) (2021) 061004.

7. **Bohn D.E., Bouzidi F., Burkhardt C., et al.,** Numerical and experimental investigations of the air flow and heat transfer in rotating cavities, In: Proc. 9th Int. Symp. on Transport Phenomena and Dynamics of Rotating Machinery, February 10–14, 2002, Honolulu, Hawaii. Paper No. 2002.02.10-14.

8. **Kitanina E.E., Ris V.V., Smirnov E.M., Goryachev V.D.,** Numerical visualization technique for field processing of unsteady natural convection in rotating cavities, In: Proc. Eurotherm Seminar 71, October 28–30, 2002, Reims, France (2002) 275–280.

9. **Bohn D., Ren J., Tuemmers C.,** Investigation of the unstable flow structure in a rotating cavity, In: Proc. ASME Turbo Expo 2006, 8–11 May, 2006, Barcelona, Spain, Paper No. GT2006-90494.

10. **Smirnov E.M.,** Recent advances in numerical simulation of 3D unsteady convection controlled by buoyancy and rotation, In.: Proc. 12th International Heat Transfer Conference, August 18–23, 2002, Grenoble, France.

11. **Abramov A.G., Zaitsev D.K., Smirnov E.M., Smirnovsky A.A.,** An experience in eddy resolving simulation of mixed convection in a rotating annular cavity with one heated disk and axial throughflow, J. Phys.: Conf. Ser. 1683 (2020) 022089.

12. **Abramov A.G., Smirnov S.I., Kitanina E.E., Smirnov E.M.,** Non-stationary vortex structures forming in a heated rapidly rotating annular cavity with axial throughflow of cooling air, In: "Perm Hydrodynamic Scientific Readings", Proceedings of the 7-th All-Russian Conference Memorized to Prof. G.Z. Gershuny, E.M. Zhukhovitskiy and D.V. Lyubimov, Perm State University, Perm (2020) 28–37 (in Russian).

13. **Smirnov S.I., Abramov A.G., Kitanina E.E., Smirnov E.M.,** Numerical study of turbulent mixed convection in a rotating inter-disk cavity with axial throughflow of cooling air, J. Phys.: Conf. Ser. 1809 (2021) 012013.

14. **Quan Y., Han D., Xu G., et al.,** Convective heat transfer of a rotating multi-stage cavity with axial throughflow, Int. J. Heat Mass Transfer. 119 (April) (2018) 117–127.

15. **Owen J.M., Powell J.,** Buoyancy-induced flow in a heated rotating cavity, J. Eng. Gas Turbines Power. 128 (1) (2006) 128–134.

16. **Smirnov S.I., Smirnov E.M., Kolesnik E.V.,** Structure of turbulent natural convection in a heated rapidly rotating inter-disk cavity with near-axis heat sinks, J. Phys.: Conf. Ser. 1959 (2021) 012045.

Received 29.06.2021, accepted 26.07.2021.

THE AUTHORS

SMIRNOV Evgeny M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
smirnov_em@spbstu.ru

SMIRNOV Sergei I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
sergeysmirnov92@mail.ru

ABRAMOV Alexey G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
abramov_ag@spbstu.ru

GALAEV Sergey A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
galaev@spbstu.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14303
УДК 621.486

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОАКУСТИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ ГАЗА В ТРУБЕ С ТЕПЛООБМЕННЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ ТОРОИДАЛЬНОЙ ФОРМЫ

С.В. Булович

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе проведено моделирование режимов течения газа в трубе, закрытой с одного конца и открытой в атмосферу другим концом; для этого использовано численное решение системы уравнений Навье – Стокса в двумерной осесимметричной постановке. Возбуждение колебаний газодинамических функций обусловлено градиентом температуры на участке трубы, возникающим в результате контакта газа с разнонагретыми тороидальными элементами внутри трубы, температура которых поддерживается постоянной. По достижении указанным градиентом порогового значения, в трубе наблюдается устойчивое термоакустическое колебание газового столба. Рассчитаны зависимости от времени давления и осевой составляющей скорости газа, а также тепловые потоки в теплообменном блоке резонатора. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Ключевые слова: термоакустика, эффект Зондхаусса, математическое моделирование, численное решение уравнений Навье – Стокса

Ссылка при цитировании: Булович С.В. Численное моделирование термоакустических колебаний газа в трубе с теплообменными элементами тороидальной формы // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 36–48. DOI: 10.18721/JPM.14303

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creative-commons.org/licenses/by-nc/4.0/)

NUMERICAL SIMULATION OF THERMOACOUSTIC GAS OSCILLATIONS IN A PIPE WITH TOROIDAL HEAT EXCHANGE ELEMENTS

S.V. Bulovich

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russian Federation

The paper simulates the modes of a gas flow in a pipe closed at one end and open to the atmosphere at the other end; for this purpose, a numerical solution of the system of Navier – Stokes equations in a two-dimensional axisymmetric formulation has been used. The excitation of oscillations of gas-dynamic functions is caused by the temperature gradient in the pipe section resulting from the contact of the gas with differently heated toroidal elements inside the pipe, their temperature being maintained constant. When the specified gradient reaches the threshold value, a stable thermoacoustic oscillation of the gas column is observed in the pipe. The time dependences of the pressure and the axial component of the gas velocity, as well as the heat flows in the heat exchange unit of the resonator, were calculated. The obtained results were in good agreement with the experimental data.

Keywords: thermoacoustics, Sondhauss effect, mathematical simulation, numerical solution of Navier – Stokes equations

Citation: Bulovich S.V., Numerical simulation of thermoacoustic gas oscillations in a pipe with toroidal heat exchange elements, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 36–48. DOI: 10.18721/JPM.14303

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Известно немало устройств, выполняющих конверсию тепловой энергии в механическую или электрическую. Особый интерес вызывает термоакустический двигатель, поскольку промежуточным звеном в этом преобразовании выступает акустическая энергия в виде стоячих или бегущих волн. Исследование механизма возникновения звукового поля, его поддержание на должном уровне в процессе работы являются предметом исследования многочисленных научных групп. Сам двигатель отличается простотой конструкции и возможностью отсутствия подвижных элементов в области рабочего тела. Внешний подвод тепла позволяет использовать любой источник энергии, а перемещение рабочего тела в замкнутой системе открывает возможности создавать автономные конструкции, которые могут быть использованы на Земле и в космосе.

Впервые эффект возникновения звука в трубе, закрытой с одного конца, а другим концом открытой в атмосферу, был описан немецким физиком Зондхауссом [1]. Работа не содержала указания на причины возникновения звука, однако в общих чертах были установлены особенности поведения таких характеристик процесса, как зависимость частоты и амплитуды генерируемых волн от параметров задачи. Качественные оценки явлений возникновения и поддержания колебаний были сделаны Рэлеем [2] и, как оказалось впоследствии, стали общими для целой дисциплины – термоакустики. Концептуальная мысль, выраженная в достаточно лаконичной форме, несет в себе идею, что если теплота сообщается газу в момент наибольшего сжатия или отнимается от него в момент наибольшего разрежения, то это приводит к усилению акустического колебания. Важным моментом в этом утверждении является указание на источник поддержания колебаний – зависимость от времени теплоподвода и его синхронизация с колебаниями давления. Патнэм и Деннис [3] математически обосновали эту гипотезу, которая получила название «критерий Рэлея». Формулировка критерия указывает на фазовый сдвиг между колебаниями давления и колебаниями теплоподвода, который по абсолютному значению должен быть меньше $\pi/2$; в этом случае колебания возбуждаются; если же фазовый сдвиг лежит в пределах от $\pi/2$ до π, то колебания гасятся.

Первый термоакустический двигатель на стоячей волне был создан в 1962 году в компании Carter, White and Steele (США) [4]. В результате экспериментальных исследований между участками теплоподвода и теплоотведения был размещен «стек» – теплообменный элемент, обладающий тепловой инерцией, по аналогии с регенераторами, которые нашли применение в двигателях Стирлинга. Это усовершенствование позволило значительно усилить термоакустический эффект в трубе Зондхаусса. Среди различных прототипов следует выделить образец, построенный в Лос-Аламосской национальной лаборатории в 1990-х годах [5]. В это же время в Национальном центре физической акустики Университета Миссисипи создается экспериментальная установка для исследования стоячей термоакустической волны в широком диапазоне изменения параметров [6]. Дальнейшее направление экспериментальных исследований связано с формированием системы, которая состоит из связки акустического двигателя и акустического холодильника, объединенных общим резонатором [7]. Изменение прямолинейной формы резонатора на U-образную и использование в полости резонатора жидкого поршня позволило существенно сократить размеры сдвоенной установки [8].

Дальнейшее развитие идеи об аналогии между двигателем Стирлинга и термоакустическим двигателем привело к пересмотру базовой концепции, связанной с формированием стоячей волны в резонаторе. В итоге были созданы резонаторы кольцевой формы, принцип работы которых основан на бегущей волне [9, 10].

Следует заметить, что вопросы теоретического анализа и математического моделирования, несмотря на понимание базовых принципов термоакустических эффектов и накопленный обширный экспериментальный опыт создания работоспособных конструкций, нельзя признать окончательно решенными. Разномаштабность происходящих процессов приводит либо к крайне упрощенной постановке, позволяющей описать объект «в целом», либо сфокусировать внимание на деталях механизма нестационарного теплообмена, но при этом оставить за рамками исследования процессы, происходящие вне пристеночного слоя теплообменного элемента.

Рассмотрим опыт с трубой Зондхаусса без использования регенератора. В определенном смысле такая постановка более сложная, так как наличие регенератора на некоторых режимах обеспечивает стабилизацию нестационарного течения газа. Воспользуемся результатами экспериментальной работы [11], которая возвращает нас к базовой постановке задачи о трубе Зондхаусса.

В работе [11] рассматривается плоский канал длиной L с квадратным сечением $d \times d$. Один конец канала закрыт, другой открыт, и газ в канале сообщается с окружающей средой. Внутри канала на расстоянии σ от закрытого конца расположен нагреватель; на расстоянии l ($l << \sigma$) от нагревателя находится охладитель. Нагреватель и охладитель имеют вид решеток, состоящих из равного числа N цилиндрических стержней одинакового радиуса a. Нагреватель имеет постоянную температуру T^+, а охладитель – T^-. Все стержни параллельны между собой. В работе экспериментально установлено, что порог возникновения автоколебаний в резонаторе есть функция двух параметров: разности температур и расстояния между теплообменными элементами. В качестве еще одного параметра выступает расположение теплообменных элементов относительно закрытого торца трубы.

При теоретическом анализе термоакустических автоколебаний основные затруднения вызваны сложностью математического описания механизмов обратной связи с учетом нелинейных свойств и необходимостью решать нелинейные уравнения в частных производных. Поэтому определенный прогресс в понимании закономерностей термоакустики обеспечивался линеаризацией системы дифференциальных уравнений тем или иным способом.

Заметим, что первые исследования строились в рамках одномерного приближения в нелинейной постановке. При этом трение и теплообмен были представлены замыкающими соотношениями, зависящими от режима течения. Однако такой подход оказался малоэффективным при описании периодических процессов из-за невозможности правильно отразить фазовые сдвиги сигнала в замыкающих соотношениях.

Позднее, на базе линеаризованной системы уравнений баланса массы, импульса и энергии в одномерном приближении, было сформулировано уравнение Ротта [12, 13]; существует программная версия решения этого уравнения: DeltaEC [14] (в бесплатном доступе). Границу применимости этой модели определяют трехпроцентной величиной отклонения давления от его базового значения. В литературе содержится большое количество примеров оценки работы того или иного устройства при помощи этой программы [15 –17]. Практика применения линейной теории дополнила представления о термоакустических колебаниях тем моментом, что при наличии источника и стока тепла, разнесенных в пространстве, для возбуждения колебаний необходимо превышение предельного значения градиента температуры [5].

В работе [18] был использован другой подход, на базе системы уравнений пограничного слоя. Это позволило при построении математической модели воспользоваться представле-

ниями о поведении функций по направлению к стенке и расширить информацию о возможных потерях акустической энергии. Учет потерь представлен в виде энергетического баланса, который в результате устанавливает не только пороговый уровень градиента температуры, когда возникают колебания газа, но и возможные значения характеристик бегущей или стоячей волны. Совокупность этих сведений позволила добиться большего соответствия между экспериментальными результатами и теоретическими оценками. Особенности решения задач, связанных с теплоподводом при горении, приведены в книге [19].

Однако ряд эффектов принципиально нельзя смоделировать в рамках линеаризованной теории. В первую очередь это эволюционный процесс возникновения колебаний. Линеаризованная теория способна описать только состояние уже установившихся колебаний.

Другим немаловажным моментом выступает турбулентность. Изменение направления движения газа приводит к тому, что модель турбулентности должна описывать явления перехода как при турбулизации течения, так и обратно. Процесс формирования турбулентных структур, их разрушение характеризуются масштабом времени релаксации, который никак не представлен в уравнении Ротта. Следует заметить, что проблема описания перехода в рамках моделей турбулентности далека от своего полного решения даже для так называемых канонических течений на пластине, в трубе или следе.

Наконец третий аспект – возникновение различных мод колебаний газодинамических функций. В общем случае они не описываются простейшими зависимостями в виде гармонических функций, являющихся решением линеаризованных уравнений. В частности, например, задача об обтекании цилиндра колеблющимся потоком строится на основании двух режимных параметров: числа Келигана – Карпентера (отношение гидродинамического масштаба к геометрическому масштабу – диаметру цилиндра) и числа Стокса (оценка толщины пограничного слоя в долях от геометрического масштаба). По общепринятой классификации на карте режимов выделяют до шести зон с совершенно разной структурой потока в окрестности цилиндра [20]. Наличие тандема из двух цилиндров дополняет картину еще одним параметром – расстоянием между цилиндрами. Это приводит к возникновению интерференционной картины, которая может сопровождаться как увеличением, так и уменьшением гидравлического сопротивления пары.

Разрешить многие из перечисленных проблем позволяет математическое моделирование через численное решение системы дифференциальных уравнений. Различные подходы к численному исследованию задачи рассматривались в ряде работ, например в [21 – 27].

Остановимся на некоторых исследованиях подробнее. В работе [21] продемонстрирована возможность получения режима автоколебаний в результате численного решения системы уравнений Навье – Стокса в плоской постановке. Из принятых авторами допущений следует обратить внимание на использование в расчетах нагревательных элементов в виде пластин нулевой толщины. В работе [22] приведенные результаты численного интегрирования моделируют работу части элементов двигателя. Задача решена в плоской постановке, исследован теплообмен на пластине в осциллирующем потоке, который вызван внешним возбуждением. В работе [24] были рассчитаны характеристики работы высокочастотного (300 Гц) двигателя с плоскими теплообменными элементами в двумерной постановке и предположении о турбулентном режиме течения. Замыкание математической модели делалось при помощи k-ε модели турбулентности. При этом была задана температура на стенке канала и на стеке, соединяющем теплообменные элементы. Авторы исследовали влияние длины резонатора и протяженности стека, соединяющего плоские теплообменные элементы, провели сопоставление данных с линейной теорией. Результаты численного моделирования продемонстрировали режим колебаний газодинамических функций, затухающих по амплитуде. В работе [26] был использован солвер LS-FLOW, разработанный Аэрокосмическим агентством Япо-

нии для исследования трехмерных сжимаемых течений в рамках системы уравнений Навье – Стокса. Расчет проводился на неструктурированной сетке в двумерной постановке. Было отмечено, что для возбуждения колебаний в системе потребовалось кратковременное внешнее воздействие на открытой границе расчетной области. Однако наблюдалось отклонение численного решения от линейной теории.

Подводя итог вышеизложенному, следует отметить, что математическое моделирование термоакустического самовозбуждения в рассматриваемой системе как результат численного интегрирования системы дифференциальных уравнений Навье – Стокса предъявляет повышенные требования ко всем аспектам вычислительного процесса. Для построения решения задачи по методу контрольного объема требуется уделять внимание выбору размера области, где определены разыскиваемые функции, формы элементов дискретизации расчетной области, способа аппроксимации функции на границе элемента, схемы интегрирования по времени. Во всех отмеченных работах расчеты проведены в двумерной постановке и не учитывают взаимодействие со стенкой трубы. Поэтому настоящая работа содержит решение двумерной задачи с учетом взаимодействия со стенкой трубы.

Постановка задачи и вычислительные аспекты

Решение задачи из работы [11] требует использования трех координатных направлений. Если заменить канал квадратного сечения цилиндрической трубой, а стержневые теплообменные элементы – фигурами в виде тора, то в постановке задачи, если предполагать однородность газодинамических функций в окружном направлении, возникнет осевая симметрия, позволяющая сократить количество пространственных координат до двух. Эта модификация геометрии, принципиально не затрагивающая рассматриваемое явление возбуждения термоакустических колебаний, позволит рассмотреть не только нестационарный теплообмен на поверхности теплообменных элементов, но и взаимодействие газа со стенкой трубы, исключаемое, как правило, из балансовых соотношений при переходе к двумерной постановке.

Для задачи, сформулированной в осесимметричной постановке, система уравнений Навье – Стокса будет состоять из четырех дифференциальных уравнений в частных производных:

баланса массы,

баланса энергии,

баланса количества движения, записанного в виде проекций на две оси – z и r.

Систему следует дополнить двумя уравнениями состояния:

термодинамическим (в форме уравнения Менделеева – Клапейрона),

калорическим, устанавливающим связь между внутренней энергией и температурой.

Схема расчетной области и пояснения к постановке задачи приведены на рис. 1, значения параметров, использованных в расчетах, сведены в таблицу.

Параметры заторможенных значений газа на открытом конце трубы: $P^0 = 0{,}1$ МПа, $T^0 = 300$ К. Температура поверхности охладителя $T = 300$ К. Приведенные количественные значения параметров задачи соответствуют выбранным размерам из работы [11]. Если следовать результатам этой работы для выбранного расстояния между теплообменными элементами, то режим самовозбуждения должен возникнуть при температуре поверхности нагревателя $T^+ = 850$ К и выше. Таким образом, серией расчетов с вариацией температуры нагревателя можно установить, что математическая модель в состоянии воспроизвести важные выводы экспериментального исследования.

Граничные условия на проницаемой границе расчетной области реализованы в упрощенной постановке. Во-первых, граница расчетной области совпадает со срезом трубы, что ис-

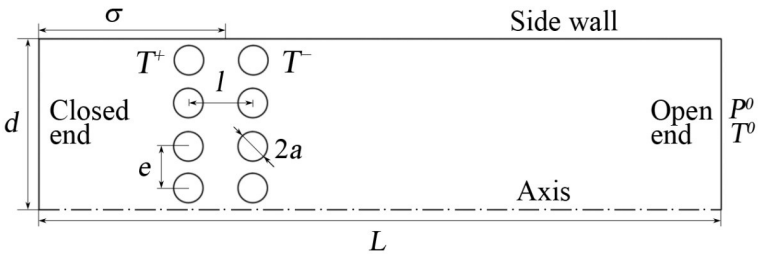


Рис. 1. Схема расчетной области (геометрические пропорции не соблюдены):
Side wall – боковая стенка трубы; Closed & Open ends – закрытый и открытый концы трубы;
Axis – ось симметрии; T^+, T^- – температуры нагревателя и охладителя; см. также таблицу

Таблица

Расчетные параметры задачи и их значения

Параметр	Обозначение	Единица измерения	Значение
Длина расчетной области	L	м	1,0
Радиус расчетной области	d	см	3,2
Радиус цилиндрических стержней	a	мм	1,0
Расстояние от решетки до закрытой стенки трубы	σ	см	20
Расстояние между рядами решеток	l	мм	6,0
Количество элементов в решетке	N	–	4
Шаг решетки	e	мм	4,0
Давление газа	P^0	МПа	0,1
Температура газа поверхности охладителя	 T^0 T	K	300

Примечания. 1. Приведенные значения соответствуют выбранным размерам из работы [11]. 2. Шаг решетки – это расстояние между центральными линиями образующих тора. 3. Сжимаемая среда – воздух.

ключает влияние на решение так называемой синтетической струи, возникающей вне резонатора [28]. Во-вторых, при поступлении газа в расчетную область статические значения газодинамических функций формируются по изоэнтропическим формулам; при истечении газа используется значение давления P^0.

Для поддержания термодинамического баланса в системе, боковая стенка трубы разделена на три зоны. На участках левее и правее теплообменного блока температуры стенки трубы составляют T^+ и T^- соответственно. Между этими зонами, на участке стенки трубы (его протяженность равна 1,0 см), центрированном относительно размещения теплообменных элементов, задано условие тепловой изоляции. Идентичное граничное условие задано на торце трубы.

На поверхности тороидальных элементов и стенках трубы задано условие прилипания.

В настоящей работе результаты получены при помощи пакета ANSYS FLUENT 2021R1, допускающего решение двумерной задачи в осесимметричной постановке. Для построения решения был использован солвер неявного алгоритма установления (Pressure Based) с опцией Coupled. Для формирования значения функций на контрольных поверхностях использованы реконструкции третьего порядка точности (Third-Order-MUSCL). Интегрирование по

времени выполнено по неявной схеме со вторым порядком точности. Дискретизация проведена на неструктурированной сетке, состоящей из четырехугольных элементов. Сетка обеспечивала сгущение ко всем непроницаемым границам расчетной области. Это позволило разрешить структуру температурного и динамического пограничного слоя на стенке трубы и на поверхностях теплообменных элементов.

Приведенные в работе результаты (см. далее) получены на сетке, насчитывающей порядка 40 тыс. элементов, при этом шаг интегрирования по времени составлял $\Delta t = 0{,}1$ мс.

Результаты расчетов и их обсуждение

Начальные данные. Расчет проведен при начальном состоянии газа, когда его давление в трубе составляло P^0, а его скорость была равна нулю. За начальное состояние температуры была принята ступенчатая зависимость от осевой координаты. Считалось, что слева и справа от решеток температура совпадает с температурой теплообменных элементов. На участке, где на стенке трубы задавалось условие тепловой изоляции, значение температуры определялось полусуммой выбранных уровней температуры. Значение плотности газа принималось в соответствии с уравнением состояния идеального газа. Этого локального состояния, неравновесного по температуре между теплообменными элементами и окружающим их воздухом, в принципе достаточно для возбуждения в системе собственных колебаний газового столба.

Возбуждение колебаний начинается с формирования температурного поля в окрестности теплообменных элементов. Процесс сопровождается возникновением градиентов давления и ненулевого значения вектора скорости. Волны давления и скорости характеризуются малой амплитудой и собственной частотой колебаний. Это состояние газа (колебания малой амплитуды) может быть довольно длительным и насчитывать не одну сотню периодов колебаний. В зависимости от величины градиента температуры, имеются возможности как установления нестационарного решения, так и выхода на стационарный режим теплообмена. Приведем результаты для четырех значений температуры нагревательного элемента (K): 600, 800, 900 и 1200.

На рис. 2 приведены временные зависимости средней по сечению скорости на открытом конце трубы и величины отклонения давления от начального значения на ее закрытом конце при различных значениях температуры нагревателя.

Как можно судить по приведенным данным, при температуре нагревателя $T^+ = 600$ K полное затухание возникших колебаний газодинамических функций происходит за отрезок времени менее 1 с.

При температуре нагревательного элемента $T^+ = 800$ K сценарий затухания собственных колебаний претерпевает изменения, а именно – процесс протекает гораздо медленнее. Для выбранного значения начального состояния функций переход к стационарному состоянию происходит за временной интервал, превышающий 4 с. Такое поведение функций можно объяснить тем, что выбранное сочетание параметров задачи приводит к режиму, который находится за пределами границы самовозбуждения колебаний. Неточное совпадение температуры нагревателя с ее значением, при котором автоколебания газодинамических функций наблюдаются в эксперименте, можно связать с изменением формы канала и упрощенным описанием поведения функций на открытом конце трубы.

При температуре нагревателя $T^+ = 900$ K пороговые значения градиента температуры превышены, поэтому возникает незатухающее осциллирующее течение газа. Процесс формирования установившегося режима течения в трубе состоит из нескольких стадий. Во-первых, можно выделить интервал времени с колебаниями малой амплитуды, когда нарастание величины сигнала происходит по линейному закону; во-вторых, имеется «лавинообразный»

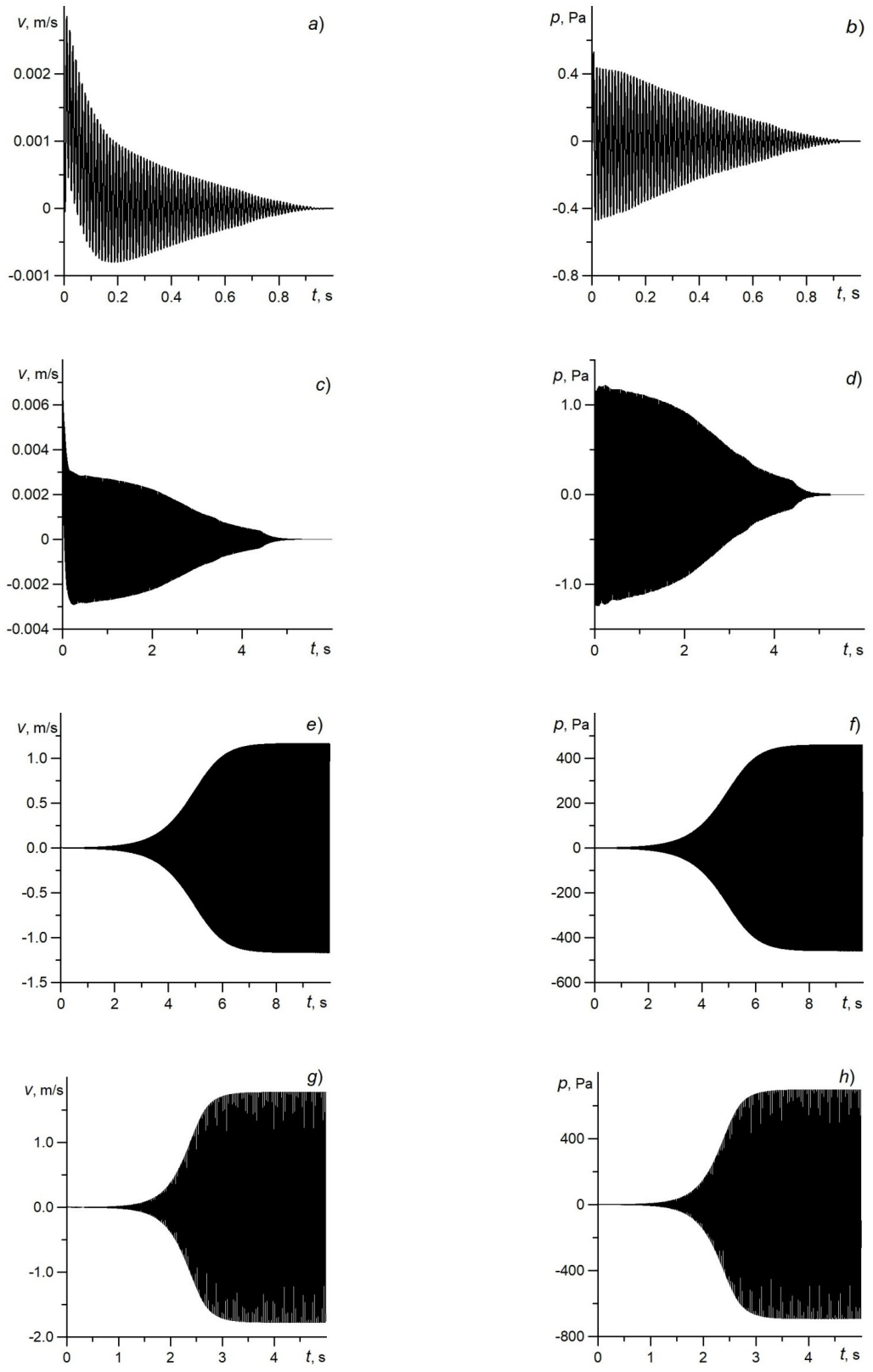


Рис. 2. Зависимости от времени осевой составляющей скорости, средней по сечению, на открытом конце трубы (*a*, *c*, *e*, *g*) и отклонения давления от начального уровня на закрытом конце трубы (*b*, *d*, *f*, *h*) при температуре нагревательного элемента T^{+} = 600 K (*a*, *b*), 800 K (*c*, *d*), 900 K (*e*, *f*) и 1200 K (*g*, *h*)

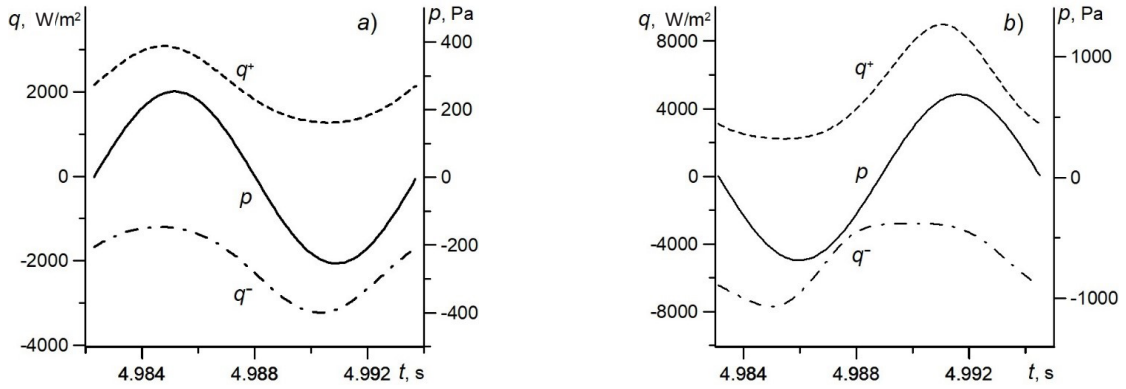


Рис. 3. Зависимости от времени за период колебаний величин давления p (сплошная линия), удельных тепловых потоков q^+ (штриховая линия) и q^- (штрихпунктирная линия) на нагревательном и охладительном элементах соответственно, для вариантов $T^+ = 900$ K (*a*) и 1200 K (*b*)

резонансный режим нарастания амплитуды колебаний, когда возникает положительная обратная связь между изменением давления и удельного теплового потока на теплообменных элементах; в-третьих, можно наблюдать выход на установившийся нестационарный режим осцилляций. Стабилизация амплитуды колебаний газодинамических функций (третья стадия) происходит за счет двух факторов. Это когда при осциллирующем течении совершается работа сил трения газа о стенку трубы и когда с открытого конца трубы происходит излучение, порождающее образование синтетической струи.

Режим течения в резонаторе при температуре нагревательного элемента $T^+ = 1200$ K характеризуется меньшим временем перехода к установившимся колебаниям. При этом амплитуда колебаний скорости на открытом конце трубы и отклонение давления от начального значения на ее тупиковом конце выше, чем для случая $T^+ = 900$ K. С точностью до выбранного шага интегрирования по времени частота собственных колебаний газового столба составляет $87{,}0 \pm 0{,}7$ Гц.

Остановимся подробнее на поведении функций со временем за один период колебаний для установившегося режима. На рис. 3 приведена зависимость среднего по всей поверхности решетки значения удельного теплового потока и отклонения давления от начального состояния за один период колебаний для вариантов $T^+ = 900$ и 1200 K.

За момент начала цикла принято нулевое значение отклонения давления от начального на теплообменных аппаратах. Поведение функции удельного теплового потока указывает на тот факт, что максимум теплоподвода синхронизирован с максимумом повышения давления на нагревательном элементе. В свою очередь, в решетке охлаждения максимальное значение теплоотвода также находится в окрестности минимума давления. Таким образом, на обоих теплообменных элементах реализуется ситуация, подпадающая под критерий Рэлея. Следует отметить, что по мере удаления от значений параметров, которые устанавливают границу возбуждения термоакустических колебаний, сигналы возрастают по амплитуде и утрачивают синусоидальную форму.

Заключение

В рамках численного интегрирования системы дифференциальных уравнений Навье – Стокса для сжимаемого газа получено решение задачи о самовозбуждении колебаний в конструкции, воспроизводящей эффект Зондхаусса. В зависимости от разности температур на теплообменных элементах реализуется либо режим с затуханием колебаний, либо устойчивый нестационарный режим осциллирующего течения газового столба в трубе, закрытого с

одного конца. Результат проведенного математического моделирования хорошо согласуется с экспериментальными данными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Sondhauss C.** Über die Schallschwingungen der Luft in erhitizten Glassrohen und gedeckten Pfeifen von ungleicher Weite // Pogg. Ann. Phys. und Chem. 1850. Band 79. S. 1–34.

2. **Дж.В. Стрэтт (Лорд Рэлей).** Теория звука. Т. 2. М.: Гостехиздат, 1955. 300 с.

3. **Putnam A.A., Dennis W.R.** A survey of organ-pipe oscillations in combustion systems // Journal of the Acoustical Society of America. 1956. Vol. 28. No. 2. Pp. 246–259.

4. **Feldman K.T.** Review of the literature on Sondhauss thermoacoustic phenomena // Journal of Sound and Vibration. 1968. Vol. 7. No. 1. Pp. 71–82.

5. **Swift G.W.** Thermoacoustics: a unifying perspective for some engines and refrigerators. 2nd edition. Heidelberg, Germany: Springer, 2017. 326 p.

6. **Arnott W.P., Bass H.E., Raspet R.** Specific acoustic impedance measurements of an air-filled thermoacoustic prime mover // Journal of the Acoustical Society of America. 1992. Vol. 92. No. 6. Pp. 3432–3434.

7. **Hariharan N.M., Sivashanmugam P., Kasthurirengan S.** Influence of operational and geometrical parameters on the performance of twin thermoacoustic prime mover // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2013. Vol. 64. September. Pp. 1183–1188.

8. **Sugita H., Matsubara Y., Kushino A., Ohnishi T., Kobayashi H., Dai W.** Experimental study on thermally actuated pressure wave generator for space cryocooler // Cryogenics. 2004. Vol. 44. No. 6–8. Pp. 431–437.

9. **Ceperley P.H.** A pistonless Stirling engine – The travelling-wave heat engine // Journal of the Acoustical Society of America. 1979. Vol. 66. No. 5. Pp. 1508–1513.

10. **Yazaki T., Iwata A., Maekawa T., Tominaga A.** Travelling-wave thermoacoustic engine in a looped tube // Physical Review Letters. 1998. Vol. 81. No. 15. Pp. 3128–3131.

11. **Katto Y., Takano K.** Study of the oscillation of a gas column caused by heat conduction in a tube // Bulletin of the ISME. 1977. Vol. 20. No. 147. Pp. 1169–1173.

12. **Rott N.** Damped and thermally driven acoustic oscillations in wide and narrow tubes // Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik. 1969. Vol. 20. No. 2. Pp. 230–243.

13. **Rott N.** Thermally driven acoustic oscillations, part III: Second-order heat flux // Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik. 1975. Vol. 26. No. 1. Pp. 43–49.

14. **Ward B., Clark J., Swift G.W.** Design environment for low-amplitude thermoacoustic energy conversion. DeltaEC Version 6.2 Users Guide. USA: Los Alamos National Laboratory, 2008.

15. **Yang R., Wang Y., Tan J., Luo J., Jin T.** Numerical and experimental study of a looped travelling-wave thermoacoustic electric generator for low-grade heat recovery // International Journal of Energy Research. 2019. Vol. 43. No. 11. Pp. 5735–5746.

16. **Kalra S., Desai K.P., Naik H.B., Atrey M.D.** Theoretical study on standing wave thermoacoustic engine // Physics Procedia. 2015. Vol. 67. Proceedings of the 25th International Cryogenic Engineering Conference and International Cryogenic Materials Conference, 2014. Pp. 456–461.

17. **Горшков И.Б., Петров В.В.** Численное моделирование кольцевого четырехступенчатого термоакустического двигателя с бегущей волной // Известия Саратовского ун-та. Новая серия. Серия Физика. 2018. Т. 18. № 4. С. 285–296.

18. **Галиуллин Р.Г., Ревва И.П., Халимов Г.Г.** Теория термических автоколебаний. Казань: Изд-во Казан. ун-та, 1982. 155 с.

19. **Ларионов В.М., Зарипов Р.Г.** Автоколебания газа в установках с горением. Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та, 2003. 227 с.

20. **Нуриев А.Н., Зайцева О.Н.** Решение задачи об осциллирующем движении цилиндра в вязкой жидкости в пакете OpenFOAM // Вестник Казанского технологического университета. 2013. № 8. С. 116–123.

21. **Jeffrey F.Z., Vipperman S., Schaefer L.A.** Advancing thermoacoustics through CFD simulation using FLUENT // Proceedings of the ASME 2008 International Mechanical Engineering Congress and Exposition. Vol. 8: Energy Systems: Analysis, Thermodynamics and Sustainability; Sustainable Products and Processes. Boston, Massachusetts, USA. October 31 – November 6, 2008. Pp. 101–110.

22. **Tasnim S.H., Fraser R.A.** Computation of the flow and thermal fields in a thermoacoustic refrigerator // International Communications in Heat and Mass Transfer. 2010. Vol. 37. No. 7. Pp. 748–755.

23. **Guoyao Yu., Dai W., Luo E.** CFD simulation of a 300 Hz thermoacoustic standing wave engine // Cryogenics. 2010. Vol. 50. No. 9. Pp. 615–622.

24. **Muralidharan H., Hariharan N.M., Perarasu V.T., Sivashanmugam P., Kasthurirengan S.** CFD simulation of thermoacoustic heat engine // Progress in Computational Fluid Dynamics. 2014. Vol. 14. No. 2. Pp. 131–137.

25. **Dar Ramdane M.Z., Khorsi A.** Numerical investigation of a standing-wave thermoacoustic device // Thermophysics and Aeromechanics. 2015. Vol. 22. No. 3. Pp. 313–318.

26. **Kuzuu K., Hasegawa S.** Numerical investigation of heated gas flow in a thermoacoustic device // Applied Thermal Engineering. 2017. Vol. 110. 5 January. Pp. 1283–1293.

27. **Hariharan N.M., Arun S., Sivashanmugam P., Kasthurirengan S.** CFD simulation on the performance of twin thermoacoustic prime mover for various resonator lengths and operating pressures // Heat Transfer – Asian Research. 2018. Vol. 47. No. 2. Pp. 337–346.

28. **Булович С.В.** Математическое моделирование течения газа в окрестности открытого торца трубы при колебаниях поршня на другом конце трубы по гармоническому закону на резонансной частоте // Журнал технической физики. 2017. Т. 87. № 11. С. 1632–1636.

Статья поступила в редакцию 07.05.2021, принята к публикации 21.06.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

БУЛОВИЧ Сергей Валерьевич – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

bulovic@yandex.ru

REFERENCES

1. **Sondhauss C.,** Über die Schallschwingungen der Luft in erhitizten Glassrohen und gedeckten Pfeifen von ungleicher Weite, Pogg. Ann. Phys. und Chem. 79 (1850) 1–34.

2. **Strutt J.W., Baron Rayleigh,** The theory of sound, Vol. 2, Macmillan and Co., London, 1878.

3. **Putnam A.A., Dennis W.R.,** A survey of organ-pipe oscillations in combustion systems, J. Acoust. Soc. Am. 28 (2) (1956) 246–259.

4. **Feldman K.T.,** Review of the literature on Sondhauss thermoacoustic phenomena, J. Sound Vib. 7 (1) (1968) 71–82.

5. **Swift G.W.,** Thermoacoustics: a unifying perspective for some engines and refrigerators, 2nd Ed., Springer, Heidelberg, Germany, 2017.

6. **Arnott W.P., Bass H.E., Raspet R.,** Specific acoustic impedance measurements of an air-filled thermoacoustic prime mover, J. Acoust. Soc. Am. 92 (6) (1992) 3432–3434.

7. **Hariharan N.M., Sivashanmugam P., Kasthurirengan S.,** Influence of operational and geometrical parameters on the performance of twin thermoacoustic prime mover, Int. J. Heat Mass Transfer. 64 (September) (2013) 1183–1188.

8. **Sugita H., Matsubara Y., Kushino A., et al.,** Experimental study on thermally actuated pressure wave generator for space cryocooler, Cryogenics. 44 (6–8) (2004) 431–437.

9. **Ceperley P.H.,** A pistonless Stirling engine – The travelling-wave heat engine, J. Acoust. Soc. Am. 66 (5) (1979) 1508–1513.

10. **Yazaki T., Iwata A., Maekawa T., Tominaga A.,** Travelling-wave thermoacoustic engine in a looped tube, Phys. Rev. Lett. 81 (15) (1998) 3128–3131.

11. **Katto Y., Takano K.,** Study of the oscillation of a gas column caused by heat conduction in a tube. Bulletin of ISME. 20 (147) (1977) 1169–1173.

12. **Rott N.,** Damped and thermally driven acoustic oscillations in wide and narrow tubes, Z. Angew. Math. Phys. 20 (2) (1969) 230–243.

13. **Rott N.,** Thermally driven acoustic oscillations, part III: Second-order heat flux, Z. Angew. Math. Phys. 26 (1) (1975) 43–49.

14. **Ward B., Clark J., Swift G.W.,** Design environment for low-amplitude thermoacoustic energy conversion. DeltaEC, Version 6.2, Users Guide, Los Alamos National Laboratory, USA, 2008.

15. **Yang R., Wang Y., Tan J., et al.,** Numerical and experimental study of a looped travelling-wave thermoacoustic electric generator for low-grade heat recovery, Int. J. Energy Res. 43 (11) (2019) 5735–5746.

16. **Kalra S., Desai K.P., Naik H.B., Atrey M.D.,** Theoretical study on standing wave thermoacoustic engine, Physics Procedia, 67 (Proc. of the 25th Intern. Cryog. Eng. Conf. and Intern. Cryog. Mater. Conf. 2014) (2015) 456–461.

17. **Gorshkov I.B., Petrov V.V.,** Numerical simulation of a looped tube 4-stage traveling-wave thermoacoustic engine, Izvestiya of Sarat. Univ. Physics. 18 (4) (2018) 285–296 (in Russian).

18. **Galiullin R.G., Revva I.P., Khalimov G.G.,** Teoriya termicheskikh avtokolebaniy [Thermal self-oscillations theory], Kazan University Publishing, Kazan, 1982 (in Russian).

19. **Larionov V.M., Zaripov R.G.,** Avtokolebaniya gaza v ustanovkakh s goreniyem [Gas self-oscillations in the plants with combustion], Kazan State Techn. University Publishing, Kazan, 2003 (in Russian).

20. **Nuriyev A.N., Zaytseva O.N.,** Resheniye zadachi ob ostsilliruyushchem dvizhenii tsilindra v vyazkoy zhidkosti v pakete OpenFOAM [Solving the problem on the oscillating motion of a cylinder in the viscous fluid using the OpenFOAM packet], Vestnik Kazanskogo Tekhnologicheskogo Universiteta. 16 (8) (2013) 116–123 (in Russian).

21. **Jeffrey F.Z., Vipperman S., Schaefer L.A.,** Advancing thermoacoustics through CFD simulation using FLUENT, Proc. ASME 2008 Intern. Mech. Eng. Congr. and Expos. Vol. 8 (Energy Systems: Analysis, Thermodynamics and Sustainability; Sustainable Products and Processes) Boston, Massachusetts, USA. Oct. 31–Nov. 6 (2008) 101–110.

22. **Tasnim S.H., Fraser R.A.,** Computation of the flow and thermal fields in a thermoacoustic refrigerator, Intern. Commun. Heat Mass Transf. 37 (7) (2010) 748–755.

23. **Guoyao Yu., Dai W., Luo E.,** CFD simulation of a 300 Hz thermoacoustic standing wave engine, Cryogenics. 50 (9) (2010) 615–622.

24. **Muralidharan H., Hariharan N.M., Perarasu V.T., et al.,** CFD simulation of thermoacoustic heat engine, Progress in Computational Fluid Dynamics. 14 (2) (2014) 131–137.

25. **Dar Ramdanel M.Z., Khorsi A.,** Numerical investigation of a standing-wave thermoacoustic device, Thermophysics and Aeromechanics. 22 (3) (2015) 313–318.

26. **Kuzuu K., Hasegawa S.,** Numerical investigation of heated gas flow in a thermoacoustic device, Appl. Therm. Eng. 110 (5 January) (2017) 1283–1293.

27. **Hariharan N.M., Arun S., Sivashanmugam P., Kasthurirengan S.,** CFD simulation on the performance of twin thermoacoustic prime mover for various resonator lengths and operating pressures, Heat Transfer – Asian Res. 47 (2) (2018) 337–346.

28. **Bulovich S.V.,** Mathematical simulation of a gas flow in the vicinity of the open end of a tube for harmonic oscillations of a piston at the resonance frequency at the other end of the tube, Technical Physics. 62 (11) (2017) 1634–1638.

Received 07.05.2021, accepted 21.06.2021.

THE AUTHOR

BULOVICH Sergei V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
bulovic@yandex.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14304
УДК 004.94

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛЗУЧЕСТИ И ПЛАСТИЧНОСТИ НА ПРОЦЕСС ИСКРОВОГО ПЛАЗМЕННОГО СПЕКАНИЯ

В.А. Борисенко[1], **А.С. Семенов**[1], **Т. Вальмерспергер**[2]

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация;

[2] Технический университет Дрездена, г. Дрезден, Германия

На основе экспериментальных данных в работе промоделирован процесс искрового плазменного спекания (ИПС) металлических частиц методом конечных элементов в термоэлектромеханической постановке с учетом влияния температуры на параметры материалов (никеля и меди). Сравнение результатов моделирования с экспериментом позволило создать вычислительную модель процесса ИПС, удобную для оценки влияния параметров ползучести и пластичности на размер межчастичной шейки, образующейся при проведении ИПС. Установлено, что для высоких температур эффект ползучести в несколько раз превосходит влияние пластичности на процесс образования шейки спекания. При этом изменение параметров ползучести при моделировании также активно влияет на формирование шейки.

Ключевые слова: искровое плазменное спекание, металл, конечно-элементное моделирование, пластичность, ползучесть, связанные поля

Ссылка при цитировании: Борисенко В.А., Семенов А.С., Вальмерспергер Т. Анализ влияния характеристик ползучести и пластичности на процесс искрового плазменного спекания // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 49–62. DOI: 10.18721/JPM.14304

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

AN INFLUENCE ANALYSIS OF CREEP AND PLASTICITY CHARACTERISTICS ON THE SPARK PLASMA SINTERING PROCESS

V.A. Borisenko[1], **A.S. Semenov**[1], **T. Wallmersperger**[2]

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

[2] Dresden University of Technology, Dresden, Germany

In the paper, the spark plasma sintering (SPS) process for metal particles has been simulated based on experimental data and using the finite element method in the thermo-electro-mechanical formulation with taking into account the temperature influence on parameters of materials (nickel and copper). A comparison of obtained results with experimental data made it possible to create a computational model of the SPS process, the model being convenient to evaluate the influence of creep and plasticity parameters on the size of the interparticle neck forming in SPS. It was found that the creep effect significantly dominated over the plasticity influence on the process of forming the sintering neck at high temperatures. In this case, the variation of creep parameters in simulation also actively affects the formation of the neck.

Keywords: spark plasma sintering, metal, finite-element modelling, plasticity, creep, coupled fields

Citation: Borisenko V.A., Semenov A.S., Wallmersperger T., An influence analysis of creep and plasticity characteristics on the spark plasma sintering process, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 49–62. DOI: 10.18721/JPM.14304

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Последнее время активно ведутся экспериментальные и теоретические исследования [1, 2], а также моделирование [3 – 5] процессов спекания и уплотнения изделий порошковой металлургии для улучшения их свойств. Технология получения металлических порошков и изготовления изделий из них обладает рядом достоинств [6, 7], например, дает возможность создавать материалы, которые трудно или невозможно получать другими методами; позволяет экономить металл и значительно снижать себестоимость продукции. Кроме того, при использовании чистых исходных порошков можно получать спеченные материалы с меньшим содержанием примесей и с более точным соответствием заданному составу, по сравнению с обычными литыми сплавами. При одинаковых составе и плотности спеченные материалы обладают лучшими механическими свойствами, по сравнению с плавленными, в частности, меньше сказывается неблагоприятное влияние предпочтительной ориентации зерен кристаллической решетки металла (текстура), характерной для литых аналогов. Размеры и форму структурных элементов спеченных материалов легче регулировать, и главное, можно получать такие типы взаимного расположения и формы зерен, которые недостижимы для плавленого металла.

Благодаря этим структурным особенностям, спеченные металлы более термостойки, лучше переносят воздействие циклических колебаний температуры и напряжений, а также ядерного излучения, что очень важно для материалов новой техники.

Одним из эффективных методов получения бездефектных заготовок из порошковых материалов является искровое плазменное спекание (ИПС, *англ.* SPS/FAST – Spark Plasma Sintering / Field Assisted Sintering Technology), представляющее собой сочетание прессования с интенсивным электрическим разрядом, что открывает возможности получения компактного материала за очень короткое время. В последнее время наблюдается рост количества публикаций, посвященных исследованию процесса искрового плазменного спекания (см., например, статьи [11 – 13]). Особенности этого метода консолидации порошковых материалов состоят в том, что нагрев вещества происходит путем пропускания через него импульсов электрического тока. Это позволяет существенно снизить температуру и сократить время спекания, по сравнению с обычным высокотемпературным спеканием и горячим прессованием.

Сложности, возникающие при моделировании рассматриваемого класса задач, связаны с проявлением различных механизмов спекания (пластичность, ползучесть, термомиграция и др.), а также ярко выраженной многоэтапностью процесса спекания: рост контактного перешейка, формирование замкнутых пор, их зарастание. Кроме того, имеет место взаимодействие полей различной природы: электрического, теплового, химического и механического. Нетривиальная зависимость электрических и механических констант от температуры материала может вызывать при моделировании проблемы со сходимостью решения. Также на эту сходимость сильно влияют параметры контакта, а именно тепло- и электропроводность зоны контактирующих элементов. Моделирование методом конечных элементов (МКЭ) служит ценным инструментом для лучшего понимания процесса. Ранее моделирование МКЭ

в основном использовалось для изучения макроскопических градиентов температуры в образцах во время быстрого процесса [14 – 16], однако в последнее время все больше работ [4, 5] посвящаются КЭ-моделированию деформирования частиц, а также микроскопического распределения тока и температуры при контакте частиц в качестве простейшего представительного объема порошка.

В работе [5] показано, что при моделировании таких процессов использование упругих и вязкоупругих моделей спекаемого материала при моделировании не приводит к хорошей корреляции с экспериментальными данными. При этом наилучшая точность была получена за счет одновременного учета как вязкого, так и пластического эффектов.

Цель настоящей работы – анализ возможностей моделирования методом МКЭ процесса искрового плазменного спекания путем сопоставления результатов с экспериментальными данными.

Для решения поставленной задачи было необходимо проанализировать влияние ряда ключевых факторов и, прежде всего, ползучести, на диаметр межчастичной шейки, образующейся в процессе изучаемой технологии.

Экспериментальная установка и математическая модель

В рассматриваемых экспериментах, выполненных в Дрезденском техническом университете (Германия) [4, 5], используются шарики, изготовленные из технически чистого никеля диаметром 1 мм. Для удаления оксидов из никелевых сфер шарики помещали в раствор лимонной кислоты на несколько часов и прополаскивали дистиллированной водой и этанолом перед тем, как вводить их в установку. Для исследования начальных стадий формирования контакта при искровом плазменном спекании была разработана и создана специальная экспериментальная установка. Ее схема представлена на рис. 1.

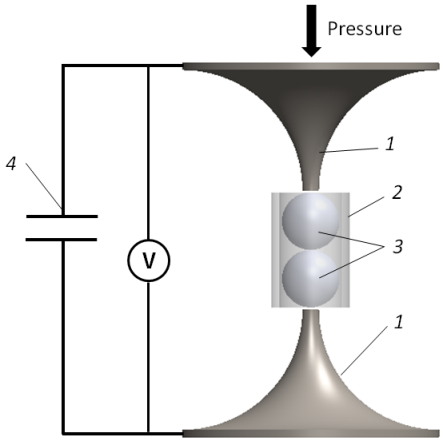


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: *1* – медные стержни, *2* – толстостенная стеклянная трубка, *3* – никелевые шарики, *4* – электролитические конденсаторы

Медные стержни *1* диаметром 1 мм расположены в верхней и нижней частях установки. Толстостенная стеклянная трубка *2* с миллиметровым внутренним диаметром надета на нижний стержень и ограничивает выпадение шариков *3*. Два никелевых шарика помещены между стержнями оснастки. Механическая нагрузка (Pressure) прикладывается к верхнему стержню с помощью грузика массой 1 кг, который обеспечивает осевое сжимающее усилие 12,5 МПа в поперечном сечении медных стержней оснастки и, соответственно, в экваториальном сечении шариков. К верхнему стержню подключен электрод, содержащий два параллельно соединенных электролитических конденсатора *4*. Вторые электроды конденсатора соединены с нижним стержнем через выпрямитель тока, который служит переключателем, контролируемым микроконтроллером. Конденсаторы заряжались на напряжение от 1 до 8 В (величина зависела от условий эксперимента).

Математическая модель. Рассматривается связанная термоэлектромеханическая осесимметричная задача для анализа деформаций, возникающих напряжений, а также эволюции температурного поля и контактного сопротивления. При моделировании механической со-

ставляющей задачи используются упругие, пластические и вязкие параметры материала. За отсутствием достоверных кривых пластичности никеля при высоких температурах, для моделирования пластических деформаций использовалась модель пластичности с линейным упрочнением. В качестве условия начала пластичности, в силу изотропии материала, рассматривалось условие Мизеса. Для нестационарных процессов изменения теплового поля использовалось уравнение теплового баланса с учетом закона Фурье.

В совокупности система уравнений связанной термоэлектромеханической начально-краевой задачи для рассматриваемых условий имеет вид

$$\begin{cases} \rho(T)C(T)\dfrac{\partial T}{\partial t} - \nabla\cdot\left(\lambda(T)\,\mathbf{E}\cdot\nabla T\right) - q_v = 0, \\ \nabla\cdot\left({}^4\mathbf{C}(T)\cdot\cdot\left((\nabla\mathbf{u})^s - \boldsymbol{\alpha}(T)\left(T - T_{ref}\right) - \boldsymbol{\varepsilon}^P - \boldsymbol{\varepsilon}^c\right)\right) = 0, \\ \nabla\cdot\left(\boldsymbol{\varepsilon}_n\cdot\nabla\dfrac{\partial\varphi}{\partial t}\right) + \nabla\cdot\left[\boldsymbol{\sigma}(T)\cdot\nabla\varphi\right] = 0, \end{cases} \tag{1}$$

где λ – коэффициент теплопроводности, T – температура, T_{ref} – начальная температура, $\boldsymbol{\varepsilon}^P$ – тензор пластических деформаций, $\boldsymbol{\varepsilon}^c$ – тензор деформаций ползучести, ρ – плотность, C – удельная теплоемкость, q_v – объемный подвод тепла, φ – скалярный электрический потенциал, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор электрической проводимости, $\boldsymbol{\varepsilon}_n$ – тензор диэлектрической проницаемости среды, $\mathbf{f}_v$ – вектор объемных сил, $\mathbf{u}$ – вектор перемещений, ${}^4\mathbf{C}$ – тензор жесткости, $\boldsymbol{\alpha}$ – тензор температурных коэффициентов линейного расширения.

В рассматриваемой постановке задачи, в уравнении равновесия системы (1) отсутствуют объемные силы и инерционные слагаемые. Значения упругих, тепловых и электрических констант материала в зависимости от температуры приведены в табл. 1 для никеля и меди (взяты из статей [4, 5]); размерности приведенных констант соответствуют определенной системе единиц: миллиметры, гигаграммы, секунды (мм, Гг, с). В табл. 1 указаны также величины предела текучести σ_y и модуля пластичности H_0, соответствующие модели пластичности с линейным упрочнением. Согласно приведенным данным, характеристики материалов значительно зависят от температуры. При ИПС пропускание тока вызывает нагрев материала, что влечет за собой изменение констант материала, например удельного сопротивления. Изменение последнего приводит к изменению тока и плотности выделяющегося тепла на рассматриваемом участке. Данная цепочка показывает, как взаимосвязаны константы материала с температурным полем, и как, в свою очередь, температурное поле зависит от данных констант.

Для учета ползучести использовался закон Нортона на основе гипотезы подобия. В общем виде закон Нортона записывается как

$$\boldsymbol{\varepsilon}^c = A\sigma_i^{\,n-1}\mathbf{S}\cdot t\cdot\exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right), \tag{2}$$

где ΔH – энергия активации ползучести; R – постоянная Больцмана; t – время; T – температура; σ – напряжение; n, A – степенной и линейный показатели ползучести; $\mathbf{S}$ – девиатор тензора напряжений.

Значения констант ползучести были взяты из монографии [17]:

$A = 80{,}4$ МПа$^{-4{,}6}$/с, $n = 4{,}6$, $\Delta H = 284$ кДж – для никеля;

Таблица 1

Значения упругих, тепловых и электрических констант никеля и меди в зависимости от температуры [4, 5]

T, K (°C)	300 (27)	500 (227)	700 (427)	900 (627)	1100 (827)	1400 (1127)	1728 (1455)
Значения для никеля							
ρ, Гг/мм³	8,90e–12	8,82e–12	8,74e–12	8,65e–12	8,55e–12	8,40e–12	8,10e–12
C_p, Дж/(Гг·К)	4,44e+8	5,24e+8	5,24e+8	5,43e+8	5,77e+8	6,09e+8	6,25e+8
λ, Вт/(мм·К)	0,0904	0,0721	0,0609	0,0662	0,0735	0,0767	0,0785
ρ_e, Ом·мм	7,37e–5	18,0e–5	32,0e–5	38,7e–5	44,5e–5	52,4e–5	59,0e–5
α, 1/К	13e–6	14e–6	15e–6	16.5e–6	17e–6	19e–6	13e–6
E, ГПа	218	199	195	192	171	141	–
ν	0,28	0,28	0,28	0,30	0,31	0,34	–
σ_y, МПа	185	180	140	80	50	–	–
H_0, МПа	1800	1400	1100	1000	750	–	–
Значения для меди							
ρ, Гг/мм³	8,93e–12	8,63e–12	8,73e–12	8,62e–12	8,51e–12	8,39e–12	7,96e–12
C_p, Дж/(Гг·К)	3,85e+8	4,08e+8	4,25e+8	4,41e+8	4,64e+8	5,07e+8	5,14e+8
λ, Вт/(мм·К)	0,402	0,385	0,370	0,355	0,338	0,322	0,184
ρ_e, Ом·мм	1,73e–5	3,09e–5	4,51e–5	6,04e–5	7,72e–5	9,59e–5	23,4e–5
α, 1/К	16e–6	18e–6	19e–6	20e–6	24e–6	29e–6	–
E, ГПа	130	115	103	89,7	76,8	63,7	–
ν	0,35	0,35	0,35	0,36	0,38	0, 40	–
σ_y, МПа	220	190	100	40	–	–	–
H_0, МПа	500	400	200	200	–	–	–

Обозначения: T – температура, ρ – плотность, C_p – теплоемкость при постоянном давлении, λ – теплопроводность, ρ_e – удельное сопротивление, α – коэффициент теплового расширения, E – модуль Юнга, ν – коэффициент Пуассона, σ_y – предел текучести, H_0 – модуль пластичности.

$A = 2{,}45$ МПа$^{-4{,}8}$/с, $n = 4{,}8$, $\Delta H = 197$ кДж – для меди.

Поскольку задача симметрична относительно плоскости соприкосновения шариков, в КЭ-расчете целесообразно рассматривать только верхнюю часть конструкции (см. рис. 1), на рис. 2, *a*,*b* она представлена в горизонтальном положении. Вид КЭ-модели показан на рис. 2,*a*. Она содержит 1524 элемента, 4491 узла. Модель выполнена в КЭ пакета ANSYS с использованием элементов типа PLANE 223 в термоэлектромеханической постановке.

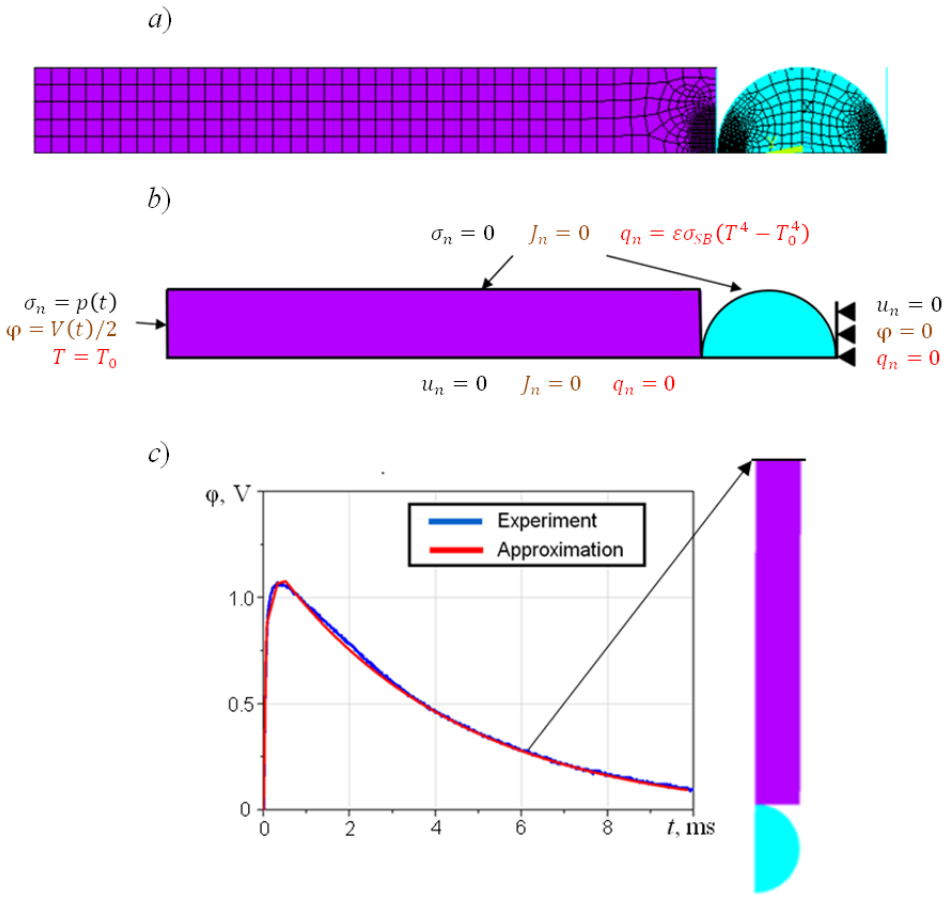


Рис. 2. Схематическое представление КЭ-модели процесса искрового плазменного спекания медного стержня (показан фиолетовым цветом) и никелевого шарика (голубым цветом): *a* – разбиение объектов на конечные элементы, *b* – иллюстрация граничных условий постановки задачи, *c* – график электрического потенциала, прикладываемого к верхней границе стержня

Контакт между шариками в данной симметричной постановке моделируется как контакт между верхним шариком и абсолютно жесткой плоскостью. При наложении граничных условий в данной задаче, следует учитывать экспериментальную процедуру, поэтому они должны иметь механический, электрический и тепловой характер. Механическая составляющая должна отражать ограничение по перемещениям и тот факт, что давление прикладывается к верхнему медному стержню. В симметричной постановке задачи налагалось ограничение на перемещения контактной поверхности. Электрическая составляющая учитывала разность потенциалов, прикладываемую к электродам испытательной конструкции. Функция потенциала от времени была принята равной половине напряжения между обкладками конденсатора, изменяющегося с течением времени. Для КЭ-расчета была произведена комбинация экспоненциальной кривой и ее кусочно-линейной аппроксимации по точкам (рис. 2,*c*).

На свободную поверхность шарика и стержня налагались граничные условия: нулевого нормального напряжения и электрического тока ($\sigma_n = 0, J_n = 0$), а также теплового излучения по закону Стефана – Больцмана (материал шарика был принят абсолютно черным телом со степенью черноты $\varepsilon = 1$): $q_n = \varepsilon \cdot \sigma_{SB} \cdot \left(T^4 - T_0^4\right)$. На границу осевой симметрии накладывались ограничения по радиальным компонентам перемещения, электрического тока и теплового потока: $u_n = 0, J_n = 0, q_n = 0$. На границу контакта шариков накладывались граничные условия нулевого перемещения, потенциала и теплового потока: $u_n = 0, \varphi = 0, q_n = 0$. На верхнюю границу стержня накладывались граничные условия: давления от времени – $\sigma_n = p(t)$,

потенциала от времени – $\varphi = V(t)/2$ и начальной температуры – $T = T_0$. Общий вид граничных условий показан на рис. 2,*b*.

При моделировании контактного взаимодействия использовался метод штрафных функций. При этом задавались следующие значения параметров:

коэффициент нормальной контактной жесткости – 1,0;

коэффициент допуска на проникание – 0,1;

тепловая контактная проводимость – 1 кВт/К;

электрическая контактная проводимость – 1 МСм.

Расчетные результаты и их обсуждение

Для оценки влияния параметров текучести на результаты ИПС была выполнена серия расчетов методом конечных элементов. Виртуальные эксперименты отличались друг от друга начальным зарядом конденсатора и, соответственно, зависимостью проходящего тока от времени. Было выбрано три случая начального напряжения конденсатора до начала процесса ИПС: 2, 3 и 5 В. Входным данным для математической модели являлась зависимость напряжения на установке от времени, регистрируемая в реальном эксперименте. Помимо изменения начального напряжения на обкладках конденсатора, варьировались параметры ползучести, а именно – ее степенного показателя n и энергии ее активации ΔH.

В ходе вычислительного эксперимента анализировались результаты, полученные только за первые 10 мс процесса, так как к концу этого интервала времени главные изменения теплового и электрического полей в основном заканчивались, и наблюдался выход этого процесса на устойчивое поведение.

Чтобы оценить влияние ползучести на температуру межчастичной шейки при спекании, задача решалась в двух термоэлектромеханических постановках: без учета ползучести и с ее учетом. Для верификации были использованы результаты работы [4], в которой рассматривалась КЭ-модель в термоэлектрической постановке без учета механических деформаций. В указанной модели радиус контакта шейки задавался по результатам эксперимента и не изменялся на протяжении всего расчета.

Далее приведены графики зависимости температуры материала шейки от времени при спекании для трех экспериментов, различающихся начальным напряжением на обкладках конденсатора: 2, 3 и 5 В (рис. 3). Видно, что при начальном напряжении на обкладках конденсатора 2 В учет ползучести не оказывает влияния на изменение температуры.

В дополнение к этому было проведено сравнение диаметров шейки спекания для расчетных вариантов, учитывающих и не учитывающих ползучесть ее материала, в случаях с разным начальным напряжением на обкладках конденсатора (табл. 2). В математической модели за диаметр шейки принимался максимальный диаметр контакта между сферическими частицами.

Анализ данных табл. 2 приводит к заключению, что для высоких значений начального напряжения на обкладках конденсатора (3 и 5 В) учет ползучести позволяет уточнить диаметр шейки и приблизиться к экспериментальным данным, тогда как величина ползучести практически не влияет на рост шейки при низкой температуре.

При этом влияние ползучести при высоком значении температуры обеспечивает большую область контакта между частицами, а, следовательно, пиковая температура получается ниже. Такой результат согласуется с зависимостями, показанными на рис. 4.

Существенные различия между результатами моделирования и экспериментальными данными можно объяснить усилением влияния других факторов формирования межчастичной шейки, например, явлениями поверхностной и зернограничной диффузии, которые могут развиваться при высоких напряжениях конденсатора, а следовательно, при

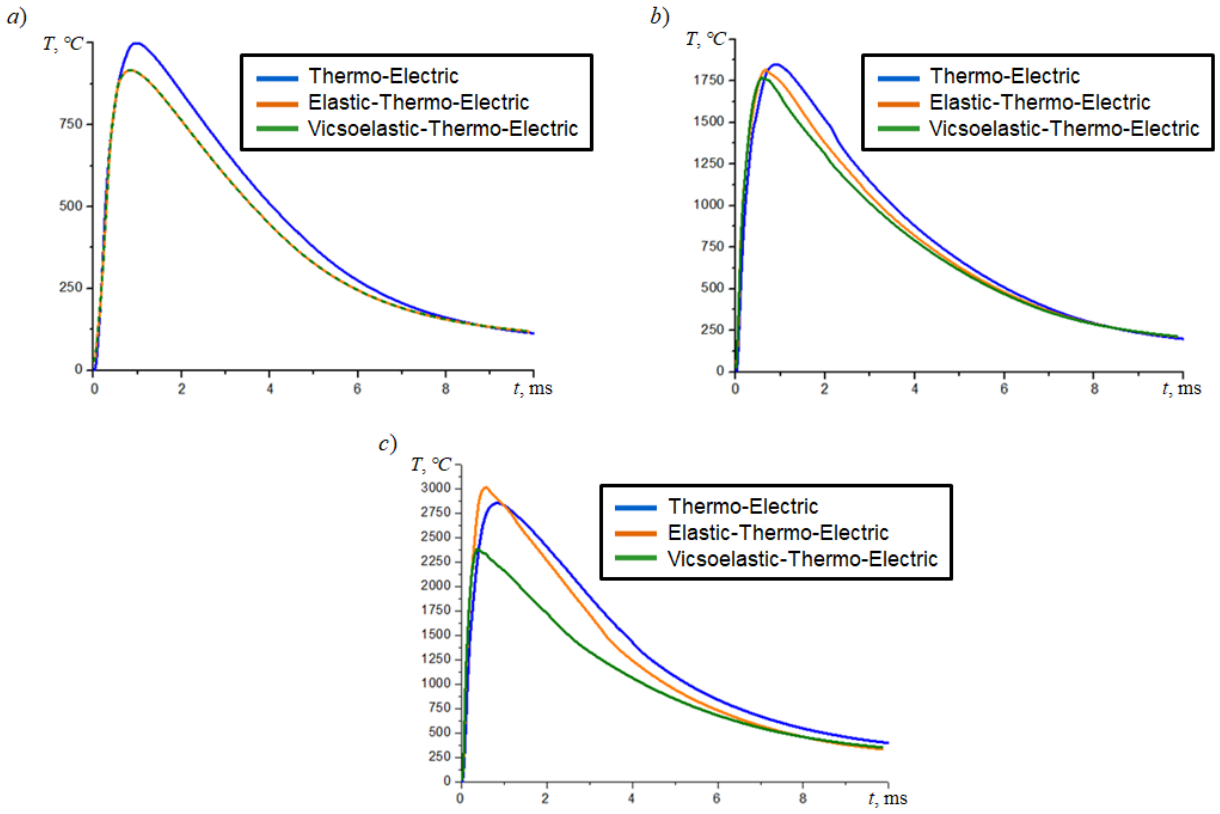


Рис. 3. Сравнение температурной динамики в межчастичной шейке при начальных напряжениях на обкладках конденсатора 2 В (*a*) 3 В (*b*) и 5 В (*c*), полученной в двух термоэлектромеханических постановках и сопоставленной с термоэлектрической постановкой (синие кривые) [4]

Таблица 2

Сравнение значений диаметра межчастичной шейки искрового плазменного спекания, полученных экспериментально и методом КЭМ

Метод	Диаметр шейки, мкм			Отклонение, %		
	2 В $T = 258$ K	3 В	5 В	2 В $T = 258$ K	3 В	5 В
		$T = 267$ K			$T = 267$ K	
Эксперимент	148	171	293	–		
КЭМ в упругой постановке	147	158	213	–0,7	–7,6	–27
КЭМ с учетом ползучести	147	164	227	–0,7	–4,1	–23

Примечания. 1. Представлены данные для трех значений начального напряжения на обкладках конденсатора и двух значений температуры. 2. Показаны отклонения расчетных результатов от эксперимента.

большем нагреве. К сожалению, на сегодня такие эффекты не реализованы в КЭ-пакете ANSYS.

Чтобы оценить влияние механизмов образования шейки, нами была рассмотрена зависимость пластических и ползучих деформаций от задаваемого напряжения на обкладках конденсатора (рис. 5). Анализ построенных зависимостей показывает, что при низких напряжениях конденсатора до разряда (что эквивалентно меньшему току, протекающему через

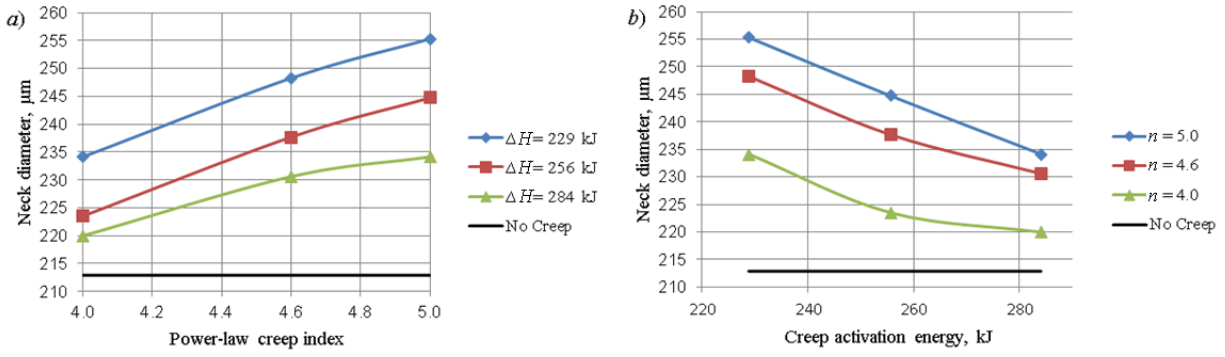


Рис. 4. Зависимости диаметра шейки от степенного показателя ползучести n (a) и энергии активации ползучести ΔH (b)

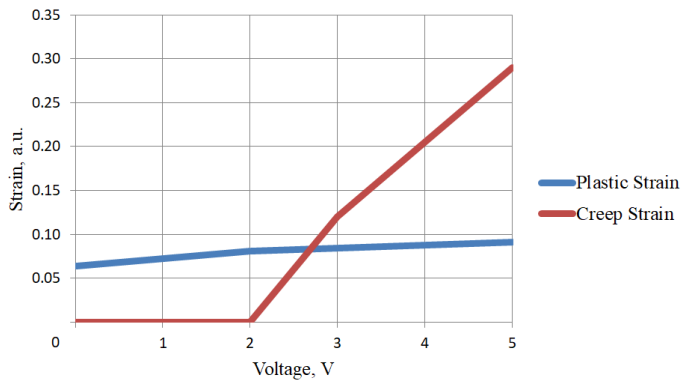


Рис. 5. Зависимости уровней пластических и ползучих деформаций в межчастичной шейке ИПС от напряжения на обкладках конденсатора

систему) основным механизмом формирования межчастичной шейки выступает пластичность, тогда как при более высоких напряжениях главным фактором влияния оказывается ползучесть.

В связи с существенным влиянием эффекта ползучести на процессы, происходящие при высоких значениях начального напряжения V на обкладках конденсатора, была проведена оценка влияния параметров закона ползучести Нортона на получаемый диаметр шейки спекания для одного из значений $V = 5$ В. Для этого был выбран следующий набор параметров закона Нортона для ползучести:

для степенного показателя ползучести n, помимо табличного значения $n = 4{,}6$ [17], брались значения $n = 5$ и 4, соответствующие отклонениям на +9 и –13%.

для энергии активации ползучести ΔH, помимо табличного значения $\Delta H = 284$ кДж [17], рассматривались значения ΔH =255,6 и 228,9 кДж, соответствующие отклонениям на 10 и 20 % от исходного табличного значения.

Зависимости диаметра шейки от степенного показателя ползучести n и энергии активации ползучести ΔH показаны на рис. 4.

Помимо вышеизложенного, было оценено влияние предела текучести на получаемый размер шейки при заданных табличных значениях параметров ползучести $n = 4{,}6$ и $\Delta H =$ $= 284$ кДж [17]. Были взяты следующие значения указанного предела (в МПа): 160, 180, 200, 220 и 240. Полученная зависимость диаметра шейки спекания от предела текучести приведе-

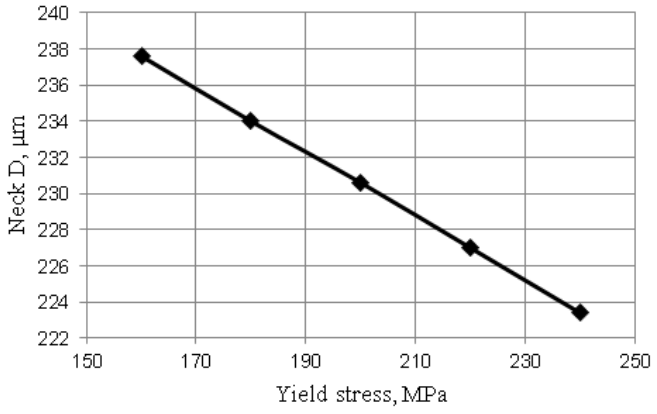


Рис. 6. Зависимость диаметра шейки спекания от предела текучести материала шарика

на на рис. 6. Видно, что характер построенной зависимости при заданных значениях параметров фактически является линейным.

Установлено, что увеличение степенного показателя на 9 % вызывает рост диаметра шейки на 3 %, а учет вклада деформаций ползучести – на 50 %. При этом его уменьшение на 13 % приводит к снижению диаметра шейки на 3,1 %. Далее, уменьшение энергии активации ползучести ΔH на 10 % приводит к увеличению диаметра шейки на 5 %, а учет вклада деформаций ползучести – на 75 %; уменьшение ΔH на 20 %приводит к увеличению диаметра шейки на 10 %, а учет вклада деформаций ползучести – на 150 %. Кроме того, увеличение предела текучести на 20 % приводит к уменьшению диаметра шейки на 3 %.

Представленные зависимости подтверждают наши выводы о преобладающем вкладе в процесс ИПС ползучих деформаций, по сравнению с влиянием деформаций пластичности.

Заключение

На основании полученных результатов можно утверждать, что для низких значений напряжения на обкладках конденсатора при проведении процесса искрового плазменного спекания удается практически адекватно описать поведение спекаемых частиц, однако при задании более высоких значений напряжения оказывается, что рассматриваемые термоэлектромеханические представления о механизмах спекания микрочастиц недостаточны для достоверного моделирования указанного процесса.

Было установлено, что для высоких температур эффект ползучести в несколько раз превосходит влияние пластичности на процесс образования шейки спекания. При этом изменение параметров ползучести при моделировании также активно влияет на формирование шейки. Отклонение значения энергии активации ползучести от табличных величин всего на 10 % может привести к увеличению деформаций ползучести на 75 % и к увеличению диаметра шейки на 5 %.

Согласно сведениям, изложенным в монографии [18], помимо явления ползучести, важное влияние на процесс спекания оказывает механизм диффузии. В работах [19, 20] оценивается влияние высоких температур (свыше 1500 °С) на процессы зернограничной и поверхностной диффузии.

Учет данных механизмов шейкообразования, наряду с учетом ползучести и пластичности, может привести к достижению более точного согласия между результатами моделирования высокоамперного спекания и имеющимися экспериментальными данными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Anselmi-Tamburini U., Garay J.E., Munir Z.A.** Fundamental investigations on the spark plasma sintering/synthesis process: III. Current effect on reactivity// Materials Science and Engineering. A. 2005. Vol. 407. No. 1–2. Pp. 24–30.

2. **Trapp J., Semenov A.S., Nöthe M., Wallmersperger T., Kieback B.** Fundamental principles of spark plasma sintering of metals: part III – densification by plasticity and creep deformation // Powder Metallurgy. 2020. Vol. 63. No. 5. Pp. 329–337.

3. **Wei Li.** Constitutive modeling and simulation of spark plasma sintering with applications to fabrication of functionally structured mono-carbides. Ph. D. thesis. San Diego, USA: University of California, 2013. 271 p.

4. **Semenov A.S., Trapp J., Nöthe M., Eberhardt O., Wallmersperger T., Kieback B.** Experimental and numerical analysis of the initial stage of field-assisted sintering of metals // Journal of Materials Science. 2017. Vol. 52. No. 3. Pp. 1486–1500.

5. **Semenov A.S., Trapp J., Nöthe M., Eberhardt O., Wallmersperger T., Kieback B.** Thermo-electro-mechanical modeling, simulation and experiments of field-assisted sintering // Journal of Materials Science. 2019. Vol. 54. No. 15. Pp. 10764–10783.

6. **Баринов В.Ю., Рогачев А.С., Вадченко С.Г., Московских Д.О., Колобов Ю.Р.** Искровое плазменное спекание изделий сложной формы с использованием квазистатического прессования // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. 2016. № 1-3. С. 312–315.

7. **Григорьев Е.Г., Калин Б.А.** Электроимпульсная технология формирования материалов из порошков. М.: Изд-во МИФИ, 2008. 152 с.

8. **Колеров О.К.** Особенности первичной рекристаллизации и ее роль при спекании металлических порошков // Порошковая металлургия. 1973. № 3. С. 18–22.

9. **Петрушина М.В., Погудо Е.Л., Чивель Ю.А.** Моделирование процесса спекания сферических порошков под действием импульсного лазерного излучения // Теплофизика высоких температур. 2006. Т. 44. № 1. С. 148–152.

10. **Mishra D.D., Agarwala V., Agarwala R.C.** Sintering behavior of mechanically alloyed Ti-48Al-2Nb aluminides // Теплофизика высоких температур. 2014. Т. 52. № 1. С. 65–71.

11. **Maniere C., Durand L., Weibel A., Estournes C.** Spark plasma sintering and finite element method: from the identification of the sintering parameters of a submicronic α-alumina powder to the development of complex shapes // Acta Materialia. 2016. Vol. 102. 1 January. Pp. 169–175.

12. **Munir Z.A., Anselmi-Tamburini U., Ohyanagi M.** The effect of electric field and pressure on the synthesis and consolidation of materials: a review of the spark plasma sintering method // Journal of Materials Science. 2006. Vol. 41. No. 3. Pp. 763–777.

13. **Olevsky E., Froyen L.** Constitutive modeling of spark-plasma sintering of conductive materials // Scripta Materialia. 2006. Vol. 55. No. 12. Pp. 1175–1178.

14. **Orru R., Licheri R., Locci A.M., Cincotti A., Cao G.** Consolidation/synthesis of materials by electric current activated/assisted sintering // Materials Science and Engineering. R: Reports. 2009. Vol. 63. No. 4–6. Pp. 127–287.

15. **Allen J., Walter C.** Numerical simulation of the temperature and stress field evolution applied to the field assisted sintering technique // ISRN Materials Science. 2012. Vol. 2012. Article ID 698158. Pp. 1–9.

16. **Зиновьев В.Е.** Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989. 384 с.

17. **Фрост Г.Дж., Эшби М.Ф.** Карты механизмов деформации. Пер. с англ. Челябинск: Металлургия, 1989. 328 с.

18. **Kang S.-J.L.** Sintering: densification, grain growth and microstructure. Oxford: Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. 265 p.

19. **Борисенко В.А., Семенов А.С.** Исследование деформирования межчастичной шейки металлических микрочастиц путем диффузии // Неделя науки СПбПУ. Материалы научной конференции с международным участием. Институт прикладной математики и механики. 13–19 ноября 2017 г., СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2017. С. 103–105.

20. **Борисенко В.А., Семенов А.С.** Моделирование процесса роста шейки между двумя сферическими частицами при спекании // Неделя науки СПбПУ. Материалы научной конференции с международным участием. Институт прикладной математики и механики. 19–24 ноября 2018 г., СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2018. С. 80–83.

Статья поступила в редакцию 13.04.2021, принята к публикации 18.06.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БОРИСЕНКО Владислав Андреевич – *инженер-исследователь Института передовых производственных технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

vladborisenko1995@gmail.com

СЕМЕНОВ Артем Семенович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы механики и процессов управления, заведующий кафедрой сопротивления материалов Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

Semenov.Artem@googlemail.com

ВАЛЬМЕРСПЕРГЕР Томас – *доктор технических наук, профессор Технического университета Дрездена, г. Дрезден, Саксония, Германия.*

01062, Германия, г. Дрезден

servicecenter.studium@tu-dresden.de

REFERENCES

1. **Anselmi-Tamburini U., Garay J.E., Munir Z.A.,** Fundamental investigations on the spark plasma sintering/synthesis process: III. Current effect on reactivity, Mater. Sci. Eng. A. 407 (1–2) (2005) 24–30.

2. **Trapp J., Semenov A.S., Nöthe M., et al.,** Fundamental principles of spark plasma sintering of metals: part III – densification by plasticity and creep deformation, Powder Metallurgy. 63 (5) (2020) 329–337.

3. **Wei Li,** Constitutive modeling and simulation of spark plasma sintering with applications to fabrication of functionally structured mono-carbides, Ph. D. thesis, University of California, San Diego, USA, 2013.

4. **Semenov A.S., Trapp J., Nöthe M., et al.,** Experimental and numerical analysis of the initial stage of field-assisted sintering of metals, J. Mater. Sci. 52 (3) (2017) 1486–1500.

5. **Semenov A.S., Trapp J., Nöthe M., et al.,** Thermo-electro-mechanical modeling, simulation and experiments of field-assisted sintering, J. Mater. Sci. 54 (15) (2019) 10764–10783.

6. **Barinov V.Yu., Rogachev A.S., Vadchenko S.G., et al.,** Iskrovoye plazmennoye spekaniye izdeliy slozhnoy formy s ispolzovaniyem kvaziistaticheskogo pressovaniya [Spark plasma sintering of complex-shaped products using quasi-static pressing], Mezhdunarodnyy zhurnal prikladnykh i fundamentalnykh issledovaniy [International Journal of Applied and Fundamental Research]. (1-3) (2016) 312–315 (in Russian).

7. **Grigoryev E.G., Kalin B.A.,** Elektroimpulsnaya tekhnologiya formirovaniya materialov iz poroshkov [Spark-discharge technology of material forming from powders], Moscow Engineering and Physical Institute (MEPhI), Moscow, 2008 (in Russian).

8. **Kolerov O.K.,** Characteristics of primary recrystallization and its role in the sintering of metal powders, Soviet Powder Metallurgy and Metal Ceramics. 12 (3) (1973) 192–195.

9. **Petrushina M.V., Pogudo E.L., Chivel Yu.A.,** Simulation of the process of sintering of spherical powders under the effect of pulsed laser radiation, High Temperature. 44 (1) (2006) 151–155.

10. **Mishra D.D., Agarwala V., Agarwala R.C.** Sintering behavior of mechanically alloyed Ti-48Al-2Nb aluminides, High Temperature. 52 (1) (2014) 65–71.

11. **Maniere C., Durand L., Weibel A., Estournes C.,** Spark plasma sintering and finite element method: from the identification of the sintering parameters of a submicronic α-alumina powder to the development of complex shapes, Acta Materialia. 102 (1 January) (2016) 169–175.

12. **Munir Z.A., Anselmi-Tamburini U., Ohyanagi M.,** The effect of electric field and pressure on the synthesis and consolidation of materials: a review of the spark plasma sintering method, J. Mater. Sci. 41 (3) (2006) 763–777.

13. **Olevsky E., Froyen L.,** Constitutive modeling of spark-plasma sintering of conductive materials, Scripta Materialia. 55 (12) (2006) 1175–1178.

14. **Orru R., Licheri R., Locci A.M., et al.,** Consolidation/synthesis of materials by electric current activated/assisted sintering, Mater. Sci. Eng. R: Reports. 63 (4–6) (2009) 127–287.

15. **Allen J., Walter C.,** Numerical simulation of the temperature and stress field evolution applied to the field assisted sintering technique, ISRN Mater. Sci. 2012 (2012) ID 698158. 1–9.

16. **Zinoviev V.E.,** Teplofizicheskiye svoystva metallov pri vysokikh temperaturakh [Thermophysical properties of metals at high temperatures (Handbook)], Metalurgia, Moscow, 1989 (in Russian).

17. **Frost H.J., Ashby M.F.,** Deformation-mechanism maps: the plasticity and creep of metals and ceramics, Pergamon Press, Oxford [Oxfordshire], New York, 1982.

18. **Kang S.-J. L.,** Sintering: densification, grain growth and microstructure, Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005.

19. **Borisenko V.A., Semenov A.S.,** Issledovaniye deformirovaniya mezhchastichnoy sheyki metallicheskikh mikrochastits putem diffuzii [Studies in straining the interparticle neck of metal microparticles through diffusion], SPbPU Science Week, Materials of Scientific Conference with International Participation, November 13–19, 2017, Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Polytechnical Institute Publishing, St. Petersburg (2017) 103–105 (in Russian).

20. **Borisenko V.A., Semenov A.S.,** Modelirovaniye protsessa rosta sheyki mezhdu dvumya sfericheskimi chastitsami pri spekanii [Simulation of the process of a neck growth between two spherical particles during sintering], SPbPU Science Week, Materials of Scientific Conference with International Participation, November 19–24, 2018, Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Polytechnical Institute Publishing, St. Petersburg (2018) 80–83 (in Russian).

Received 13.04.2021, accepted 18.06.2021.

THE AUTHORS

BORISENKO Vladislav A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vladborisenko1995@gmail.com

SEMENOV Artem S.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Semenov.Artem@googlemail.com

WALLMERSPERGER Thomas
Dresden University of Technology
3c, George-Bähr-Straße, Dresden, 01069, Saxony, Germany
servicecenter.studium@tu-dresden.de

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14305
УДК 533.1; 621.791

УСЛОВИЕ ПРИМЕНЕНИЯ ИНТЕГРАЛА КРОККО ПРИ МАТЕМАТИЧЕСКОМ ОПИСАНИИ ПЛАЗМЕННОГО ФАКЕЛА ПРИ ЛАЗЕРНОЙ СВАРКЕ

С.О. Дудоладов[1], **Н.В. Ларионов**[1,2]

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация;

[2] Санкт-Петербургский государственный морской технический университет, Санкт-Петербург, Российская Федерация

На основе теоретического подхода, разработанного в статье Туричина Г.А. и др. (ТВТ, 2006. Т. 44, № 5. С. 655–663), исследуются характеристики плазменного факела, образующегося при лазерной сварке с глубоким проплавлением. Находится условие, которое отвечает существованию интеграла Крокко и позволяет упростить систему газодинамических уравнений, дающую аналитические решения для плазменного факела в виде классической затопленной струи. Полученные решения анализируются для широкого интервала значений скорости и температуры паров металла на вылете из парогазового канала. Для некоторых выбранных значений найдено согласие с численными расчетами других авторов.

Ключевые слова: газодинамические уравнения, плазменный факел, лазерная сварка, слой смешения, затопленная струя

Ссылка при цитировании: Дудоладов С.О., Ларионов Н.В. Условие применения интеграла Крокко при математическом описании плазменного факела при лазерной сварке // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 63–78. DOI: 10.18721/JPM.14305

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creative-commons.org/licenses/by-nc/4.0/)

THE CONDITION FOR APPLICATION OF THE CROCCO INTEGRAL IN THE MATHEMATICAL DESCRIPTION OF A LASER WELDING PLASMA PLUME

S.O. Dudoladov[1], **N.V. Larionov**[1,2]

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

[2] St. Petersburg State Marine Technical University, St. Petersburg, Russian Federation

Based on the theoretical approach developed in the article by G.A. Turichin et al. (High Temperature. 2006. Vol. 44. No. 5. Pp. 647–655), the characteristics of the plasma plume forming in the keyhole laser welding have been investigated. A condition corresponding to the existence of the Crocco integral was defined, making it possible to simplify the system of gas dynamics equations and obtain analytical solutions for a plasma plume in the form of a classical submerged jet. These solutions were analyzed for a wide range of metal vapor velocities and temperatures at the keyhole top. For some of the selected values, an agreement with the numerical calculations of other authors was found.

Keywords: gas dynamics equations, plasma plume, laser welding, shear layer, submerged jet

Citation: Dudoladov S.O., Larionov N.V., The condition for application of the Crocco integral in the mathematical description of a laser welding plasma plume, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 63–78. DOI: 10.18721/JPM.14305

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

В процессе лазерной сварки с глубоким проплавлением, луч лазера, направленный на металлическую заготовку, вызывает нагрев и испарение свариваемого материала с образованием парогазового канала (ПГК). Взаимодействие давления паров материала, гидростатических сил окружающего жидкого металла и сил поверхностного натяжения препятствуют закрытию канала [1]. Струя металлических паров вылетает из ПГК в среду защитного газа, продвигает его и смешивается с ним, затухая на некоторой высоте за счет вязкости. Взаимодействие лазерного луча с испарившимся металлом может приводить к частичной ионизации этих паров, индуцируя тем самым возникновение плазмы выше обрабатываемой поверхности – плазменного факела, и плазму внутри ПГК [2 – 4]. Плазменный факел служит удобной средой для передачи энергии от лазерного излучения к заготовке. Однако он же влияет на процесс сварки, ввиду поглощения и рассеяния лазерного излучения, а также нагрева лазерной головки.

Взаимодействия между плазменным факелом, лазерным лучом и защитным газом представляют собой сложную картину течения газа и тепломассопереноса [5 – 7]. Когда поглощенная энергия становится сравнимой с энергией потерь, обусловленной проводимостью, конвекцией и излучением плазменного факела, факел обретает способность сохранять стационарную форму по отношению к лазерному лучу. Пространственные распределения температуры газа и концентрации частиц в плазменном факеле всегда неоднородны. Наличие градиентов плотности внутри плазменного факела вызывает преломление и расфокусировку лазерного луча, снижает плотность мощности лазерного излучения, влияя тем самым на процесс лазерной сварки.

Горение плазменного факела при сварке может сопровождаться различными сложными процессами, связанными с конкретным видом обработки материала. Так, в частности, при гибридном лазерно-дуговом воздействии на металлические материалы, в результате расширения и охлаждения паров металла, в плазменном факеле могут образовываться кластеры конденсированной фазы, которые понижают среднюю энергию электронов в плазме и влияют на протекание кинетических процессов [8, 9].

Изучение распределений температуры, плотности и концентрации частиц в плазменном факеле является актуальной задачей, ввиду необходимости создания методов управления процессами, происходящими при лазерной сварке с глубоким проплавлением, с целью улучшения качества обработки материалов и получения требуемых свойств сварного шва.

В статье профессора Туричина Глеба Андреевича с соавторами [5] проводилось исследование характеристик плазменного факела, возникающего при сварке в гелиевой атмосфере железа с помощью твердотельного неодимого лазера на основе иттрий-алюминиевого граната (Nd:YAG-лазер). В рассматриваемом конкретном случае поглощение лазерного излучения факелом бывает крайне незначительным. Это позволило авторам решать задачу о вытекании струи горячих паров железа в атмосферу холодного защитного газа – гелия с использованием системы газодинамических уравнений [10 – 12]. Влияние незначительного объемного тепловыделения, обусловленного поглощением лазерного излучения факелом, учитывалось путем введения соответствующего источника в уравнение баланса энергии. Свойства источника

определялись из решения кинетического уравнения для энергетического спектра электронов плазмы [13].

В приближении аксиально-симметричного пограничного слоя и в пренебрежении источником тепловыделения, в работе [5] были получены аналитические решения системы газодинамических уравнений, соответствующие задаче о ламинарной затопленной струе [10]. Для получения этих решений было сделано несколько предположений, которые, в частности, позволили ввести интеграл Крокко, однако условие его существования авторы подробно не исследовали.

В связи с вышеизложенным, одна из основных целей данного исследования – это выявление области значений наблюдаемых величин, где их можно описать аналитическими решениями, полученными в работе [5]. Кроме того, поставлена задача проанализировать характеристики плазменного факела в широком интервале значений скорости и температуры паров металла на вылете из парогазового канала и сопоставить полученные результаты с данными численных расчетов других авторов [6, 7].

Теоретическое описание плазменного факела

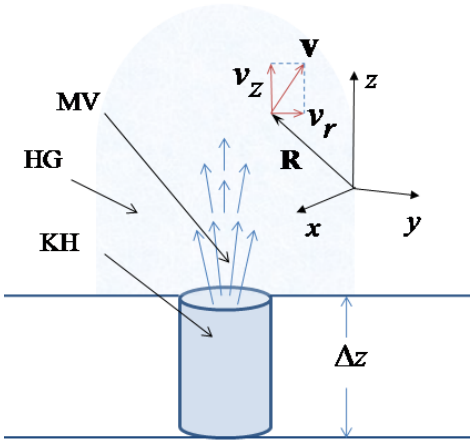


Рис. 1. Схематичное изображение плазменного факела и поля скоростей $\mathbf{v}(\mathbf{R})$, где $\mathbf{R} = (r, \varphi, z)$: MV – пары металла; HG – защитный газ; KH – парогазовый канал, Δz – его глубина. Лазерный луч (на рис. не показан) падает по нормали к поверхности металлической заготовки

Будем рассматривать стационарный случай, т. е. пренебрежем всеми переходными процессами, связанными с включением лазера и формированием факела в начальные моменты времени. Предполагая, что сварка выполняется Nd:YAG-лазером в гелиевой атмосфере, будем также пренебрегать источником тепловыделения (как и в работе [5]), который связан с поглощением лазерного излучения факелом.

На рис. 1 схематически представлен плазменный факел, который в нашем случае представляет собой струю паров металла (MV), вырывающуюся из ПГК (*англ.* Keyhole (KH)) в атмосферу защитного газа гелия (HG). Пары продвигают защитный газ, смешиваются с ним, и струя, благодаря вязкости, затухает на некотором расстоянии от поверхности. Оси декартовой системы координат расположены так, что ось z направлена вдоль оси ПГК, который можно представить как цилиндр с малой глубиной Δz.

Обозначим плотность смеси, состоящей из паров металла с защитным газом за ρ, массовую долю атомов металла в смеси за C. Тогда плотности паров металла ρ_V и защитного газа ρ_g выражаются как

$$\begin{cases} \rho = \rho_V + \rho_g, \\ \rho_V = C\rho, \ \rho_g = (1-C)\rho. \end{cases} \tag{1}$$

Часть основных процессов, определяющих свойства установившегося плазменного факела, протекает в слое смешения паров металла с атомами защитного газа. Будем рассматривать край слоя смешения, где концентрация тяжелых атомов металла в смеси мала, т. е. область, где происходит диффузия тяжелого газа в легком. В этом случае описание свойств факела

можно провести в приближении пограничного слоя. При этом будем считать пограничный слой ламинарным (см. оценку числа Рейнольдса далее, в описании результатов).

Выделим два масштаба длины: продольный $\sim z$ (вдоль направления вылета паров металла) и поперечный $\sim r = \sqrt{x^2 + y^2}$ (поперек оси канала). При этом, как обычно предполагается в теории пограничного слоя, поперечный масштаб будем считать намного меньше продольного.

Для рассматриваемой бинарной смеси полная система газодинамических уравнений, записанная в приближении аксиально-симметричного пограничного слоя, имеет вид [10, 11]:

$$\begin{cases} \rho\left\{v_r \dfrac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \dfrac{\partial v_z}{\partial z}\right\} = \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r\mu \dfrac{\partial v_z}{\partial r}\right) - \dfrac{\partial p}{\partial z}, \\ \rho\left\{v_r \dfrac{\partial C}{\partial r} + v_z \dfrac{\partial C}{\partial z}\right\} = \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r\rho D_{gV} \dfrac{\partial C}{\partial r}\right), \\ \rho\left\{v_r \dfrac{\partial h}{\partial r} + v_z \dfrac{\partial h}{\partial z}\right\} = \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r \dfrac{\kappa}{C_p}\dfrac{\partial h}{\partial r}\right) + v_z \dfrac{\partial p}{\partial z} + \mu\left(\dfrac{\partial v_z}{\partial r}\right)^2 + q, \\ \dfrac{\partial}{\partial r}\left(r\rho v_r\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(r\rho v_z\right) = 0, \\ \dfrac{\partial p}{\partial r} = 0, \end{cases} \tag{2}$$

где v_r, v_z – цилиндрические компоненты поля скоростей $\mathbf{v}$; μ – коэффициент динамической вязкости; D_{gV} – коэффициент взаимной диффузии; κ – коэффициент теплопроводности; C_p – теплоемкость смеси, $C_p = (1 - C)\cdot C_{p_g} + C \cdot C_{p_V}$ (C_{p_g}, C_{p_V} – удельные теплоемкости гелия и паров металла); $h = C_p T$ – энтальпия, записанная через температуру T; p – давление.

Источник q (которым в дальнейшем мы пренебрежем) представляет собой объемное тепловыделение, связанное с поглощением смесью энергии лазерного излучения.

Система уравнений (2) записана в цилиндрической системе координат (r, φ, z) с осью z вдоль вылета паров металла (см. рис. 1). Предположение об аксиальной симметрии задачи означает независимость поля скоростей $\mathbf{v}$ от угла φ и равенстве нулю вращательной компоненты скорости v_φ, т. е.

$$\mathbf{v}(r,z) = \mathbf{e}_r v_r(r,z) + \mathbf{e}_z v_z(r,z).$$

Первое уравнение в системе (2) получено из основного динамического уравнения (уравнения Навье – Стокса), второе и третье выведены из конвективного уравнения диффузии и общего уравнения баланса энергии, соответственно. Четвертое уравнение в системе (2) – это уравнение неразрывности, а пятое уравнение – это известное условие постоянства давления поперек пограничного слоя.

Отличие системы (2) от аналогичной системы уравнений, приведенной в работе [5], – это наличие квадратичного слагаемого $\sim (\partial v_z/\partial r)^2$, характеризующего работу вязких сил в уравнении для энтальпии. Авторы статьи [5], заранее предполагая малость этого слагаемого, его отбросили. Мы же, для общности, его оставляем, а в конце раздела покажем, почему им можно пренебречь. В дальнейшем, так же как и в статье [5], сделаем естественное предположение о постоянстве давления [10], т. е. в системе (2) положим $\partial p/\partial z = 0$.

В качестве уравнения состояния, замыкающего систему (2), используем уравнение Менделеева – Клапейрона:

$$p = \left(\frac{C}{M_V} + \frac{1-C}{M_g} \right) \rho RT, \tag{3}$$

где M_i – молярная масса для i-й компоненты смеси, R – универсальная газовая постоянная.

Для решения системы (2), (3) следует определить коэффициенты переноса μ, D_{gV}, κ. Эти коэффициенты содержат длины свободных пробегов λ_g, λ_V (для гелия и металла соответственно), которые, как это следует из молекулярно-кинетической теории [14, 15], можно оценить следующим образом:

$$\begin{cases} \lambda_g = \dfrac{1}{n_g \sigma_{gg} \sqrt{2} + n_V \sigma_{gV} \sqrt{1 + m_g / m_V}}, \\ \lambda_V = \dfrac{1}{n_V \sigma_{VV} \sqrt{2} + n_g \sigma_{Vg} \sqrt{1 + m_V / m_g}}, \end{cases} \tag{4}$$

где m_g, m_V – массы атомов гелия и металла соответственно; n_g, n_V –соответствующие концентрации; σ_{gg}, σ_{gV}, σ_{Vg}, σ_{VV} – эффективные сечения взаимодействий газ – газ, газ – металл, металл – газ и металл – металл.

Масса атома гелия $m_g \approx 4$ а.е.м.; в качестве массы атома металла выберем массу атома железа $m_V \approx 56$ а.е.м.; концентрации $n_g = \rho_g / m_g$, $n_V = \rho_V / m_V$.

Эффективные сечения выражаются как

$$\sigma_{gg} = 4\pi r_g^2, \sigma_{gV} = \pi \left(r_g + r_V \right)^2, \sigma_{VV} = 4\pi r_V^2,$$

где r_g, r_V – эффективные радиусы атомов.

В качестве указанных радиусов выбраны радиусы Ван-дер-Ваальса [16, 17]: $r_g \approx 140$ пм, $r_V \approx 210$ пм.

Следовательно,

$$\sigma_{gg} \approx 2{,}46 \cdot 10^5 \text{ (пм)}^2, \ \sigma_{gV} \approx 3{,}85 \cdot 10^5 \text{ (пм)}^2, \ \sigma_{VV} \approx 5{,}54 \cdot 10^5 \text{ (пм)}^2 \tag{5}$$

и

$$\lambda_g \approx \gamma \lambda_V, \tag{6}$$

где значение γ лежит в интервале 2 – 4. Число 2 соответствует пределу $C \to 1$, а 4 – пределу $C \to 0$ или $C \to 0{,}5$.

Выражения для коэффициентов переноса имеют следующий вид [14, 15]:

$$\begin{cases} \nu = \dfrac{1}{3} \left[C \lambda_V \langle v_V \rangle + (1-C) \lambda_g \langle v_g \rangle \right], \\ D_{gV} = \dfrac{1}{3} \left[(1-C) \lambda_V \langle v_V \rangle + C \lambda_g \langle v_g \rangle \right], \\ \alpha = \dfrac{C_v}{3C_p} \left[C \lambda_V \langle v_V \rangle + (1-C) \lambda_g \langle v_g \rangle \right], \end{cases} \tag{7}$$

где $\nu = \mu/\rho$ – коэффициент кинематической вязкости; $\alpha = \kappa/(\rho C_p)$ – коэффициент температуропроводности; $\langle v_V \rangle, \langle v_g \rangle$ – средние скорости теплового движения атомов железа и гелия, соответственно.

В рассматриваемой нами области слоя смешения, где преобладает диффузия тяжелого газа в легком, массовая доля C атомов железа в смеси должна быть меньше 0,6, что соответствует приближенному равенству $n_g \approx 10\, n_V$. Будем рассматривать частный случай $C \approx 0{,}5$, выбор которого будет ясен в дальнейшем.

Тогда, учитывая соотношение (6), а также отношение тепловых скоростей $\langle v_g \rangle / \langle v_V \rangle = \sqrt{m_V / m_g} \approx 4$, выражения для коэффициентов переноса мы можем переписать следующим образом:

$$\begin{cases} \nu \approx \nu_\infty \dfrac{\rho_\infty}{\rho}\left(\dfrac{h}{h_\infty}\right)^{1/2}(1-C), \\ D_{gV} \approx \nu_\infty \dfrac{\rho_\infty}{\rho}\left(\dfrac{h}{h_\infty}\right)^{1/2} C,\ \alpha \approx \alpha_\infty \dfrac{\rho_\infty}{\rho}\left(\dfrac{h}{h_\infty}\right)^{1/2}(1-C), \end{cases} \tag{8}$$

где

$$\nu_\infty = \frac{4(kT_\infty)^{3/2}}{3p\sigma_{gg}(\pi m_g)^{1/2}},\ \alpha_\infty = \frac{3\nu_\infty}{5},\ h_\infty = C_p T_\infty;$$

T_∞, ρ_∞ – температура и плотность на «бесконечности», т. е. параметры защитного газа вдали от факела; k – постоянная Больцмана.

Перепишем систему (2) с учетом сделанных замечаний и полученных коэффициентов переноса (8):

$$\begin{cases} \left\{ v_r \dfrac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \dfrac{\partial v_z}{\partial z} \right\} = \nu_\infty \dfrac{\rho_\infty}{\rho} \dfrac{1}{r} \dfrac{\partial}{\partial r}\left(r(1-C)\left(\dfrac{h}{h_\infty}\right)^{1/2} \dfrac{\partial v_z}{\partial r} \right), \\ \left\{ v_r \dfrac{\partial C}{\partial r} + v_z \dfrac{\partial C}{\partial z} \right\} = \nu_\infty \dfrac{\rho_\infty}{\rho} \dfrac{1}{r} \dfrac{\partial}{\partial r}\left(rC\left(\dfrac{h}{h_\infty}\right)^{1/2} \dfrac{\partial C}{\partial r} \right), \\ \left\{ v_r \dfrac{\partial h}{\partial r} + v_z \dfrac{\partial h}{\partial z} \right\} = \alpha_\infty \dfrac{\rho_\infty}{\rho} \dfrac{1}{r} \dfrac{\partial}{\partial r}\left(r(1-C)\left(\dfrac{h}{h_\infty}\right)^{1/2} \dfrac{\partial h}{\partial r} \right) + \\ + \nu_\infty \dfrac{\rho_\infty}{\rho}(1-C)\left(\dfrac{h}{h_\infty}\right)^{1/2}\left(\dfrac{\partial v_z}{\partial r}\right)^2, \\ \dfrac{\partial}{\partial r}(r\rho v_r) + \dfrac{\partial}{\partial z}(r\rho v_z) = 0. \end{cases} \tag{9}$$

При значениях C, близких к 0,5, первые два уравнения почти тождественны относительно двух различных переменных, а краевые условия решений подобны с точностью до постоян-

ной величины: $C \to 0$, $v_z \to 0$ при $r \to \infty$, и C, v_z стремятся к некоторым постоянным значениям, зависящим от z, при $r \to 0$.

Таким образом, для $C \approx 0{,}5$ можно ввести интеграл Крокко

$$C = av_z + f$$

(a, f – константы), который позволит исключить из системы (9) уравнение для C.

Отметим, что уточненное условие использования интеграла Крокко, $C \approx 0{,}5$, можно выделить как основной результат данного раздела.

В статье [5] подобного анализа системы (2) на возможность использования интеграла Крокко сделано не было, что не позволяло указать, в какой области полученные аналитические решения дают более точный результат. Так, в частности, для значений $C << 1$ величина ν отличается от D_{gV} примерно в десять раз, что не допускает возможности вводить интеграл Крокко, линейно связывающий величины C и v_z.

Решение системы трех уравнений относительно неизвестных полей v_r, v_z и h проведем таким же способом, как в работе [5]. Выпишем основные шаги решения.

Шаг 1. Переход к переменным Дородницына x, y [10]:

$$\begin{cases} ydy = \dfrac{\rho}{\rho_\infty} rdr, \\ x = z. \end{cases} \tag{10}$$

Шаг 2. Предположение о слабой зависимости плотности ρ от своего аргумента r, т. е. $\partial\rho/\partial r \approx 0$ [5]. Это важное предположение основано на том, что вылетающие пары металла являются тяжелыми, но при этом горячими, а окружающий газ гелий, наоборот, – легкий, но холодный.

Тогда

$$y^2 = \frac{1}{\rho_\infty}\left(r^2\rho - \int_0^r r^2 \frac{\partial\rho}{\partial r} dr\right) \approx \frac{\rho}{\rho_\infty} r^2, \ \frac{\partial y}{\partial r} \approx \left(\frac{\rho}{\rho_\infty}\right)^{1/2}. \tag{11}$$

Шаг 3. Введение новых скоростей U, $\tilde{V}$, зависящих от x, y и их функции тока ψ:

$$\begin{cases} V = v_r, \ U = v_z, \\ \tilde{V} = \left(V\dfrac{\partial y}{\partial r} + U\dfrac{\partial y}{\partial z}\right); \end{cases} \begin{cases} U = \dfrac{1}{y}\dfrac{\partial\psi}{\partial y}, \\ \tilde{V} = -\dfrac{1}{y}\dfrac{\partial\psi}{\partial x}. \end{cases} \tag{12}$$

Шаг 4. Линеаризация уравнений, которая относительно системы (9) соответствует следующим заменам:

$$(1-C)\left(\frac{h}{h_\infty}\right)^{1/2} \to \frac{1}{2}\left(\frac{h_0}{h_\infty}\right)^{1/2}, \ C\left(\frac{h}{h_\infty}\right)^{1/2} \to \frac{1}{2}\left(\frac{h_0}{h_\infty}\right)^{1/2}, \tag{13}$$

где h_0 – характерное значение энтальпии в рассматриваемой области.

Шаг 5. Введение автомодельной переменной $\xi = y\Big/\left(x\tilde{\nu}_\infty^{1/2}\right)$ и запись функции тока и энтальпии через новые переменные ξ, x:

$$\psi(\xi,x) = \tilde{\nu}_\infty x \cdot c(\xi),\ h = \frac{\tilde{\nu}_\infty}{x} d(\xi), \tag{14}$$

где

$$\tilde{\nu}_\infty = \frac{\nu_\infty}{2}\left(\frac{h_0}{h_\infty}\right)^{1/2},\ \tilde{\alpha}_\infty = \frac{\alpha_\infty}{2}\left(\frac{h_0}{h_\infty}\right)^{1/2}.$$

Шаг 6. Переход к дифференциальным уравнениям для функций $c(\xi)$, $d(\xi)$:

$$\begin{cases} \xi^2 c''' + \xi(c-1)c'' + \xi(c')^2 - (c-1)c' = 0, \\ \left(\tilde{\alpha}_\infty \xi \cdot d'' + \left(\tilde{\alpha}_\infty + \tilde{\nu}_\infty c\right)d' + \tilde{\nu}_\infty c' \cdot d\right)\xi^3 + \dfrac{1}{x}\left(\xi c'' - c'\right)^2 = 0. \end{cases} \tag{15}$$

Решение первого уравнения для функции $c(\xi)$ известно, и оно соответствует решению для ламинарной затопленный струи несжимаемого газа [10]. Второе уравнение для функции $d(\xi)$ определяет энтальпию, и оно содержит слагаемое, пропорциональное $1/x$. Отбрасывание этого слагаемого в предположении, что оно мало ($x = z$ – это большой масштаб), эквивалентно отбрасыванию члена $\sim (\partial v_z/\partial r)^2$ в исходных уравнениях (9). Отметим, что уравнение для $d(\xi)$ можно решить точно и его решение выражается в квадратурах. Здесь же, следуя статье [5], учитывать влияние этого слагаемого не будем, считая его поправкой более высокого порядка $\sim 1/x^2$.

Выпишем окончательные решения для поля скоростей, энтальпии и доли паров металла в смеси:

$$U = \frac{2b^2}{x} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{4}b^2\xi^2\right)^2},\ \tilde{V} = \frac{\tilde{\nu}_\infty^{1/2} b}{x} \cdot \frac{b\xi\left(1 - \frac{1}{4}b^2\xi^2\right)}{\left(1 + \frac{1}{4}b^2\xi^2\right)^2},$$
$$h = \frac{\tilde{\nu}_\infty}{x} \frac{b_1}{\left(1 + \frac{1}{4}b^2\xi^2\right)^{\frac{2\tilde{\nu}_\infty}{\tilde{\alpha}_\infty}}},\ C = aU. \tag{16}$$

Здесь константы a, b_1, b находятся из граничных условий для функции $c(\xi)$ и из условий сохранения соответствующих полных потоков. Явные выражения для этих констант имеют вид

$$a = \frac{I_0}{J_0},\ b_1 = \frac{C_p H_0}{8\pi\tilde{\nu}_\infty^2}\left(1 + 2\frac{\nu_\infty}{\alpha_\infty}\right),\ b = \left(\frac{3J_0}{16\pi\tilde{\nu}_\infty\rho_\infty}\right)^{1/2}, \tag{17}$$

где J_0, I_0, C_p, H_0 – полные потоки (вдоль струи) импульса смеси, массы паров металла и энтальпии, соответственно.

Подчеркнем, что описанная процедура решения системы (9) заимствована из работы [5], поэтому решения (16) по своей структуре полностью совпадают с решениями, полученными авторами работы [5].

Однако здесь есть небольшое отличие, которое содержится в константах $\tilde{\alpha}_\infty$, $\tilde{\nu}_\infty$ (14) (см. формулу (11) в статье [5]), которые вдвое меньше аналогичных констант, приведенных в работе [5]. Появление такого отличия связано с проделанным выше уточнением условия использования интеграла Крокко.

Для того чтобы записать найденные величины U, $\tilde{V}$, h, C через «физические координаты» r, z, необходимо сначала перейти от координат x, ξ к координатам x, y, а затем выполнить обратное преобразование Дородницына. При этом следует учесть зависимость переменной y от ρ.

Расходимость найденных решений при $z \to 0$ типична для случая автомодельных решений. Для исключения расходимости в рассматриваемом примере, начало отсчета по оси струи было смещено в глубь ПГК на величину Δz.

Результаты и их обсуждение

Для анализа решений (16) будем рассматривать следующую постановку задачи. ПГК имеет форму, близкую к прямому цилиндру с малой глубиной Δz порядка нескольких миллиметров (см. рис. 1). Последняя оценивалась при условии $h(r = 0, z = \Delta z) = h_m$, где $h_m = C_p T_m$ – максимальная энтальпия, соответствующая температуре в центре верхней части ПГК. Радиус ПГК r_k соответствует радиусу лазерного пятна на поверхности заготовки и для рассматриваемого случая примерно равен $r_k \approx 1{,}5 \cdot 10^{-4}$ м [6]. Температура боковых стенок и дна считается постоянной величиной и равной температуре кипения свариваемого материала T_b, который в нашем случае представлен железом. Максимальное значение скорости паров металла U_m достигается в центре верхней части ПГК, где, соответственно, температура смеси имеет свой максимум T_m. Сварка происходит в среде защитного газа гелия при нормальных условиях, т. е. при температуре 298 К и давлении 101,325 кПа.

Для задания пары граничных значений (T_m, U_m) были использованы расчетные данные из статьи [6], в которой численно исследовался процесс лазерной сварки с глубоким проплавлением железной заготовки. Приведем используемые далее значения этих пар величин:

13800 К, 360 м/с; 14100 К, 690 м/с;

14400 К, 920 м/с; 14500 К, 1120 м/с.

Величины H_0, I_0, J_0, входящие в решения (16), оценивались из приведенных выше значений температуры, скоростей, давления и радиуса ПГК.

В таблице перечислены граничные значения различных характеристик смеси железо-гелий, использованные в расчетах.

Задав явные значения температуры, скорости и давления, можем теперь оценить число Рейнольдса Re для нашей задачи. В качестве характерной скорости выберем U_m, а характерные линейные размеры оценим через диаметр парогазового канала $2r_k$. Динамическую вязкость паров металла вычислим, используя формулу Энскога [15]:

$$\mu_V = 1{,}016 \frac{5}{16\left(2r_V\right)^2}\left(\frac{m_V k T_m}{\pi}\right)^{1/2},$$

отсюда, учитывая уравнение состояния, найдем кинематическую вязкость $\nu_V = \mu_V / \rho_V \approx$ $\approx 3 \cdot 10^{-3}$ м^2/с. Тогда

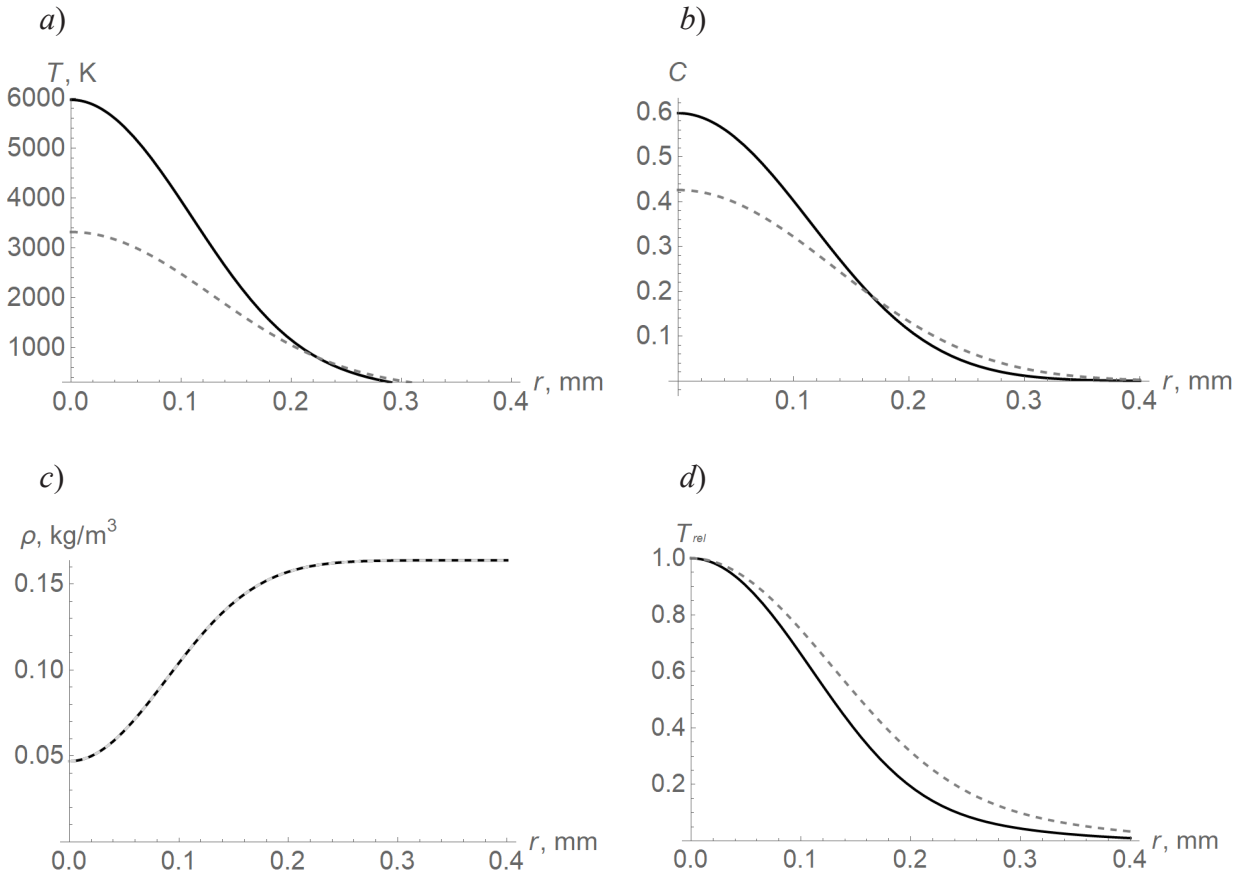


Рис. 2. Радиальные распределения температуры струи (*a*) и массовой доли атомов железа в струе (*b*) на расстоянии 5 мм от поверхности заготовки, а также радиальные распределения плотности смеси на выходе из ПГК (*c*) и нормированные на максимум радиальные распределения температуры T_{rel} (*d*). Рис. 2,*d* соответствует рис. 2,*a*, но каждая кривая нормирована на свой максимум. Представлены значения α_∞, ν_∞ (сплошные линии) и $2\alpha_\infty$, $2\nu_\infty$ (пунктиры), см. таблицу

Таблица

Граничные значения характеристик смеси железо-гелий

T_b	3200 K
T_∞	298 K
C_{pV} при T_b	480,8 Дж/(кг·K)
C_{pg} при T_∞	5193 Дж/(кг·K)
μ_∞ при T_∞	$1{,}99\cdot10^{-5}$ Па·с
κ_∞ при T_∞	0,157 Вт/(м·K)
ρ_∞ при T_∞	0,164 кг/м^3

$$\mathrm{Re} = \frac{2r_k U_m}{\nu_V} \approx 20.$$

Полученное число Рейнольдса меньше типичного значения, при котором ламинарная стационарная струя теряет устойчивость [18, 19].

Перейдем к результатам. На рис. 2 представлены радиальные зависимости температуры и массовой доли атомов железа в смеси на расстоянии 5 мм от поверхности заготовки, а также плотности смеси на выходе из ПГК. Зависимости построены с использованием формул (16). Максимальная скорость и соответствующая температура на выходе из ПГК равны соответственно 1120 м/с и 14500 К.

Анализ графиков на рис. 2 позволяет заключить, что процессы переноса обуславливают конечную ширину затопленной струи. Характерный радиус затухания струи можно оценить, если приравнять температуру смеси температуре защитного газа; получается, что этот радиус равен примерно 0,3 – 0,4 мм.

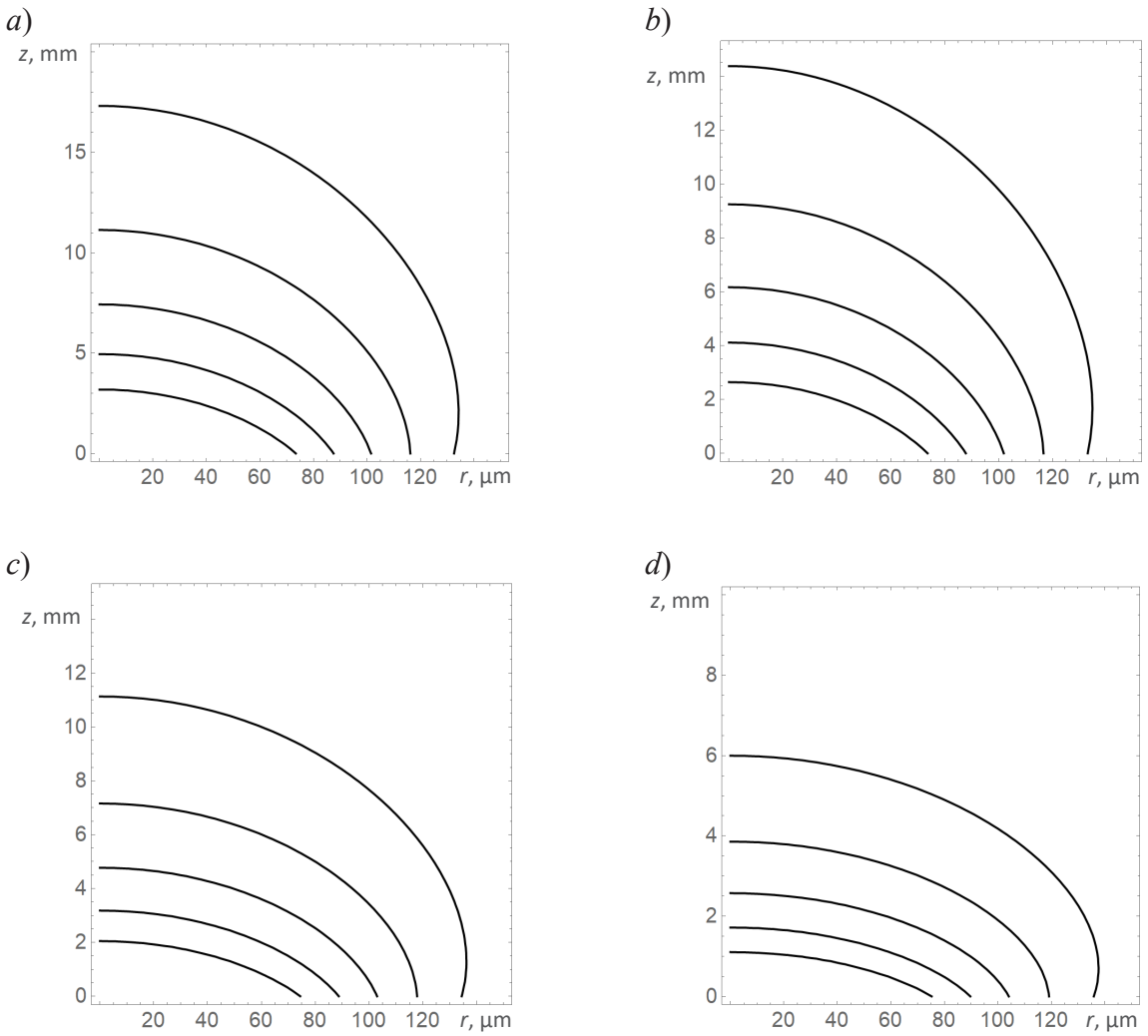


Рис. 3. Семейство изолиний $C(r, z) = C_0$ для различных пар значений параметров (T_m, К и U_m, м/с): 14500 и 1120 (*a*), 14400 и 920 (*b*), 14100 и 690 (*c*), 13800 и 360 (*d*); взяты значения C_0 = 0,3; 0,4; 0,5; 0,6 и 0,7

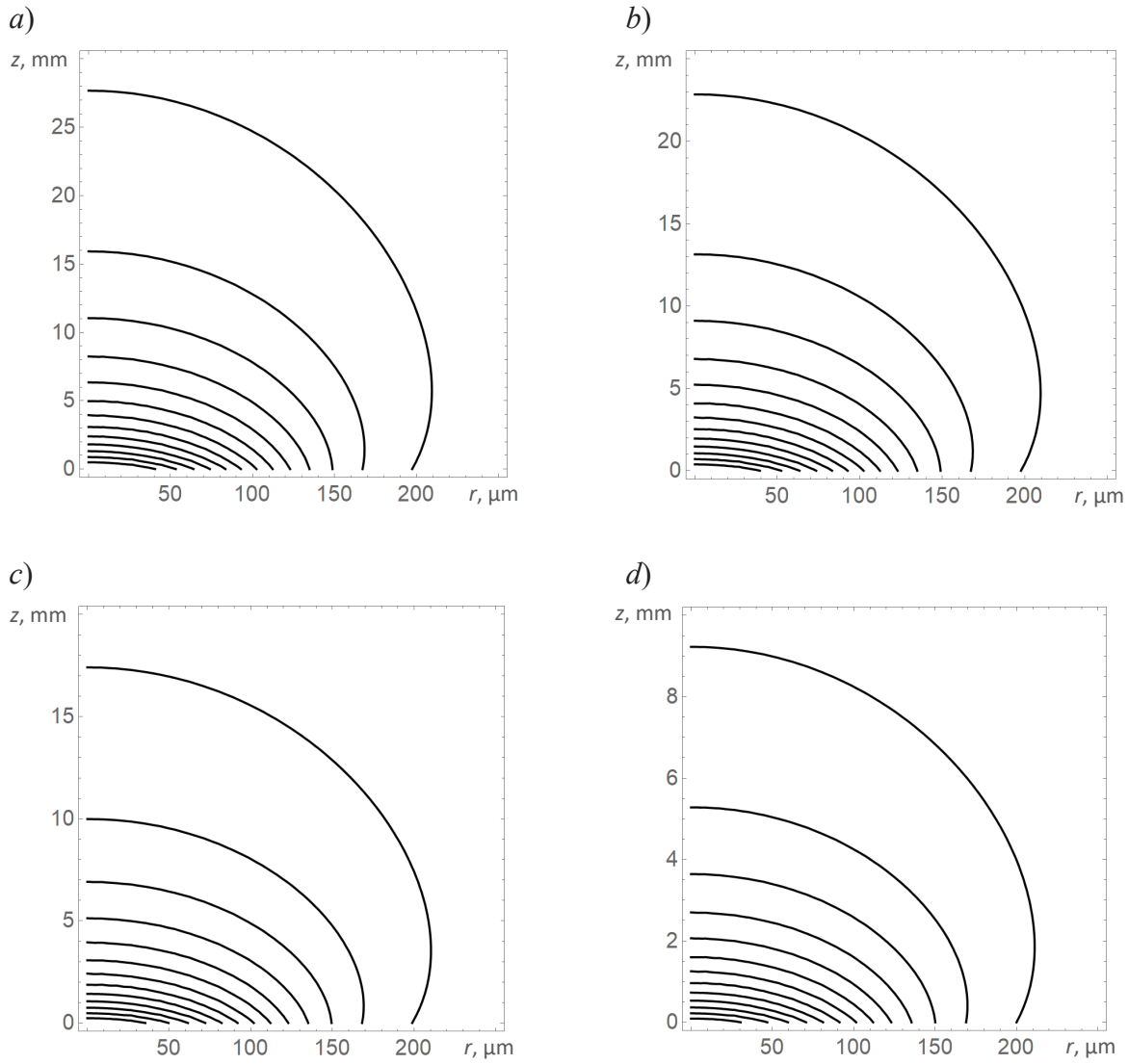


Рис. 4. Семейство изотерм газовой смеси $T(r, z) = T_0$
для тех же пар значений параметров (T_m, K и U_m, м/с), что на рис. 3.
Взяты значения T_0, K: 1000, 2000, 3000 и т. д.

Пунктирными линиями на рис. 2 представлены кривые, которые получаются, если следовать статье [5], т. е. величины α_∞, ν_∞, входящие в формулы (16), оказываются увеличенными в два раза. В этом случае, как и следовало ожидать, абсолютное значение температуры, благодаря вязкости, оказывающей сопротивление распространению струи, уменьшится, а ширина, за счет теплопроводности, увеличится (см. рис. 2,*d*). При этом максимальное значение температуры снижается примерно в два раза. Для величины *C* наблюдается аналогичная зависимость, однако максимальное значение уменьшается всего в полтора раза, что связано с продвижением вверх остывших атомов железа.

Затопленная струя паров железа в защитном газе гелии затухает на некотором расстоянии от обрабатываемой поверхности. Высота затухания зависит от многих факторов, и в том числе от скорости вылета паров из ПГК. Воспользуемся формулами (16) для анализа поведения плазменного факела при изменении граничных значений максимальной скорости U_m и температуры T_m.

На рис. 3, для различных пар (T_m, K и U_m, м/с), представлено семейство изолиний одинаковых массовых долей атомов железа в смеси:

$$C(r, z) = C_0 \ (C_0 = 0{,}3 - 0{,}7 \text{ с шагом } 0{,}1).$$

На приведенных графиках видна примерно линейная зависимость между максимальной скоростью U_m и глубиной проникновения атомов железа в защитный газ. Так например, для $U_m = 1120$ м/с точка изолинии с $C_0 = 0{,}5$ при $r = 0$ располагается на высоте $z \approx 7{,}5$ мм, а для скорости, меньшей в три раза ($U_m = 360$ м/с), высота расположения той же точки уменьшится в три раза: $z \approx 2{,}5$. Такая линейная зависимость есть очевидное следствие введения интеграла Крокко в нашей задаче. Подобная картина наблюдается и для изотерм газовой смеси $T(r, z) = T_0$, К: $T_0 = (1 - 14)\cdot 10^3$ К с шагом 10^3 К (рис. 4).

Было проведено сравнение полученных нами результатов с численными данными работы [6]. В этой статье исследовался процесс лазерной сварки с глубоким проплавлением железной заготовки в среде защитного газа аргона. Решалась система газодинамических уравнений с учетом источника тепловыделения, связанного с поглощением лазерного излучения. Хотя в работе [6] рассматривается немного другая модель, но полученные в ней некоторые закономерности описываются решениями (16): глубина проникновения атомов железа в защитный газ вдоль направления вылета паров железа линейно связана с максимальной скоростью U_m (конечно, с соответствующей температурой T_m); аналогичная линейная зависимость наблюдалась и для температуры газовой смеси.

Заключение

В проведенном нами исследовании, на основе аналитических решений системы газодинамических уравнений, записанной в приближении пограничного слоя, анализировались характеристики плазменного факела, образующегося при сварке с глубоким проплавлением неодимовым (Nd:YAG)-лазером железной заготовки в среде защитного газа гелия.

Проведенный анализ коэффициентов переноса, входящих в систему газодинамических уравнений, позволил найти условие использования интеграла Крокко. Это условие соответствует рассмотрению значений массовой доли C паров металла в смеси, близких к 0,5. Для таких значений коэффициент кинематической вязкости становится практически равным коэффициенту диффузии и уравнение для поля скоростей v_z совпадает по форме записи с уравнением диффузии (см. систему (9)), что позволяет ввести интеграл Крокко и, таким образом, решать систему с меньшим числом уравнений. Получаемые при этом решения для поля скоростей, энтальпии и массовой доли паров металла в смеси (16) по своей структуре полностью совпадают с решениями, полученными в статье [5]. Но есть небольшое отличие, которое состоит в переопределении коэффициентов переноса для защитного газа. Так, для того чтобы перейти от представленных здесь решений (16) к соответствующим решениям работы [5], следует в окончательных решениях (16) провести замену α_∞, $\nu_\infty \to 2\alpha_\infty$, $2\nu_\infty$, которая, в частности, приводит к заметным изменениям в радиальных зависимостях температуры смеси и массовой доли паров металла в смеси. Появление указанного различия между решениями связано с тем, что в статье [5] интеграл Крокко вводился без строгого анализа условий, при которых возможно его использование.

Были проанализированы зависимости массовой доли атомов железа в газовой смеси и температуры смеси при различных граничных значениях скорости и температуры паров на вылете из парогазового канала. Обнаружена естественная, в силу введения интеграла Крокко, линейная зависимость между максимальной скоростью паров железа на вылете из ПГК и глубиной проникновения атомов железа в защитный газ (аналогичная зависимость обна-

ружена и для температуры смеси). Такая же линейная зависимость между этими величинами наблюдалась в работе [6], в которой система газодинамических уравнений для сходной задачи решалась численно.

В заключение отметим, что в нашей задаче оценка числа Рейнольдса дала число $\mathrm{Re} \approx 20$, меньшее типичного значения, при котором ламинарная стационарная струя теряет устойчивость [18, 19]. Для бóльших значений скоростей паров металла U_m число Рейнольдса станет больше и сделанное допущение о ламинарности и стационарности струи смеси может стать неприменимым. В этом случае поставленную задачу нужно будет решать, основываясь на теории турбулентного пограничного слоя [20].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Григорьянц А.Г., Шиганов И.Н., Мисюров А.И.** Технологические процессы лазерной обработки. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006. 664 с.

2. **Gong J., Peng G., Li L., Xia H., Meng Sh., Wang J.** Effect of plasma plume produced by vacuum laser welding on energy transmission // Optics & Laser Technology. 2021. Vol. 136. April. P. 106744.

3. **Luo Y., Tang X., Lu F., Chen Q., Cui H.** Effect of subatmospheric pressure on plasma plume in fiber laser welding // Journal of Materials Processing Technology. 2015. Vol. 215. January. Pp. 219–224.

4. **Xu W., Chen A., Wang Q., Zhang D., Li S., Jiang Y., Gao X., Jin M.** Characteristics of laser-induced aluminum plasma plumes after increasing sample temperature and spatial confinement // Journal of Analytical Atomic Spectrometry. 2019. Vol. 34. No. 11. Pp. 2288–2294.

5. **Туричин Г.А., Григорьев А.М., Земляков Е.В., Валдайцева Е.А., Дилтей У., Гуменюк А.** Особенности формирования плазменного факела при гибридной лазерно-дуговой сварке // Теплофизика высоких температур. 2006. Т. 44. № 5. С. 655–663.

6. **Chen X., Wang H.-X.** Prediction of the laser-induced plasma characteristics in laser welding: a new modelling approach including a simplified keyhole model // Journal of Physics D: Applied Physics. 2003. Vol. 36. No. 13. Pp. 1634–1643.

7. **Wang H.-X., Chen X.** Three-dimensional modelling of the laser-induced plasma plume characteristics in laser welding // Journal of Physics D: Applied Physics. 2003. Vol. 36. No. 6. Pp. 628–639.

8. **Туричин Г.А., Земляков Е.В.** Кинетика формирования нанокластеров конденсированной фазы в плазменном факеле при гибридном лазерно-дуговом воздействии на металлические материалы // «Лучевые технологии и применение лазеров». Материалы 6-й Международной конференции. Под ред. проф. Г.А. Туричина. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2009. С. 146–148.

9. **Туричин Г., Земляков Е., Поздеева Е., Норман Е.** Объемная конденсация в плазменном факеле при лазерно-дуговом воздействии на материалы // Фотоника. 2009. № 1. С. 12–15.

10. **Лойцянский Л.Г.** Ламинарный пограничный слой. М.: Физматлит, 1962. 480 с.

11. **Лойцянский Л.Г.** Механика жидкости и газа. 7-е изд., испр. М.: Дрофа, 2003. 840 с.

12. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Гидродинамика. Изд. 5-е. (Теоретическая физика. Т. VI). М.: Физматлит, 2001. 736 с.

13. **Dilthey U., Goumeniouk A., Lopota V., Turichin G.** Kinetic description of keyhole plasma in laser welding // Journal of Physics D: Applied Physics. 2000. Vol. 33. No. 21. Pp. 2747–2753.

14. **Кикоин А.К., Кикоин И.К.** Молекулярная физика. Изд. 2-е, перераб. М.: Наука, 1976. 480 с.

15. **Голубев И.Ф.** Вязкость газов и газовых смесей. М.: Физматгиз, 1959. 376 с.

16. **Batsanov S.S.** Van der Waals radii of elements // Inorganic Materials. 2001. Vol. 37. No. 9. Pp. 871–885.

17. CRC handbook of chemistry and physics. Lide D.R. (Editor). 90th ed. USA: American Chemical Society, 2009–2010. 2804 p.

18. **Sinha A., Bharadwaj K.K., Das D.** Instability of a low Reynolds number round jet // Proceedings of the 39-th National Conference on Fluid Mechanics and Fluid Power. 2012. December 13–15. SVNIT Surat. Gujarat, India. FMFP2012-160.

19. **Dmitrenko A.V.** Determination of critical Reynolds number in the jet based on the theory of stochastic equations and equivalence of measures // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1705. P. 012015.

20. **Абрамович Г.Н.** Прикладная газовая динамика. Изд. 5-е. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. литры, 1991. 600 с.

Статья поступила в редакцию 20.06.2021, принята к публикации 26.07.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ДУДОЛАДОВ Савелий Олегович – *студент бакалавриата Института металлургии, машиностроения и транспорта Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

sava2312@yandex.ru

ЛАРИОНОВ Николай Владимирович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого; старший научный сотрудник Санкт-Петербургского государственного морского технического университета, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

larionov.nickolay@gmail.com

REFERENCES

1. **Grigoryants A.G., Shiganov I.N., Misyurov A.I.,** Tekhnologicheskiye protsessy lazernoy obrabotki [Laser treatment technologies], Bauman University Publishing, Moscow, 2006 (in Russian).

2. **Gong J., Peng G., Li L., et al.,** Effect of plasma plume produced by vacuum laser welding on energy transmission, Opt. Laser Technol. 136 (April) (2021) 106744.

3. **Luo Y., Tang X., Lu F., et al.,** Effect of subatmospheric pressure on plasma plume in fiber laser welding, J. Mater. Process. Technol. 215 (January) (2015) 219–224.

4. **Xu W., Chen A., Wang Q., et al.,** Characteristics of laser-induced aluminum plasma plumes after increasing sample temperature and spatial confinement, J. Anal. At. Spectrom. 34 (11) (2019) 2288–2294.

5. **Turichin G.A., Grigor'ev A.M., Zemlyakov E.V., et al.,** Special features of formation of plasma torch under conditions of hybrid laser-arc welding, High Temperature. 44 (5) (2006) 647–655.

6. **Chen X., Wang H.-X.,** Prediction of the laser-induced plasma characteristics in laser welding: a new modelling approach including a simplified keyhole model, J. Phys. D: Appl. Phys. 36 (13) (2003) 1634–1643.

7. **Wang H.-X., Chen X.,** Three-dimensional modelling of the laser-induced plasma plume characteristics in laser welding, J. Phys. D: Appl. Phys. 36 (6) (2003) 628–639.

8. **Turichin G.A., Zemlyakov E.V.,** Kinetika formirovaniya nanoklasterov kondensirovannoy fazy v plazmennom fakele pri gibridnom lazerno-dugovom vozdeystvii na metallicheskiye materialy [Generation kinetics of condensed-phase nanoclusters in the plasma torch under hybrid laser-arc impact on metal materials], Proceedings of the 6-th International Conference "Beam Technologies and Laser Applica-

tion", Edited by Prof. G. Turichin. Polytechnical University Publishing, St. Petersburg (2009) 146–148 (in Russian).

9. **Turichin G., Zemlyakov E., Pozdeyeva E., Norman E.,** Volume condensation in the plasma torch at laser-arc materials impact, Photonics Russia. (1) (2009) 12–15 (in Russian).

10. **Loitsyanskii L.G.,** Boundary layer, National Advisory Committee for Aeronautics, Washington, 1956.

11. **Loitsyanskii L.G.,** Mechanics of liquids and gases (International Series of Monographs in Aeronautics and Astronautics, Vol. 6, Pergamon Press, Oxford, London, Edinburg, New York, 1966.

12. **Landau L.D., Lifshits E.M.,** Fluid mechanics, Course of theoretical physics, Vol. 6, Pergamon Press, Oxford, New York, 2013.

13. **Dilthey U., Goumeniouk A., Lopota V., Turichin G.,** Kinetic description of keyhole plasma in laser welding, J. Phys. D: Appl. Phys. 33 (21) (2000) 2747–2753.

14. **Kikoin A., Kikoin I.,** Molecular physics, Translated by G. Leib, Central Books Ltd, Dadenham, Great Britain,1979.

15. **Golubev I.F.,** Viscosity of gases and gas mixtures, A handbook, National Science Foundation, Washington, 1970.

16. **Batsanov S.S.,** Van der Waals radii of elements, Inorg. Mater. 37 (9) (2000) 871–885.

17. CRC handbook of chemistry and physics, By Lide D.R. (Editor), 90th ed., American Chemical Society, USA, 2009–2010.

18. **Sinha A., Bharadwaj K.K., Das D.,** Instability of a low Reynolds number round jet, Proc. 39^{-th} Nation. Conf. on Fluid Mech. & Fluid Power, 2012, December 13–15, SVNIT Surat. Gujarat, India (2012) FMFP2012-160.

19. **Dmitrenko A.V.,** Determination of critical Reynolds number in the jet based on the theory of stochastic equations and equivalence of measures, J. Phys. Conf. Ser. 1705 (2020) 012015.

20. **Abramovich G.N.,** Applied gas dynamics, 2^{-nd} edition, Project-Nerd Publishing, USA, 1973.

Received 20.06.2021, accepted 26.07.2021.

THE AUTHORS

DUDOLADOV Savelii O.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
sava2312@yandex.ru

LARIONOV Nikolay V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
St. Petersburg State Marine Technical University
3 Lotsmanskaya St., St. Petersburg, 190121, Russian Federation
larionov.nickolay@gmail.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14306
УДК 538.913

СРАВНЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СОРБЦИИ МЕТАНА В СИЛИКАЛИТЕ

Д.С. Куцова, Е.В. Богатиков, А.Н. Шебанов, Е.Н. Бормонтов

Воронежский государственный университет,
г. Воронеж, Российская Федерация

С целью оптимального выбора, в работе исследованы два вида силового поля для оценки возможности их применения к моделированию процессов поглощения и переноса в системе силикалит (синтетический цеолит) – метан; для этого использован метод молекулярной динамики, реализованный в пакете LAMMPS. Приоритетными критериями выбора были сохранение целостности структур при длительных расчетах, стабильность системы, возможность моделирования отдельного кластера цеолита большого размера без использования периодических граничных условий для размножения решетки в пространстве. Для потенциала, удовлетворившего этим требованиям, проведен расчет структурных, термодинамических и транспортных характеристик системы. Рассчитаны радиальная и угловая функции распределения частиц для различных пар и троек атомов для чистого цеолита и для двухкомпонетной системы силикалит – метан. Достигнуто хорошее согласие всех полученных характеристик с литературными данными численных и натурных экспериментов.

Ключевые слова: силикалит, цеолит ZSM-5, метан, молекулярная динамика, сорбция, потенциальная функция

Ссылка при цитировании: Куцова Д.С., Богатиков Е.В., Шебанов А.Н., Бормонтов Е.Н. Сравнение потенциальных функций для молекулярно-динамического моделирования сорбции метана в силикалите // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 79–93. DOI: 10.18721/JPM.14306

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creative-commons.org/licenses/by-nc/4.0/)

A COMPARISON OF POTENTIAL FUNCTIONS FOR MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF METHANE SORPTION IN THE SILICALITE

D.S. Kutsova, E.V. Bogatikov, A.N. Shebanov, E.N. Bormontov

Voronezh State University,
Voronezh, Russian Federation

In order to make the best choice, two types of a force field have been studied to access a possibility of application of one of them to simulation of adsorption and transport processes in the silicalite (synthetic zeolite)-methane system. To accomplish this, the molecular dynamic technique implemented in the LAMMPS package was used. Priority criteria of the choice were retention of the structure completeness during long simulation runs, the system's stability, the possibility of simulation of a separate good-sized zeolite cluster without using periodic boundary conditions for multiplying zeolite's lattice in space. For the force-field, which met these requirements, some structural, thermodynamic and transport characteristics of the system were calculated. Radial and angular distribution functions for different atom pairs and triplets were obtained for both the pure zeolite and the silicalite-methane system. A good agreement of all obtained characteristics with literature data of numerical and natural experiments was achieved.

Keywords: silicalite, ZSM-5 zeolite, methane, molecular dynamic, sorption, potential function

Citation: Kutsova D.S., Bogatikov E.V., Shebanov A.N., Bormontov E.N., A comparison of potential functions for molecular dynamic simulation of methane sorption in the silicalite, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 79–93. DOI: 10.18721/JPM.14306

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Цеолитные материалы – это сорбенты, которые сегодня широко используются в нефтяной, строительной и химической отраслях промышленности, медицине и сельском хозяйстве. Способность поглощать различные вещества обусловлена спецификой состава и каркасной структуры этих алюмосиликатов. Особый интерес представляют синтетические вещества, так как при их производстве можно получать образцы с четко воспроизводимыми характеристиками.

Силикалит – синтетический цеолит со структурой типа ZSM-5 – способен поглощать молекулы небольшого диаметра [1], в том числе углеводороды [2]. Такая особенность позволяет использовать силикалит в качестве материала газочувствительного слоя в сенсорах метана [3].

При разработке такого рода устройств необходимо знать закономерности процессов поглощения, испускания и транспорта сорбированных молекул. Изучение таких процессов на микроскопическом уровне особенно информативно, так как позволяет описать механизмы межчастичного взаимодействия и построить на их основе математические модели подобных явлений. В силу сложности геометрии цеолитных структур вместо классических теоретических методов все чаще используется компьютерное моделирование [4]. Метод молекулярной динамики (МД) хорошо зарекомендовал себя при моделировании самых разных физических процессов; в частности, с его помощью можно успешно исследовать поведение системы силикалит – метан при различных условиях [5 – 10].

Основным компонентом модели в методе МД выступает функция потенциального взаимодействия частиц. Выбор конкретного представления потенциала определяется кругом явлений, которые предполагается воспроизвести в ходе моделирования.

Цель настоящего исследования – выявить наиболее подходящий вид указанной функции для исследований сорбционно-десорбционных процессов в системе силикалит – метан.

Для решения поставленной задачи были выбраны две модели силового поля. Приоритетными критериями выбора выступали сохранение целостности структур при длительных расчетах, стабильность системы и возможность моделирования отдельного кластера цеолита, состоящего из большого числа элементарных ячеек, без использования периодических граничных условий для размножения решетки в пространстве. Кроме этого требовалось, чтобы конкретное силовое поле воспроизводило ряд основных характеристик системы и давало хорошее согласие с экспериментальными данными [11, 12].

Для рассматриваемой в работе системы основными оценочными параметрами выступали ее структурные, термодинамические и транспортные характеристики.

Параметры исследуемой системы

Объектом исследования служила система силикалит – метан. Каналы цеолита представлены двумя типами: синусоидальными и прямыми; они расположены вдоль кристаллографических направлений [100] и [010] соответственно. Каналы образованы 10-членными кольцами, диаметры которых составляют 5,1 × 5,5 Å для синусоидальных и 5,3 × 5,6 Å

для прямых типов. Каналы имеют взаимные пересечения, что обеспечивает возможность протекания трехмерной диффузии во внутреннем пространстве силикалита, несмотря на отсутствие каналов вдоль направления [001]. Максимальный диаметр сфер, вдоль которых может происходить диффузия, составляет 4,70 Å вдоль кристаллографического направления [100], 4,46 Å – вдоль направлений [010] и [001]. Для молекул метана критический диаметр составляет 3,8 Å, что позволяет им перемещаться во внутреннем пространстве силикалита во всех кристаллографических направлениях.

Исследование различных свойств системы проводилось для решеток разного размера, параметры которых приведены в табл. 1.

Таблица 1

Структурные параметры и состав цеолита ZSM-5 с разными размерами кристаллической решетки

Размер цеолита вдоль осей кристалла, в элем. ячейках	Размер цеолита вдоль оси, Å			Количество атомов		
	a	*b*	*c*	Общее	Si	O
1 × 1 × 1	20,09	19,738	26,284	288	96	192
1 × 1 × 2	20,09	19,738	26,284	576	192	384
2 × 2 × 2	40,18	39,476	65,709	2304	768	1536
5 × 5 × 5	100,45	98,689	26,284	36000	12000	24000

Параметры вычислительных экспериментов

Эксперименты в работе проводились путем компьютерных вычислений с применением метода молекулярной динамики (МД). Реализация расчетов осуществлялась в свободном пакете LAMMPS (*англ.* Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [13]. Во всех экспериментах использовались периодические граничные условия, радиус отсечки потенциала r_c составлял 12,5 Å. В зависимости от задачи применялись микроканонический (NVE) и канонический (NVT) ансамбли моделирования (N – количество вещества, V – объем, E – энергия, T – температура). Средняя температура системы соответствовала 298 K. Шаг моделирования $dt = 1$ фс, количество шагов – от 1 до 2 млн. Начальное значение скоростей подчинялось нормальному распределению для среднего значения температуры 298 K. Перед запуском основных расчетов выполнялась процедура минимизации энергии методом сопряженных градиентов. После достижения желаемой точности энергии, проводилась процедура уравновешивания системы – 100 пс расчетов (10^5 шагов моделирования) в NVE-ансамбле с использованием термостата Ланжевена для достижения системой температуры $T = 298$ K.

Проблемы модели силового поля

Процессы поглощения и переноса молекул внутри вещества сорбента часто хорошо описываются потенциалом, представленным в виде аддитивных функций межчастичного расстояния:

$$U(r) = U_{inter}(r) + U_{intra}(r), \tag{1}$$

где $U_{inter}(r)$ и $U_{intra}(r)$ описывают меж- и внутримолекулярное взаимодействия соответственно.

Ввиду неполярности молекулы метана и отсутствия катионов в решетке силикалита, молекула силикалита в целом электронейтральна, поэтому межмолекулярное взаимодействие несвязанных частиц можно описать потенциалом Леннарда – Джонса для взаимодействия несвязанных частиц, без использования потенциала Кулона.

В настоящей работе нами использовался потенциал Леннарда – Джонса в форме 12-6:

$$U_{inter}(r) = \sum 4\varepsilon_{ij}\left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{6}\right], \tag{2}$$

где r_{ij}, Å, – расстояние между атомами i и j; ε_{ij}, ккал/моль, – характеристическая энергия взаимодействия i-го и j-го атомов; σ_{ij}, Å, – характеристическая длина такого взаимодействия.

Внутримолекулярное взаимодействие часто описывается аддитивным потенциалом, состоящим из двух-, трех- и четырехчастичных членов:

$$U_{intra}(r) = U_{stratch}(r) + U_{bend}(r) + U_{tor}(\varphi), \tag{3}$$

$$U_{stretch}(r) = \sum k_r\left(r_{ij} - r_0\right)^2, \tag{4}$$

$$U_{bend}(\theta) = \sum k_\vartheta\left(\theta_{ijk} - \theta_0\right)^2, \tag{5}$$

$$U_{tor}(\varphi) = \sum k_\varphi\left[1 + d\cos\left(n\varphi_{ijkl}\right)\right]. \tag{6}$$

Потенциалы $U_{stretch}(r)$ и $U_{bend}(\theta)$ являются гармоническими. Они описывают отклонение длины связи r между парой атомов относительно равновесного значения r_0 и угла θ, образованного тремя атомами, от своего равновесного значения θ_0. Член $U_{tor}(\varphi)$ – торсионный потенциал, являющийся периодическим и моделирующий изменение величины двугранного угла φ, образованного четырьмя атомами одной молекулярной структуры. Параметры потенциалов k_r, k_θ, k_φ – константы жесткости линейной, угловой и двугранной связей соответственно; $d = \pm 1$ (зависит от конкретной реализации потенциала); n – коэффициент симметрии, представляется целым числом.

Первая модель силового поля представлена формулами (1) – (6) с коэффициентами, приведенными в табл. 2. В константы жесткости здесь уже включен множитель 1/2. Для атомов разного сорта коэффициенты ε и σ определялись по формулам среднего геометрического и среднего арифметического соответственно (правило смешивания Лоренца – Бертло).

В литературе обычно рассматриваются образцы цеолита, состоящие из 2 – 8 элементарных ячеек [6 – 8]; авторы используют периодические граничные условия, при которых границы ячейки моделирования совпадают с границами решетки, чтобы обеспечить бесконечную протяженность цеолитного каркаса в пространстве.

Чтобы воспроизвести процессы сорбции цеолитом из состояния полной свободы от молекул сорбата до максимальной заполненности при заданной температуре, а также дальнейшей десорбции до минимально возможной заполненности, нами рассматривалась система следующего состава и конфигурации. Цеолит типа ZSM-5 был представлен решеткой размером 5 × 5 × 5 элементарных ячеек, и в начальный момент времени он окружен 10 тыс. молекул ме-

Таблица 2

Параметры функции взаимодействия частиц (1) – (6)

Вещество	Атом	σ, Å	ε, ккал/моль
ZSM-5	Si	4,009	0,1274
	O	2,890	0,1547
CH_4	C	3,400	0,05565
	H	2,963	0,06618
–	Связи	k_r, ккал/(моль·Å^2)	r_0, Å
ZSM-5	O – Si	298,75	1,649
CH_4	C – H	170	1,09
–	–	k_θ, ккал/(моль·рад^2)	θ_0, град
ZSM-5	O – Si – O	69,0897	109,47
	Si – O – Si	5,427	141,00
CH_4	H – C – H	17,5	109,50
–	–	k_φ, ккал/моль	$d = +1$
ZSM-5	Si – O – Si – O	–0,35	$n = 3$

П р и м е ч а н и е. Все параметры, относящиеся к цеолиту ZSM-5, взяты из работы [14], к метану CH_4 – из работы [15].

тана. В такой системе суммарное количество частиц на два порядка превосходит количество стандартно рассматриваемых.

Для данной системы применялась первая модель силового поля. В ходе экспериментальных расчетов взаимодействия частиц было обнаружено нестабильное поведение каркаса цеолита, при котором слишком большая амплитуда колебаний атомов решетки приводила к ее последующему распаду. Такое поведение было зафиксировано на длительных временах моделирования – 2 млн. шагов (при использовании NVT-ансамбля).

Второй потенциал состоит из членов (1) – (5). Его параметры совпадают со значениями, приведенными в табл. 2, за исключением констант, которые описывают связывающие потенциалы цеолита. Для них использовались следующие значения [16]:

k_r (Si – O) = 298,53 ккал/(моль·Å^2),

r_0 (Si – O) = 1,59 Å,

k_θ (O – Si – O) = 69,03 моль·рад^2,

θ_0 (O – Si – O) = 109,5 °,

k_θ (Si – O – Si) = 9,06 моль·рад^2,

θ_0 (Si – O – Si) = 149 °.

В таком виде силового поля уменьшено взаимное влияние атомов за счет ограничения моделируемых степеней свободы, а именно – путем исключения из рассмотрения четырехчастичного потенциала взаимодействия. При этом реалистичность описания взаимодействия частиц системы сохраняется. Данная потенциальная функция носит название упрощенного общего валентного силового поля и использовалась в статье [16], где авторы изучали воспроизведение структурных характеристик нескольких типов цеолитов, в том числе силикалита, а также их инфракрасных и рамановских спектров.

При проведении аналогичных расчетов с использованием второго потенциала, проблем с сохранением целостности системы выявлено не было [17]. С учетом того, что в работе интерес представляют сорбционно-десорбционные и транспортные процессы в многокомпонентной системе, было необходимо убедиться не только в сохранении структуры решетки, но также в реалистичности динамики взаимодействия между частицами сорбата и сорбента внутри решетки сорбента, а также в воспроизведении процессов переноса вещества. Поэтому был проведен комплексный анализ данного потенциала для оценки возможности его применения в системе силикалит – метан, включающий расчет ее структурных, термодинамических и транспортных характеристик.

Расчет структурных характеристик чистого силикалита

В качестве оцениваемой структурной характеристики системы частиц выбраны радиальная (RDF) и угловая (ADF) функции распределения частиц в системе (*англ.* Radial and Angle Distribution Functions). Эти параметры оценивались как для чистой решетки силикалита, так и для двухкомпонентной системы силикалит – метан.

Расчет RDF и ADF был проведен отдельно для решетки силикалита разных размеров (в элементарных ячейках): 1 × 1 × 2, 2 × 2 × 2 и 5 × 5 × 5. Состав указанных образцов силикалита представлен в табл. 1. Поскольку топология силикалита представлена сочленением тетраэдрических комплексов из кислорода и кремния, аргументами функций распределения выступали следующие пары и тройки атомов:

$$\mathrm{Si-O,\ Si-O-Si,\ O-Si-O.}$$

В данной серии расчетов различались только размеры образца цеолита ZSM-5, который в каждом эксперименте помещался в ячейку моделирования с границами, соответствующими границам цеолита. Использовался микроканонический ансамбль моделирования NVE.

Радиальная функция распределения частиц была построена для радиуса отсечения 10 Å с точностью 0,01 Å. Функция $g(r)$ для атомов Si и O рассчитывалась в предположении, что кремний является центральным атомом. Угловые функции распределения для комбинаций атомов Si – O – Si и O – Si – O были построены с точностью 1 °.

Графики, полученные в результате расчетов, имеют характерные пики, соответствующие наиболее вероятному взаимному расположению атомов в структуре. Для радиальной функции (RDF) пар частиц Si – O пик на ее графике острый и узкий, что соответствует высокоупорядоченной системе. Его максимум приходится на расстояние между частицами, равное 1,59 Å (рис. 1). Данное значение согласуется со структурными данными, представленными в базе данных цеолитных материалов [18].

Для угловой функции распределения частиц (ADF), в случае троек атомов Si – O – Si и O – Si – O, максимумы соответствуют углам $\theta = 145{,}1^{\circ}$ и $109{,}5^{\circ}$ соответственно. Значения угла O – Si – O, образующего тетраэдрический комплекс, получены в работах [19, 20] и лежат в диапазонах 107,9 – 110,9° и 107,1 – 111,5° соответственно. Расположение первого пика на графике распределения троек Si – O – Si совпадает с точностью до целых с позицией пика в диапазоне 145,7 – 177,7°, полученной в экспериментальной работе [20], в то время как значения из статьи [19], в которой функции распределения рассчитывались теоретически, имеют гораздо больший разброс: от 140 до 180°. Отсюда можно заключить, что для разных размеров образцов силикалита стабильность и целостность решетки сохраняется.

Ряд наших численных экспериментов был проведен для оценки влияния границ моделирования на относительное положение решетки. А именно, границы либо устанавливались по габаритам моделируемой ячейки, либо брались с превышением ее размеров в 3, 5 и 7 раз

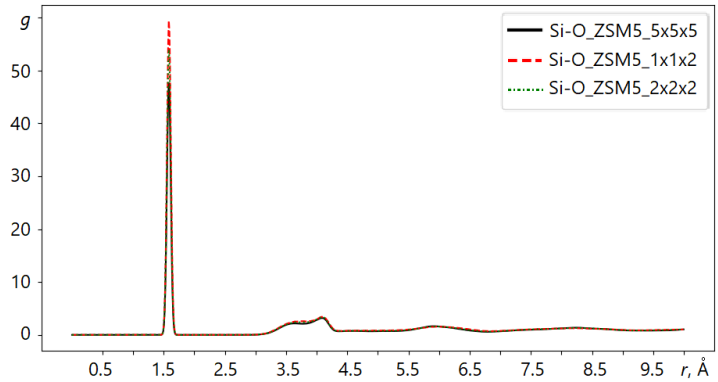


Рис. 1. Радиальная функция распределения (RDF) пар частиц Si – O для цеолита ZSM-5 с размерами кристаллической решетки 1 × 1 × 2, 2 × 2 × 2 и 5 × 5 × 5 элементарных ячеек

соответственно. Поскольку было показано, что размеры решетки силикалита не влияют на воспроизведение его структурных характеристик, нами рассматривался образец ZSM-5 лишь с размером кристаллической решетки 2 × 2 × 2 элементарные ячейки.

Расчетные результаты для функций RDF и ADF в случаях всех возможных двух- и трехчастичных взаимодействий показали, что положение границ моделирования относительно исследуемой структуры не влияет на позиции пиков. Наблюдались лишь изменения высоты максимумов на графиках функций, что обусловлено особенностями расчета RDF и ADF, а именно – их зависимостью от общего объема системы. Следовательно, можно проводить моделирование кластера цеолита, расположенного вдали от границы ячейки моделирования, без структурных искажений решетки.

Расчет структурных характеристик системы силикалит – метан

Для тестирования потенциала взаимодействия решетки силикалита с поглощенными молекулами метана были подготовлены следующие системы: силикалит размером 1 × 1 × 2 элементарные ячейки с разным количеством молекул метана внутри: 8, 16, 24 и 32, что соответствует одной, двум, трем и четырем молекулам в расчете на пересечение каналов в силикалите. Такие размеры выбраны для сравнения с литературными данными [6 – 8].

В каждом случае цеолит ZSM-5 помещался в центр ячейки моделирования. Молекулы метана распределялись внутри цеолита случайным образом с помощью утилиты Packmol. Использовался микроканонический ансамбль моделирования (NVE). Аналогично случаю чистого силикалита, радиус отсечения и точность расчета радиальной функции распределения RDF частиц составили 10 и 0,01 Å соответственно.

Для оценки распределения молекул метана в цеолите рассчитывалась радиальная функция распределения RDF для пар атомов O – C, так как атомы углерода и кислорода являются центральными для молекулы метана и тетраэдрического комплекса решетки цеолита соответственно.

Полученный график имеет три пика. Первый приходится на диапазон расстояний между молекулами от 3,9 до 4,1 Å, второй соответствует диапазону 5,7 – 5,9 Å, третий лежит в интервале 8,1 – 8,3 Å. Такие величины близки к значениям радиусов каналов силикалита, что указывает на предпочтительное расположение молекул в центре каналов. Небольшое различие в положении пиков для разной степени загрузки цеолита вполне характерно и объясняется смещением минимума энергии при изменении количества поглощенных молекул. Наиболее

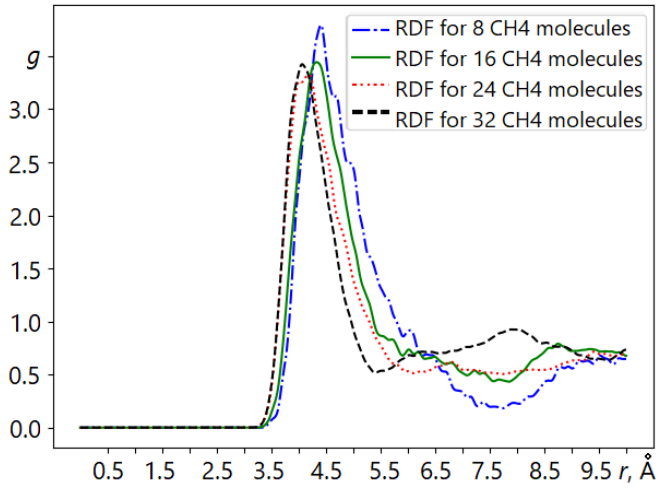


Рис. 2. Радиальная функция распределения пар атомов C – C для различного количества молекул метана внутри кристаллической решетки цеолита ZSM-5 размером 1 × 1 × 2 элементарные ячейки

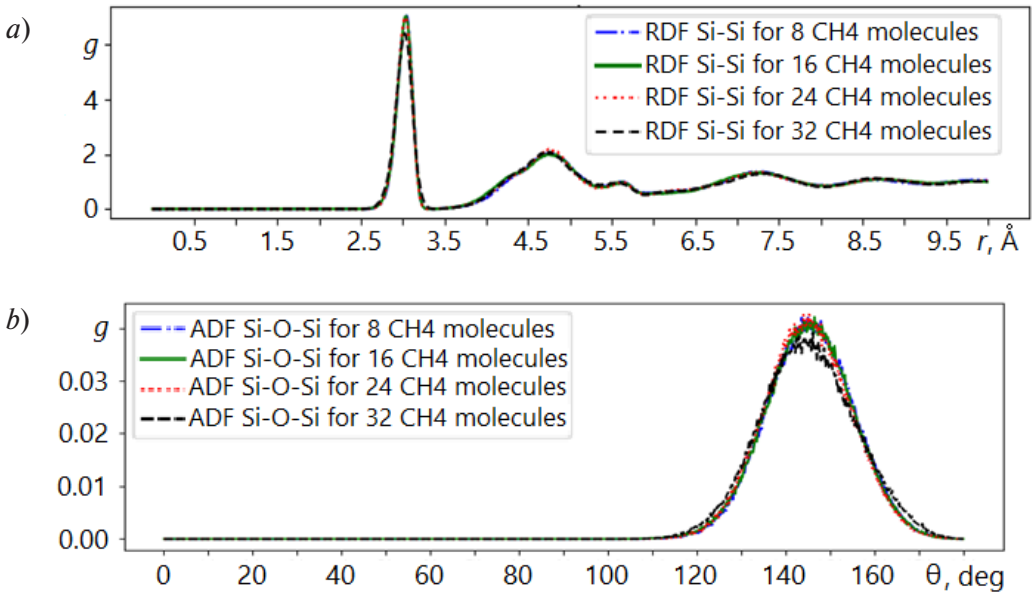


Рис. 3. Радиальная функция распределения (RDF) пары атомов Si – Si (*a*) и угловая функция распределения (ADF) тройки атомов Si – O – Si (*b*) с различным количеством молекул метана внутри кристаллической решетки цеолита ZSM-5 размером 1 × 1 × 2 элементарные ячейки

заметно пики сдвигаются в сторону уменьшения расстояния при загрузках, близких к предельным. Вид кривых согласуется с данными, полученными ранее в результате проведения компьютерного моделирования [6 – 8].

Радиальная функция распределения для пары атомов C – C (рис. 2) вычислялась для того, чтобы оценить особенности взаимного расположения молекул метана во внутреннем пространстве цеолита. На рис. 2 видно, что основной пик лежит в диапазоне от 4,1 до 4,4 Å. Смещение его позиции в сторону меньших расстояний происходит при увеличении заполнения цеолита молекулами адсорбата. Полученный нами результат согласуется с данными, полученными методом молекулярной динамики в работе [7]. Расположение первого пика

сильно зависит от концентрации молекул метана CH_4, так как значение радиальной функции распределения, согласно данным статьи [7], существенным образом определяется леннард-джонсоновским взаимодействием между его молекулами.

Помимо вышеизложенных данных, были рассчитаны RDF и ADF для групп атомов метана C – H и H – C – H, а также для комбинаций атомов силикалита Si – O, O – O, Si – Si, O – Si – O, Si – O – Si. Единичные пики функций для атомов метана имеют острую форму, а их положение совпадает с равновесным значением длины связи 1,09 Å и угла 109,5 °. Это позволяет сделать вывод, что гармонический потенциал с используемыми параметрами хорошо воспроизводит структуру молекулы метана.

Кривые зависимостей $g(r)$ и $g(\theta)$ для атомов цеолита, примеры которых приведены на рис. 3, показывают, что при рассмотренных величинах загруженности силикалита молекулами метана не происходит каких-либо структурных изменений в каркасе цеолита, а сам факт наличия молекул адсорбата не искажает топологию решетки. Таким образом, используемые потенциалы моделирования обеспечивают стабильность структуры решетки цеолита при протекании сорбционных процессов.

Расчет теплоты адсорбции

Корректность воспроизведения термодинамических свойств системы силикалит – метан оценивалась путем расчета теплоты адсорбции. Использовался метод, основанный на вычислении разности энергий между системой сорбент + единственная сорбированная молекула и системой чистый сорбент в каноническом ансамбле (NVT) [21]. Указанное вычисление теплоты адсорбции ΔH проводилось по следующей формуле:

$$-q = \Delta H = \langle U_1 \rangle - \langle U_0 \rangle - \langle U_g \rangle - \frac{1}{\beta}, \tag{7}$$

где $\beta = 1/(k_B T)$ (k_B – постоянная Больцмана); U_0, ккал/моль, – энергия сорбента в отсутствие молекулы-гостя; U_1, ккал/моль, – полная энергия сорбента с одной молекулой-гостем; U_g, ккал/моль, – энергия изолированной молекулы-гостя в отсутствие сорбента; обозначение $\langle \cdots \rangle$ соответствует усреднению по ансамблю при постоянных температуре и объеме.

Величина U_g зависит только от температуры T и может быть вычислена единожды. Уравнение (7) применяется в приближении нулевой заполненности, что подразумевает идеальное поведение газа.

Указанный метод требует проведения моделирования разных систем для получения величин энергий, используемых в формуле (7). Поэтому для расчетов использовались следующие системы:

силикалит размером 1 × 1 × 2 элементарные ячейки с одной молекулой метана внутри;

силикалит того же размера в отсутствие других молекул;

одна молекула метана, помещенная в ячейку моделирования, соответствующую по размерам используемому образцу силикалита.

Минимальное количество молекул метана соответствует требованию низкой степени загрузки цеолита (приближение нулевой заполненности). Границы ячейки моделирования соответствуют границам ячейки цеолита ZSM-5 указанного размера (остаются неизменными и для отдельной молекулы метана). Молекула метана помещалась в центр ячейки моделирования, совпадающий (с точностью 2 Å) с расположением прямого канала цеолита и большой полости. Согласно исследованиям [7, 9, 22], такое положение является энергетически выгодным для системы метан – силикалит. Конфигурации создавались с помощью утилиты Packmol. Моделирование проводилось в каноническом ансамбле NVT. С целью минимиза-

ции возможных неточностей вычислений проводилась серия статистических расчетов: для каждой системы по 5 экспериментов, различающихся начальными условиями (значениями скоростей).

Рассчитанное значение теплоты адсорбции составило –6,7 ккал/моль. В работах [7, 9] применялся вычислительный метод, аналогичный использованному в данной работе. Полученные авторами значения составили –4,2 и –5,8 ккал/моль соответственно. С помощью экспериментальных процедур, таких как калориметрический метод [22, 23] и метод вакуумного микробаланса в сочетании с использованием уравнения Клаузиуса – Клапейрона [23], были получены значения –5,0, –6,1 и –6,7 ккал/моль. Такой широкий диапазон значений величины объясняется применением разных методик, которые различаются своей точностью и имеют ряд особенностей, способных влиять на результат. Таким образом, рассчитанное в данной работе значение теплоты адсорбции согласуется с литературными данными и находится ближе к границе значений, полученных в натурном эксперименте. Следовательно, используемый потенциал силового поля корректно воспроизводит термодинамические характеристики системы силикалит – метан.

Расчет коэффициента самодиффузии

Стандартным параметром, характеризующим транспортные явления в системах сорбент – сорбат, выступает коэффициент самодиффузии сорбата в порах сорбента. В отличие от обычной диффузии, самодиффузия протекает в условиях равновесия в системе, в частности, без наличия градиента концентраций диффундирующего вещества. В настоящей работе был найден коэффициент самодиффузии D_s метана в силикалите с помощью метода, основанного на связи диффузии со среднеквадратическим отклонением:

$$D_s = \frac{1}{2dN}\lim_{\Delta t\to\infty}\frac{d}{dt}\left\langle\left(\sum_{i=1}^{N} r_i\left(t+\Delta t\right)-r_i\left(t\right)\right)^2\right\rangle, \tag{8}$$

где r_i, Å, – положение частицы i в определенный момент времени; t, с, – время; N – количество молекул; d – размерность системы.

Данный метод является общепринятым и обеспечивает хорошее согласие результатов с экспериментальными данными.

В эксперименте использовалась система, состоящая из силикалита размером 1 × 1 × 2 элементарные ячейки с восемью молекулами метана внутри, что соответствует одной молекуле на пересечение. Молекулы размещались в цеолите случайным образом с помощью утилиты Packmol. Границы ячейки моделирования совпадали с границами решетки силикалита. Сохранение энергии в системе обеспечивалось за счет применения микроканонического ансамбля NVE.

Коэффициент самодиффузии метана в силикалите для указанных параметров системы определялся на временном промежутке от $2\cdot10^5$ до 10^6 шагов для гарантированного достижения стабильного режима течения диффузии в системе.

Полученное значение коэффициента D_s составило $1{,}1\cdot10^{-10}$ м^2/с. С применением экспериментальных техник расчета D_s в работах [24 – 26] были получены значения $1{,}1\cdot10^{-8}$, $1{,}1\cdot10^{-10}$ и $1{,}3\cdot10^{-10}$ м^2/с, при этом использовались метод ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля (ИГМП), мембранная техника и метод импульсной газовой хроматографии, соответственно. В работах [5, 27], где применялись компьютерные вычисления методом МД, диапазон полученных значений составил от $9{,}0\cdot10^{-10}$ до $1{,}1\cdot10^{-8}$ м^2/с. Следовательно, найденное нами значение коэффициента самодиффузии метана в силикалите находится в согласии с литературными данными, полученными как в натурном эксперименте, так и в результате

компьютерного моделирования. Такая малая величина коэффициента самодиффузии говорит о преобладании конфигурационного механизма переноса вещества в равновесных условиях, что характерно для пористых веществ, в которых размеры каналов сопоставимы с размерами поглощенных молекул.

Заключение и выводы

Наиболее вероятные взаимные расположения исследованных пар и троек атомов, рассчитанные через их радиальные и угловые функции распределения соответственно, дают согласие с теоретическими и экспериментальным значениями (в пределах погрешности). Это относится как к структуре решетки силикалита, так и к молекуле метана. Далее, в работе показано, что положение границ моделирования относительно решетки цеолита не влияет на целостность структур, а наличие молекул метана во внутреннем пространстве кристаллической решетки вносит лишь небольшие искажения при использовании предельных величин заполненности сорбента. Это подтверждает пригодность используемой в моделировании потенциальной функции взаимодействия между атомами решетки силикалита и метана. Кроме того, воспроизведение положения пиков на графиках функций RDF и ADF исключает влияние размеров ячейки моделирования и подтверждает стабильность выбранного потенциала моделирования с использованными параметрами.

Для данного силового поля показана возможность моделирования достаточно большого образца силикалита при положении границ моделирования, значительно превышающих границы цеолита.

Значение теплоты адсорбции метана из силикалита, рассчитанное в работе, составило –6,7 ккал/моль, что близко к известной, экспериментально полученной величине и находится в согласии с данными компьютерных вычислений. Таким образом, используемый потенциал силового поля хорошо воспроизводит термодинамические свойства рассматриваемой системы.

В данной работе была рассчитана такая важная характеристика транспортных процессов, как коэффициент самодиффузии D_s поглощенного вещества для системы силикалит – метан. Полученное значение $1{,}1 \cdot 10^{-10}$ м^2/с не противоречит таковым, приведенным в научных статьях, и позволяет заключить, что для нормальных условий и заполненности цеолита, равной четырем молекулам на элементарную ячейку, транспортные процессы протекают преимущественно по конфигурационному механизму.

Таким образом, рассчитанные структурные, термодинамические и транспортные характеристики системы силикалит – метан с использованием потенциала упрощенного общего валентного силового поля согласуются с литературными данными, что позволяет сделать вывод о корректности использования выбранной нами потенциальной функции для моделирования процессов сорбции и десорбции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Berezovsky V., Öberg S.** Computational study of the CO adsorption and diffusion in zeolites: validating the Reed – Ehrlich model // Adsorption. 2018. Vol. 24. No. 4. Pp. 403–413.

2. **Gautam S., Liu T., Cole D.** Sorption, structure and dynamics of CO_2 and ethane in silicalite at high pressure: a combined Monte Carlo and molecular dynamics simulation study// Molecules. 2019. Vol. 24. No. 1. P. 99.

3. **Куцова Д.С., Богатиков Е.В., Шебанов А.Н., Смирнова К.Г., Глушков Г.И.** Анализ состава сложной газовой смеси сенсором на основе цеолита // Нано- и микросистемная техника. 2016. Т. 18. № 9. С. 589–591.

4. **Matera S., Schneider W.F., Heyden A., Savara A.** Progress in accurate chemical kinetic modeling, simulations and parameter estimation for heterogeneous catalysis // ACS Catalysis. 2019. Vol. 9. No. 8. Pp. 6624–6647.

5. **Goodbody S.J., Watanabe K., MacGowan D., Walton J.P.R.B., Quirke N.** Molecular simulation of methane and butane in silicalite // J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1991. Vol. 87. No. 13. Pp. 1951–1958.

6. **Bussai C., Fritzsche S., Haberlandt R., Hannongbua S.** A molecular dynamic (MD) study of methane in silicalite-1: A novel Møller – Plesset potential energy surface // Studies in Surface Science and Catalysis. Book Series. Proc. of the 14-th Intern. Zeolite Conf.; 25 – 30 April, 2000. Cape Town, South Africa. 2004. Vol. 154. Part B. Pp. 2104–2109.

7. **Nicholas J.B., Trouw F.R., Mertz J.E., Iton L.E., Hopfinger A.J.** Molecular dynamics simulation of propane and methane in silicalite // J. Phys. Chem. 1993. Vol. 97. No. 16. Pp. 4149–4163.

8. **Demontis P., Suffritti G.B., Fois E.S., Quartieri S.** Molecular dynamics studies on zeolites. 6. Temperature dependence of diffusion of methane in silicalite // J. Phys. Chem. 1992. Vol. 96. No. 3. Pp. 1482–1490.

9. **June R.L., Bell A.T., Theodorou D.N.** Molecular dynamics study of methane and xenon in silicalite // J. Phys. Chem. 1990. Vol. 94. No. 21. Pp. 8232–8240.

10. **Cheng X., Li Z., He Y.-L.** Effect of temperature and pore structure on the release of methane in zeolite nanochannels // RSC Advances. 2019. Vol. 9. No. 17. Pp. 9546–9554.

11. **Van Gunsteren W.F., Daura X., Hansen N., Mark A.E., Oostenbrink C., Riniker S., Smith L.J.** Validation of molecular simulation: an overview of issues // Angewandte Chemie International Edition. 2018. Vol. 57. No. 4. Pp. 884–902.

12. **Merz P.T., Shirts M.R.** Testing for physical validity in molecular simulations // PLoS ONE. 2018. Vol. 13. No. 9. Pp. 1–22.

13. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Режим доступа: https://lammps.sandia.gov (Дата обращения: 06.05.2016).

14. **Choi S.G., Lee S.H.** Preliminary molecular dynamics simulation studies of H-Y zeolite in a non-rigid zeolite framework // Bull. Korean Chem. Soc. 1999. Vol. 20. No. 4. Pp. 445–450.

15. **Vela S., Huarte-Larrañaga F.** A molecular dynamics simulation of methane adsorption in single walled carbon nanotube bundles // Carbon. 2011. Vol. 49. No. 13. Pp. 4544–4553.

16. **Smirnov K.S., Bougeard D.** Molecular dynamics study of the vibrational spectra of siliceous zeolites built from sodalite cages // J. Phys. Chem. 1993. Vol. 97. No. 37. Pp. 9434–9440.

17. **Куцова Д.С., Богатиков Е.В., Шебанов А.Н., Куликов Д.Г., Бормонтов Е.Н.** Моделирование процессов сорбции-десорбции метана силикалитом // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2017. Т. 13. № 5. С. 108–112.

18. **Baerlocher Ch., McCusker L.B.** Database of zeolite structures. Режим доступа: http://www.iza-structure.org/databases (Дата обращения 20.05.2016).

19. **Astala R., Auerbach S.M., Monson P.A.** Density functional theory study of silica zeolite structures: stabilities and mechanical properties of SOD, LTA, CHA, MOR, and MFI // J. Phys. Chem. B. 2004. Vol. 108. No. 26. Pp. 9208–9215.

20. **Van Koningsveld H.** High-temperature (350 K) orthorhombic framework structure of zeolite H-ZSM-5 // Acta Cryst. Section B. 1990. Vol. B46. No. 6. Pp. 731–735.

21. **Vlugt T.J.H., Garcia-Perez E., Dubbeldam D., Ban S., Calero S.** Computing the heat of adsorption using molecular simulations: The effect of strong coulombic interaction // J. Chem. Theory Comput. 2008. Vol. 4. No. 6. Pp. 1007–1118.

22. **Vigne-Meader F., Auroux A.** Potential maps of methane, water and methanol in silicalite // J. Phys. Chem. 1990. Vol. 94. No. 1. Pp. 316–322.

23. **Papp H., Hinsen W., Do N.T., Baerns M.** The adsorption on methane on H-ZSM-5 zeolite // Thermochimica Acta. 1984. Vol. 82. No. 1. Pp. 137–148.

24. **Caro J., Bulow M., Schirmer W., Karger J., Heink W., Preifer H., Zdanov S.P.** Microdynamics of methane, ethane and propane in ZSM-5 type zeolites // J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1: Phys. Chem. in Cond. Phases. 1985. Vol. 81. No. 10. Pp. 2541–2550.

25. **Hayhurst D.T., Paravar A.R.** Diffusion of C_1 to C_5 normal paraffins in silicalite // Zeolites. 1988. Vol. 8. No. 1. Pp. 27–29.

26. **Chiang A.S., Dixon A.G., Ma Y.H.** The determination of zeolite crystal diffusivity by gas chromatography – II. Experimental // Chem. Eng. Sci. 1984. Vol. 39. No. 10. Pp. 1461–1468.

27. **June R.L., Bell A.T., Theodorou D.N.** Molecular dynamics studies of butane and hexane in silicalite // J. Phys. Chem. 1992. Vol. 96. No. 3. Pp. 1051–1060.

Статья поступила в редакцию 30.03.2021, принята к публикации 03.06.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КУЦОВА Дарья Сергеевна – *аспирантка кафедры физики полупроводников и микроэлектроники Воронежского государственного университета, г. Воронеж, Российская Федерация.*

394006, Российская Федерация, г. Воронеж, Университетская пл., 1

potanina.ds@gmail.com

БОГАТИКОВ Евгений Васильевич – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и микроэлектроники Воронежского государственного университета, г. Воронеж, Российская Федерация.*

394006, Российская Федерация, г. Воронеж, Университетская пл., 1.

evbogatikov@yandex.ru

ШЕБАНОВ Александр Николаевич – *ассистент кафедры физики полупроводников и микроэлектроники Воронежского государственного университета, г. Воронеж, Российская Федерация.*

394006, Российская Федерация, г. Воронеж, Университетская пл., 1.

anshebanov@hotmail.com

БОРМОНТОВ Евгений Николаевич – *доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики полупроводников и микроэлектроники Воронежского государственного университета, г. Воронеж, Российская Федерация.*

394006, Российская Федерация, г. Воронеж, Университетская пл., 1.

me144@phys.vsu.ru

REFERENCES

1. **Berezovsky V., Öberg S.,** Computational study of the CO adsorption and diffusion in zeolites: validating the Reed – Ehrlich model, Adsorption. 24 (4) (2018) 403–413.

2. **Gautam S., Liu T., Cole D.,** Sorption, structure and dynamics of CO_2 and ethane in silicalite at high pressure: a combined Monte Carlo and molecular dynamics simulation study, Molecules. 24 (1) (2019) 99.

3. **Kutsova D.S., Bogatikov E.V., Shebanov A.N., et al.,** Analysis of the composition of a complex gas mixture by a sensor based on zeolite, Journal of Nano- and Microsystem Technique. 9 (2016) 591–592.

4. **Matera S., Schneider W.F., Heyden A., Savara A.,** Progress in accurate chemical kinetic modeling, simulations and parameter estimation for heterogeneous catalysis, ACS Catalysis. 9 (8) (2019) 6624–6647.

5. **Goodbody S.J., Watanabe K., MacGowan D., et al.,** Molecular simulation of methane and butane in silicalite, J. Chem. Soc., Faraday Trans. 87 (13) (1991) 1951–1958.

6. **Bussai C., Fritzsche S., Haberlandt R., Hannongbua S.,** A molecular dynamic (MD) study of methane in silicalite-1: A novel Møller – Plesset potential energy surface, Studies in Surface Science and Catalysis, Book Series, Proc. of the 14-th Intern. Zeolite Conf.; 25 – 30 April, 2000, Cape Town, South Africa. 154 (Part B) (2004) 2104–2109.

7. **Nicholas J.B., Trouw F.R., Mertz J.E., et al.,** Molecular dynamics simulation of propane and methane in silicalite, J. Phys. Chem. 97 (16) (1993) 4149–4163.

8. **Demontis P., Suffritti G.B., Fois E.S., Quartieri S.,** Molecular dynamics studies on zeolites. 6. Temperature dependence of diffusion of methane in silicalite, J. Phys. Chem. 96 (3) (1992) 1482–1490.

9. **June R.L., Bell A.T., Theodorou D.N.,** Molecular dynamics study of methane and xenon in silicalite, J. Phys. Chem. 94 (21) (1990) 8232–8240.

10. **Cheng X., Li Z., He Y.-L.,** Effect of temperature and pore structure on the release of methane in zeolite nanochannels, RSC Advances. 9 (17) (2019) 9546–9554.

11. **Van Gunsteren W.F., Daura X., Hansen N., et al.,** Validation of molecular simulation: an overview of issues, Angewandte Chemie International Edition. 57 (4) (2018) 884–902.

12. **Merz P.T., Shirts M.R.,** Testing for physical validity in molecular simulations, PLoS ONE. 13 (9) (2018) 1–22.

13. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Access mode: https://lammps.sandia.gov, Application date: May 6, 2016.

14. **Choi S.G., Lee S.H.,** Preliminary molecular dynamics simulation studies of H-Y zeolite in a non-rigid zeolite framework, Bull. Korean Chem. Soc. 20 (4) (1999) 445–450.

15. **Vela S., Huarte-Larrañaga F.,** A molecular dynamics simulation of methane adsorption in single walled carbon nanotube bundles, Carbon. 49 (13) (2011) 4544–4553.

16. **Smirnov K.S., Bougeard D.,** Molecular dynamics study of the vibrational spectra of siliceous zeolites built from sodalite cages, J. Phys. Chem. 97 (37) (1993) 9434–9440.

17. **Kutsova D.S., Bogatikov E.V., Shebanov A.N., et al.,** Simulation of methane sorption and desorption in silicalite, Bulletin of Voronezh State Technical University. 13 (5) (2017) 108–112 (in Russian).

18. **Baerlocher Ch., McCusker L.B.,** Database of zeolite structures, Access mode: http://www.iza-structure.org/databases, Application date: May, 20, 2016.

19. **Astala R., Auerbach S.M., Monson P.A.,** Density functional theory study of silica zeolite structures: stabilities and mechanical properties of SOD, LTA, CHA, MOR, and MFI, J. Phys. Chem. B. 108 (26) (2004) 9208–9215.

20. **Van Koningsveld H.** High-temperature (350 K) orthorhombic framework structure of zeolite H-ZSM-5, Acta Cryst. B46 (6) (1990) 731–735.

21. **Vlugt T.J.H., Garcia-Perez E., Dubbeldam D., et al.,** Computing the heat of adsorption using molecular simulations: The effect of strong coulombic interaction, J. Chem. Theory Comput. 4 (6) (2008) 1007–1118.

22. **Vigne-Meader F., Auroux A.,** Potential maps of methane, water and methanol in silicalite, J. Phys. Chem. 94 (1) (1990) 316–322.

23. **Papp H., Hinsen W., Do N.T., Baerns M.,** The adsorption on methane on H-ZSM-5 zeolite, Thermochimica Acta. 82 (1) (1984) 137–148.

24. **Caro J., Bulow M., Schirmer W., et al.,** Microdynamics of methane, ethane and propane in ZSM-5 type zeolites, J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1: Phys. Chem. in Cond. Phases. 81 (10) (1985) 2541–2550.

25. **Hayhurst D.T., Paravar A.R.,** Diffusion of C_1 to C_5 normal paraffins in silicalite, Zeolites. 8 (1) (1988) 27–29.

26. **Chiang A.S., Dixon A.G., Ma Y.H.,** The determination of zeolite crystal diffusivity by gas chromatography – II. Experimental, Chem. Eng. Sci. 39 (10) (1984) 1461–1468.

27. **June R.L., Bell A.T., Theodorou D.N.,** Molecular dynamics studies of butane and hexane in silicalite, J. Phys. Chem. 96 (3) (1992) 1051–1060.

Received 30.03.2021, accepted 03.06.2021.

THE AUTHORS

KUTSOVA Daria S.
Voronezh State University
1, Universitetskaya Sq., Voronezh, 394006, Russian Federation
potanina.ds@gmail.com

BOGATIKOV Evgenii V.
Voronezh State University
1, Universitetskaya Sq., Voronezh, 394006, Russian Federation
evbogatikov@yandex.ru

SHEBANOV Alexandr N.
Voronezh State University
1, Universitetskaya Sq., Voronezh, 394006, Russian Federation
anshebanov@hotmail.com

BORMONTOV Evgenii N.
Voronezh State University
1, Universitetskaya Sq., Voronezh, 394006, Russian Federation
me144@phys.vsu.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14307
УДК 532.517

ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ ТЕПЛОВОГО МАНЕКЕНА НА ТЕЧЕНИЕ И ТЕПЛООБМЕН В МОДЕЛЬНОМ ПОМЕЩЕНИИ С ВЫТЕСНЯЮЩЕЙ ВЕНТИЛЯЦИЕЙ

Е.Д. Степашева, М.А. Засимова, Н.Г. Иванов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе представлены результаты численного моделирования турбулентного течения и теплообмена в модельном помещении с вытесняющей вентиляцией, в котором размещен нагретый тепловой манекен. Цель работы – оценить влияние формы манекена на структуру течения воздуха, предсказываемую расчетами. Рассмотрены три формы манекена: детальная (приближена к форме человека), а также частично и полностью упрощенные. Постановка задачи приближена к условиям тестового эксперимента P.V. Nielsen и др. (2003). Моделирование турбулентности осуществлялось с помощью RANS-подхода с привлечением стандартной k-ε модели турбулентности в сочетании с методикой разрешения пристенной области. В результате исследования выявлена степень чувствительности решения к размерности и топологии используемой сетки, а также влияние на решение неопределенности входного распределения скорости. Показано, что расчетные результаты в целом согласуются с данными эксперимента; упрощение формы манекена оказывает существенное влияние на точность предсказания локальных параметров.

Ключевые слова: вентиляция, тепловой манекен, турбулентное течение и теплообмен, естественная конвекция

Ссылка при цитировании: Степашева Е.Д., Засимова М.А., Иванов Н.Г. Влияние формы теплового манекена на течение и теплообмен в модельном помещении с вытесняющей вентиляцией // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 94–111. DOI: 10.18721/JPM.14307

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

THERMAL MANIKIN SHAPE INFLUENCE ON AIRFLOW AND HEAT TRANSFER IN THE MODEL ROOM WITH DISPLACEMENT VENTILATION

E.D. Stepasheva, M.A. Zasimova, N.G. Ivanov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russian Federation

The paper presents the results of numerical modeling of turbulent flow and heat transfer in the model room with displacement ventilation. The goal of the study is to assess the shape influence of the thermal manikin placed in the room on the computed airflow structure. Three manikin shapes have been considered: a detailed one (close to a human shape) and ones simplified partially and completely. The problem formulation was close to the test conditions of P.V. Nielsen et al. (2003). The RANS approach based on the standard k-ε turbulence model was applied. The study revealed solution sensitivity to the dimension and topology of the mesh used, as well as the solution dependence on the uncertainty of the inlet velocity distribution. The calculated results were shown to agree generally with the experimental data. The simplification of the manikin shape had a significant impact on the local parameter prediction accuracy.

Keywords: ventilation, thermal manikin, turbulent airflow and heat transfer, natural convection

Citation: Stepasheva E.D., Zasimova M.A., Ivanov N.G., Thermal manikin shape influence on airflow and heat transfer in the model room with displacement ventilation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 94–111. DOI: 10.18721/JPM.14307

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Системы вентиляции должны обеспечивать требуемые характеристики теплового комфорта, поддерживая подходящие для человека условия микроклимата в вентилируемых помещениях. Для практических оценок уровня теплового комфорта обычно используют следующие характеристики [1, 2]:

интенсивность сквозняка DR (*англ.* Draught Rating),

прогнозируемая средняя оценка качества воздушной среды – PMV (*англ.* Predicted Mean Vote),

прогнозируемый процент недовольных температурой среды – PPD (*англ.* Predicted Percentage Dissatisfied),

прогнозируемый процент недовольных локальной неоднородностью температуры – PD (*англ.* Percentage Dissatisfied).

Для уже введенных в эксплуатацию систем вентиляции оценку этих характеристик осуществляют на основе опросов людей, находящихся в помещении, и для этого применяется специальная методика. Оценить характеристики теплового комфорта можно также на основе первичных данных о течении воздуха: локальных и/или интегральных значений скорости, пульсаций скорости и (для неизотермических задач) температуры, используя включенные в стандарты эмпирические соотношения.

При постановке и решении прикладных задач вентиляции возникает большое число параметров, которые сложно (а часто и невозможно) определить однозначно. К таким параметрам относятся, в том числе, следующие:

положение человека в помещении и его изменение во времени,

форма тела человека (индивидуальная геометрия, положение отдельных частей тела),

индивидуальные характеристики тепловыделения (локальные и интегральные),

теплоизоляционные характеристики одежды и другие.

Полностью учесть все перечисленные параметры, существенно влияющие на характеристики течения и теплообмена, и, как следствие, на характеристики теплового комфорта, можно лишь в некоторых простых случаях. Как при проведении физического моделирования, так и при использовании средств вычислительной гидродинамики – CFD (*англ.* Computational Fluid Dynamics) часто оказывается полезным, а иногда и необходимым упрощение постановки задачи, которое в каждом случае требует обоснования.

При проведении физических экспериментов, направленных на изучение характеристик теплового комфорта в помещении с размещенными в нем людьми, широко используются тепловые манекены, имитирующие человека, включая его тепловыделение и дыхание. В расчетных исследованиях вентиляционных течений также постоянно используются «виртуальные» тепловые манекены (см., например, недавние работы [3 – 5]). Достижения в области численного моделирования воздушного течения и теплообмена в окрестности нагреваемого манекена отражены в подробном обзоре [6].

В ходе численного моделирования, особенно при проведении фундаментальных исследований, предпочтительнее рассматривать не детальную форму тела человека, а упрощенную

геометрическую форму теплового манекена, так как это позволяет более четко контролировать условия вычислительного эксперимента (например, качество сетки у твердой поверхности). Примеры расчетов течения и теплообмена в окрестности теплового манекена упрощенной формы представлены в работах [7, 8], где результаты получены на основе вихреразрешающего метода моделирования крупных вихрей. В современных физических экспериментах, однако, обычно используются стандартные тепловые манекены, имеющие детализированную форму (далее используется термин «детальная форма»), и для непосредственного сопоставления расчетных результатов, полученных при использовании упрощенного манекена, с экспериментальными данными необходимы дополнительные методические исследования.

Оценка степени влияния формы теплового манекена на структуру течения в помещении ранее выполнялась для различных конфигураций как в экспериментальных работах [9, 10], так и с использованием средств вычислительной гидродинамики, [8, 11, 12]. В работах [8 – 12] для каждой из рассмотренных задач были сделаны имеющие частный характер выводы о влиянии изменения формы манекена на локальные характеристики течения.

В литературе имеется база экспериментальных данных для двух тестовых конфигураций, отвечающих двум типам вентиляции: перемешивающей [10, 13] и вытесняющей [13]. В первом случае подача воздуха через приточные отверстия обеспечивает хорошее смешение воздуха в помещении, например, за счет глобальной циркуляции. При использовании вытесняющей вентиляции (второй случай) свежий воздух подается в нижнюю часть помещения, а вытяжные отверстия находятся у потолка, что минимизирует глобальное перемешивание. В экспериментах [10, 13] в тестовом помещении был размещен нагретый тепловой манекен, теплосъем с поверхности которого контролировался. Эксперименты, в которых были проведены измерения полей скорости и температуры в нескольких сечениях помещения, трактуются авторами как эталонные. Результаты экспериментальных измерений, хорошо документированные и размещенные авторами в виде базы данных на сайте http://www.cfd-benchmarks.com/, ранее неоднократно использовались для валидации расчетных данных [8, 14 – 16]: в работах [8, 14] представлены результаты расчетов для помещения с вытесняющей вентиляцией, а в работах [15, 16] – с перемешивающей.

В настоящей работе представлены результаты численного исследования течения и теплообмена вблизи теплового манекена для условий теста с вытесняющей вентиляцией [13].

Цель исследования – оценка степени чувствительности структуры течения в помещении к изменению геометрической формы теплового манекена.

Расчеты проведены для трех форм манекена: детальной (приближена к форме человека и в существенной степени соответствует принятой в эксперименте), частично упрощенной (блочная, состоящая из параллелепипедов) и полностью упрощенной (один цельный параллелепипед). Моделирование турбулентности осуществлялось с помощью RANS-подхода с привлечением наиболее часто использующейся при исследовании струйных течений стандартной k-ε модели турбулентности.

Постановка задачи

Геометрическая модель. Рассматривается вентилируемое помещение (рис. 1,*a*); его высота, ширина и длина (в метрах) составляют $H = 2{,}7$, $W = 3{,}0$ и $L = 3{,}5$ соответственно. Использованная система координат показана на схеме помещения, начало системы координат расположено в его нижнем углу. На одной из торцевых сторон вблизи пола имеется прямоугольное входное отверстие высотой $h_{in} = 0{,}2$ м и шириной $w_{in} = 0{,}4$ м. Эквивалентный диаметр входного отверстия $D_e = (4h_{in}w_{in}/\pi)^{1/2} = 0{,}3$ м. Выходное отверстие имеет квадратную форму $h_{out} = w_{out} = 0{,}3$ м и располагается на противоположной торцевой стенке вблизи потолка помещения. Входное и выходное отверстия центрированы вдоль координаты z.

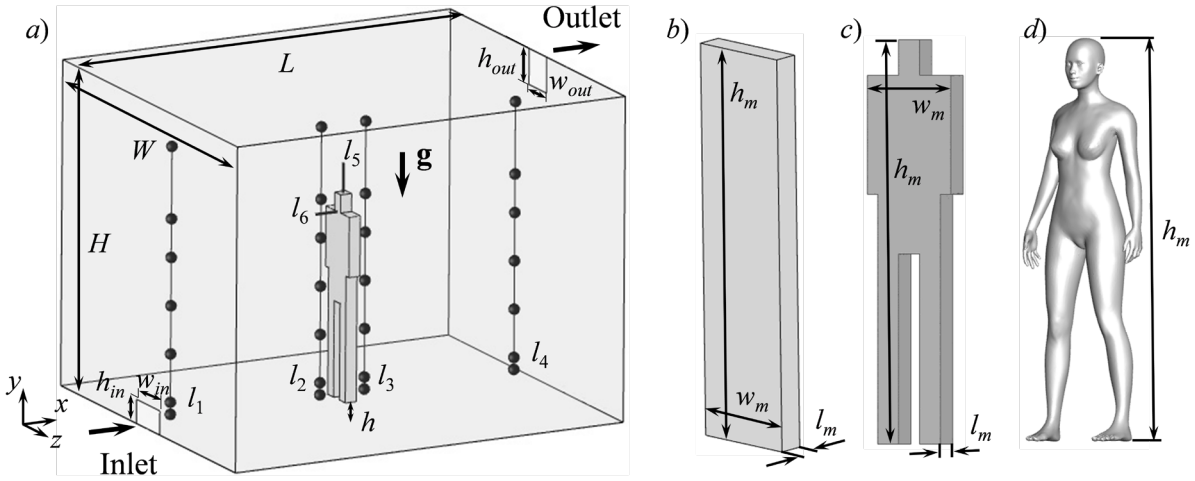


Рис. 1. Схема помещения (*a*) и различные формы манекена:
параллелепипед (*b*), блочная (*c*), детальная (*d*).
Показаны вход (Inlet), выход (Outlet) воздушных масс, геометрические параметры;
линиями $l_1 - l_6$ обозначены положения сечений, для которых имеются данные эксперимента

В центре помещения располагается тепловой манекен, его поверхность удалена на расстояние $h = 0{,}05$ м от пола помещения. Рассмотрены три формы теплового манекена: параллелепипед, блочная и детальная (см. также табл. 1). Манекен установлен в вертикальном положении, его лицо обращено к приточному отверстию. Наиболее простая из рассмотренных форм манекена – это параллелепипед (рис. 1,*b*), его размеры таковы: высота $h_m = 1{,}7$ м, ширина $w_m = 0{,}4$ м и толщина $l_m = 0{,}1$ м. Площадь поверхности манекена составляет $S_m = 1{,}78$ м^2.

Геометрические параметры блочной формы манекена (рис. 1,*c*) приняты такими же, как в работе [8]. Манекен блочной формы составлен из параллелепипедов, совокупность которых в некоторой степени имитирует реальную форму человека. В манекене отдельно выделены следующие части: голова, две руки, туловище и две ноги (табл. 2). Площадь поверхности манекена равна $S_m = 1{,}48$ м^2 (см. табл. 1).

Детальная форма манекена (рис. 1,*d*) приближена к форме теплового манекена, используемой в эксперименте. Геометрия манекена была создана с помощью специализированного программного обеспечения MakeHuman (официальный веб-сайт: *makehumancommunity.org*).

Отметим, что площадь теплового манекена, используемого в экспериментальной работе [13], составляет $S_m = 1{,}47$ м^2. Это значение на 7% меньше, чем для детальной формы манекена, рассматриваемой в данной работе. Дело в том, что, несмотря на хорошую документированность результатов измерений, невозможно полностью воспроизвести форму манекена, использованного в работе [13], ввиду недостаточности описания его геометрии. Несмотря на то, что в указанном литературном источнике эксперименты проводились как для сидячего, так и для стоячего положений манекена (последнее рассматривается в настоящей работе), на сайте http://www.cfd-benchmarks.com/ геометрия приведена только для сидячего положения.

Линии $l_1 - l_6$, показанные на рис. 1,*a*, демонстрируют положения сечений, для которых имеются экспериментальные данные [13]. Все линии расположены в центральной плоскости помещения: при $z = 1{,}5$ м. Линии $l_1 - l_4$ удалены на расстояния (в метрах) 0,20, 1,55, 1,95 и 3,30 от входного отверстия. На том же рисунке символами отмечены положения точек, где вдоль указанных линий проводились измерения модуля скорости (выполнены с помощью

датчика ультразвукового анемометра) и температуры (с помощью термопары). Для линий l_5, l_6 (их положения составляют $x = 1{,}75$ м и $y = 1{,}60$ м) в базе данных имеются значения скорости, полученные методом Particle Image Velocimetry (PIV).

Таблица 1

Варианты расчетов, учитывающих форму манекена и внешние факторы

Форма манекена (S_m, м^2)	q_w, Вт/м^2	Расчетная сетка, млн.	Тип элементов	y_p, мм	$\langle y^+ \rangle$
Параллелепипед (1,78)	21	0,79	Гексагональный	1,0	1,12
		0,97		0,5	0,58
		0,24	Полиэдральный	5,0	4,74
		1,16		1,0	1,05
Блочная (1,48)	26	1,04		1,0	1,05
Детальная (1,57)	24	1,62		1,0	1,02

Обозначения: S_m – площадь поверхности, q_w – удельный тепловой поток, y_p – высота первой пристенной ячейки у поверхности манекена, $\langle y^+ \rangle$ – усредненная величина безразмерного расстояния от поверхности манекена до центра первой пристенной ячейки.

Таблица 2

Геометрические параметры манекена трех форм

Параметр целого или детали	Размер для формы, м		
	параллелепипеда	блочной	детальной
Рост h_m	1,70	1,70	1,70
Наибольшая ширина w_m	0,40	0,40	0,59
Толщина l_m	0,10	0,30	0,30
Голова	–	0,15×0,10	Использовано программное обеспечение MakeHuman
Туловище		0,75×0,30	
Рука (две)		0,50×0,05	
Нога (две)		0,80×0,10	
Расстояние между ногами		0,10	

Примечание. Размеры деталей манекена для блочной формы даны в плоскости yz.

Физические параметры среды и граничные условия. Физические свойства воздуха принимались постоянными и соответствовали температуре 22 °С:

плотность $\rho = 1{,}194$ кг/м^3,

динамическая вязкость $\mu = 1{,}789 \cdot 10^{-5}$ кг/(м·с),

удельная теплоемкость $C_p = 1006$ Дж/(кг·К),

коэффициент теплопроводности $\lambda = 0{,}024$ Вт/(м·К).

Число Прандтля при таких параметрах составляет $\mathrm{Pr} = \mu C_p/\lambda = 0{,}69$.

Согласно документации к эксперименту [13], при постановке расчетов рекомендуется на входе в помещение задавать однородный профиль скорости $V_{in} = 0{,}2$ м/с. Это условие было воспроизведено в основной серии расчетов, что соответствует объемному расходу 57,6 м^3/ч.

Число Рейнольдса, построенное по эквивалентному диаметру и входной скорости, в этом случае составляет $\mathrm{Re} = \rho D_e V_{in}/\mu = 4300$.

Помимо рекомендаций, в приложении к данным эксперимента [13] на сайте содержится таблица (файл в формате Excel) измеренных значений модуля скорости на входе. Согласно этим данным, среднерасходное значение скорости на входе составляет 0,181 м/с. Для варианта с блочной формой манекена был выполнен дополнительный расчет с заданием однородного профиля скорости на входе V_{in} = 0,181 м/с (соответствующий расход равен 52,1 м^3/ч). Кроме этого, был проведен расчет с заданием на входе неравномерного профиля скорости, полученного из решения задачи о течении в канале соответствующего сечения, среднерасходная скорость в котором составляет V_{in} = 0,181 м/с.

На выходе из расчетной области задавались мягкие граничные условия (постоянство давления). На стенках вентилируемого помещения и на поверхности манекена ставилось условие прилипания.

В соответствии с условиями эксперимента [13], задавались следующие тепловые граничные условия:

входная температура постоянна и равна T_{in} = 22 °C,

стенки помещения адиабатические.

Интегральный теплосъем с поверхности манекена для всех вариантов геометрии принимался равным Q_w = 38 Вт, что соответствует 50 % от значения, принятого в стандартах для спокойно стоящего человека. Уменьшение тепловыделения, характерного для человека, примерно в два раза – это методика, принятая в тех случаях, когда в расчетах для теплового манекена, как и в настоящей работе, не учитывается радиационный теплообмен. На поверхности манекена задавалось постоянное значение удельного теплового потока, определяемого как $q_w = Q_w/S_m$. Конкретные значения удельного теплового потока, использованные для разных геометрических форм манекена, приведены в табл. 1.

Математическая и вычислительная модели. Для моделирования турбулентности использовался RANS-подход, основанный на решении уравнений Навье – Стокса, осредненных по Рейнольдсу (см., например, монографию [17]). Уравнения замыкаются стандартной полуэмпирической k-ε моделью турбулентности [18] в сочетании с методикой разрешения пристенной области Enhanced Wall Treatment. В расчетах на входе в помещение были приняты следующие характеристики турбулентности:

интенсивность турбулентности I = 30 %,

отношение турбулентной вязкости к молекулярной $\mu_t/\mu = 44$.

Учет силы плавучести осуществлялся в приближении Буссинеска. Вектор ускорения свободного падения **g**, модуль которого g = 9,81 м/с^2, направлен вертикально вниз, по направлению к полу помещения (см. рис. 1,*a*). Коэффициент объемного расширения задавался как $\beta = 3{,}39\cdot10^{-3}$ K^{-1}.

В расчетах использовались квазиструктурированные сетки с гексагональными элементами, построенные в сеточном генераторе ICEM CFD 2019 R3, а также неструктурированные сетки с полиэдральными элементами, полученные в ANSYS Fluent через преобразование расчетных сеток с тетраэдральными элементами, построенных в ICEM CFD. Размер расчетных сеток, используемых в работе, а также некоторые характеристики сеток приведены в табл. 1. Внешний вид сеток с гексагональными и полиэдральными элементами показан на рис. 2,*a*,*b*. Сетки имеют сгущение к стенкам расчетной области, а также к поверхности манекена.

Сетки с гексагональными элементами использовались для наиболее простой формы манекена – параллелепипеда. Были построены два варианта сетки с гексагональными элементами, в которых варьировалась высота y_p первой пристенной ячейки у поверхности манекена (см. табл. 1): для первого варианта этот размер составил 1 мм, общий размер сетки при этом

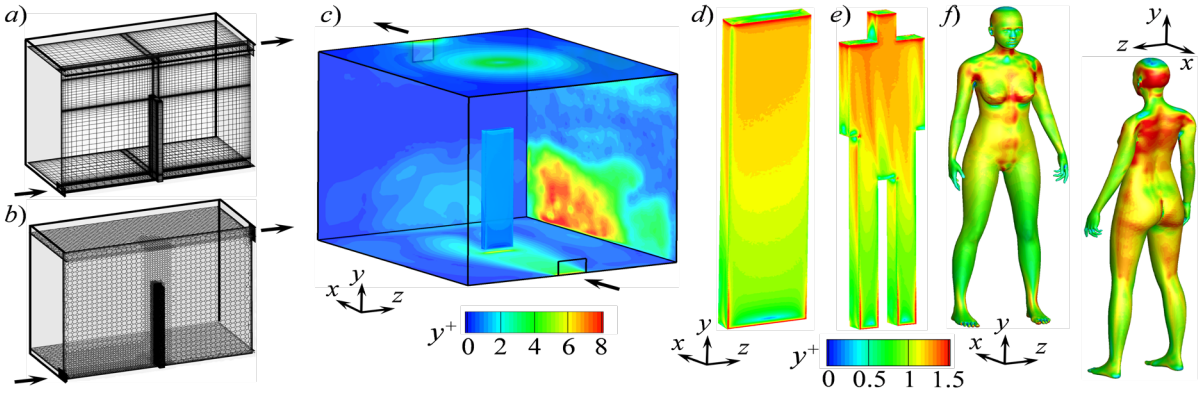


Рис. 2. Общий вид расчетных сеток с гексагональными элементами (0,79 млн.) (*a*) и полиэдральными элементами (1,16 млн.) (*b*) для манекена в форме параллелепипеда, а также распределения значения y^+ по поверхностям стенок помещения (сетка 1,16 млн.) (*c*) и по поверхностям манекенов трех форм: параллелепипеда (*d*), блочной (*e*) и детальной (*f*)

790 тыс. (82 × 109 × 90) ячеек, а для второго – 0,5 мм (в два раза меньше), а общий размер сетки – 970 тыс. (98 × 111 × 92) ячеек. Величина безразмерного расстояния y^+ от поверхности манекена до центра первой пристенной ячейки (см. рис. 2,*a*) в среднем для этих вариантов составляет 1,12 и 0,58 соответственно.

Для манекена в форме параллелепипеда были также построены две сетки, состоящие из полиэдральных элементов. Более экономичная сетка, с общим числом элементов 240 тыс., имела по пять призматических слоев без сгущения вблизи стенок, перпендикулярных осям x и y, а также вблизи поверхности манекена; поперечный размер ячеек в слоях составлял $y_p = 5$ мм. Остальная область – внутренняя часть помещения – была разбита на одинаковые полиэдральные ячейки, их характерный размер равен 10 см. Такая топология сетки часто используется в инженерной практике в силу простоты генерации. Вторая полиэдральная сетка, с общим числом элементов 1,16 млн., имеет сгущение в области пристенной струи, а также в области над манекеном (см. рис. 2,*b*). Характерный размер полиэдральных элементов в измельченных областях равен 5 см, а в остальной области – 10 см. Вблизи поверхности манекена при этом задавалось 10 призматических слоев с коэффициентом сгущения 1,1 к поверхности манекена; высота первого пристенного слоя $y_p = 1$ мм. Распределение y^+ для этого варианта расчетной сетки приведено на рис. 2,*c*,*d*. Значение величины y^+ на стенках помещения не превышает 10, а по поверхности манекена составляет в среднем 1,05.

Расчетные сетки для блочной и детальной форм манекена состояли из призматических слоев и полиэдральных ячеек с характеристиками, сходными с полиэдральной сеткой со сгущением для манекена в форме параллелепипеда. Распределение величины y^+ по поверхности манекенов для этих случаев показано на рис. 2,*e*,*f*. Значения y^+ по поверхности манекена в среднем также составили около единицы (см. табл. 1).

Все расчеты производились в CFD-пакете ANSYS Fluent 2019 R3. Аппроксимация уравнений осуществлялась со вторым порядком точности. Для организации итерационного процесса был выбран метод SIMPLE. Использовались ресурсы кластера научно-исследовательской лаборатории гидроаэродинамики (максимально 24 ядра).

Результаты методических расчетов и их обсуждение

Чувствительность решения к используемой сетке. На рис. 3 показаны профили модуля скорости в шести сечениях помещения $l_1 - l_6$, полученные в расчетах для манекена в форме параллелепипеда при использовании сеток разной размерности и топологии (см. табл. 1).

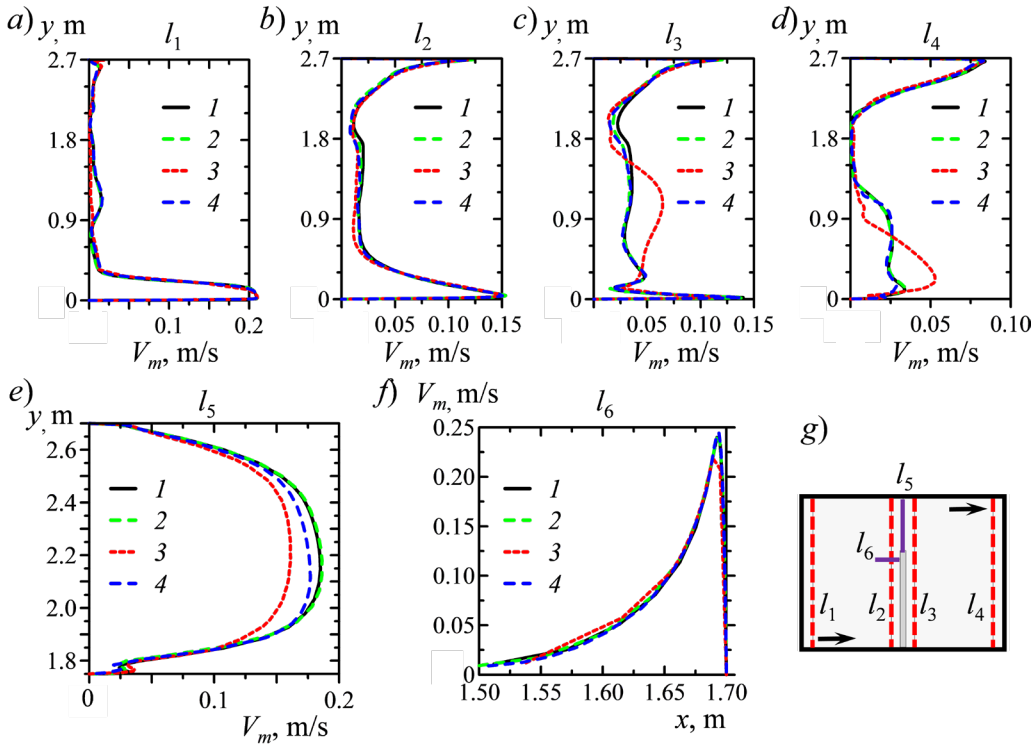


Рис. 3. Профили скорости (*a* – *f*), построенные вдоль линий $l_1 - l_6$ (см. рис. 1), полученные в решениях с использованием сеток разной размерности, млн. ячеек: 0,79 (*1*), 0,97 (*2*), 0,24 (*3*) и 1,16 (*4*); *g* – схема расположения сечений

На графиках для сечений l_1 и l_2 (рис. 3,*a*,*b*) можно отметить область распространения приточной пристенной струи (при $y < 0{,}6$ м). Интенсивность струи падает вниз по потоку; значение модуля скорости изменяется от входного, равного 0,20 м/с, до соответствующего значения перед поверхностью манекена, равного 0,15 м/с. Профили скорости, показанные в сечениях l_1 и l_2, слабо меняются при изменении расчетной сетки, хотя заметно, что решение на самой грубой сетке *3* здесь несколько отличается от остальных. Существенная чувствительность получаемого решения к используемой расчетной сетке проявляется в области следа за манекеном, что можно отметить на графиках скорости в сечениях l_3 и l_4 для нижней части помещения при $y < 1{,}8$ м (рис. 3,*c*,*d*). Здесь течение характеризуется пониженными значениями скорости. Решение, полученное с использованием сетки с меньшим числом элементов (240 тыс.), заметно отличается от решений на более подробных сетках.

Графики скорости, построенные в сечениях l_5 и l_6 (рис. 3,*e*,*f*), а также в верхней области помещения в сечениях l_2 и l_3 при $y \geq 1{,}8$ м (рис. 3,*b*,*c*), иллюстрируют свободноконвективное течение, которое возникает вблизи поверхности теплового манекена и в тепловом факеле над ним за счет действия силы плавучести. Вблизи поверхности манекена формируется свободноконвективный пограничный слой, характерные значения скорости в котором в верхней части манекена достигают 0,25 м/с (рис. 3,*f*). В этой области наблюдается слабая зависимость решения от размерности сетки, используемой в расчетах. Некоторая чувствительность решения к сетке имеется в области теплового факела, который формируется над манекеном. Анализ данных по распределению скорости, показанных на рис. 3,*e*, позволяет отметить, что значения скорости в этой области, вычисленные с использованием сетки в 240 тыс. ячеек, на 15 % ниже, чем для остальных сеток. Важно также отметить, что поля температуры, по-

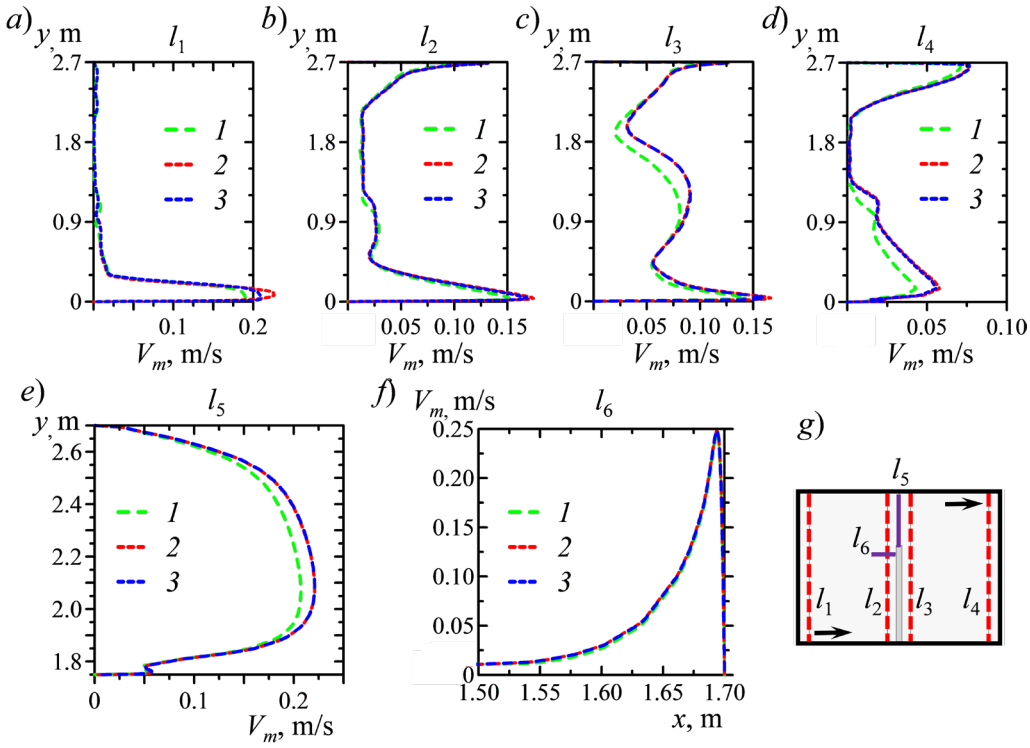


Рис. 4. Профили скорости (*a* – *f*), построенные вдоль линий $l_1 - l_6$ (см. рис. 1), полученные при задании различных входных распределений скорости: однородное, равное 0,181 м/с (*1*); неравномерный профиль со среднерасходной скоростью 0,181 м/с (*2*); однородное, равное 0,200 м/с (*3*); *g* – схема расположения сечений

лученные в расчетах с использованием всех рассматриваемых сеток, практически совпадают между собой.

Следует указать, что три решения, полученные с использованием двух гексагональных сеток, а также сетки с полиэдральными элементами со сгущением, практически не различаются. Это позволяет заключить, что решение, полученное на сетке с полиэдральными ячейками со сгущением, можно признать слабо зависящим от сетки. В силу этого, для вариантов с блочной и детальной формами манекена использовались сетки аналогичной топологии и размерности.

Чувствительность решения к входному распределению скорости. Исследование указанной чувствительности было выполнено для варианта с блочной формой манекена. Были заданы три варианта входного распределения:

однородное распределение скорости $V_{in} = 0{,}2$ м/с, рекомендованное в работе [13];

однородное распределение $V_{in} = 0{,}181$ м/с (среднее значение по данным эксперимента, приведенным в приложении к работе [13]);

распределение, полученное путем дополнительного расчета течения в канале прямоугольного сечения $h_{in} \times w_{in}$ протяженностью $15h_{in}$, со среднерасходной скоростью 0,181 м/с.

На рис. 4 приведены профили скорости в сечениях $l_1 - l_6$, полученные в решениях с различными входными распределениями скорости. На графике, представленном на рис. 4,*a* для сечения l_1, можно заметить различия в полученных решениях: максимальные значения скорости в области пристенной струи (при $y < 0{,}6$ м) находятся в диапазоне 0,19 – 0,23 м/с. В остальных сечениях ($l_2 - l_6$), вдали от входной области, профили скорости на рис. 4 отличаются друг от друга незначительно: некоторые различия имеются в области пониженных

скоростей в сечениях l_3 и l_4, а также в области теплового факела над манекеном (сечение l_5). Данные, представленные на рис. 4, позволяют сделать вывод о том, что полученное решение слабо меняется в рассмотренном диапазоне расходов на входе. В основной серии расчетов использовалось однородное распределение $V_{in} = 0{,}2$ м/с.

Влияние формы манекена на течение и теплообмен

Описание структуры течения. Структуру течения в вентилируемом помещении иллюстрирует рис. 5, на котором изображены линии тока, окрашенные в соответствии со значениями модуля скорости (рис. 5,*a* – *c*), а также поля модуля скорости в нескольких сечениях помещения (рис. 5,*d* – *f*), построенные для трех вариантов формы манекена.

Полученные решения позволяют выделить две области течения. Первая – это область распространения пристенной струи в нижней части помещения и ее взаимодействия с манекеном. Вторая – это область свободноконвективного подъемного течения воздуха, вызванного действием силы плавучести. Такое течение формируется вблизи поверхности нагретого манекена и над ним, образуя тепловой факел, который инициирует вторичное течение в верхней части помещения. Обе области характеризуются сопоставимыми значениями скорости, при этом они слабо взаимодействуют между собой.

На рис. 6 изображены поля скорости в двух средних сечениях помещения: $z = 1{,}50$ м и $x = 1{,}75$ м (поля скорости на рис. 5,*d* – *f* даны в изометрии для этих же сечений). Для всех вариантов формы манекена в расчетах получена структура течения, несимметричная относительно центральной плоскости $z = 1{,}5$ м. Пристенная струя распространяется от входного отверстия вдоль пола, взаимодействует с манекеном, после чего, ослабев, сталкивается с торцевой стенкой, противоположной от входа. При взаимодействии струи со стенкой расход разделяется неравномерно, и после разворота возвратное течение вдоль одного из нижних углов помещения оказывается более интенсивным, чем вдоль противоположно-

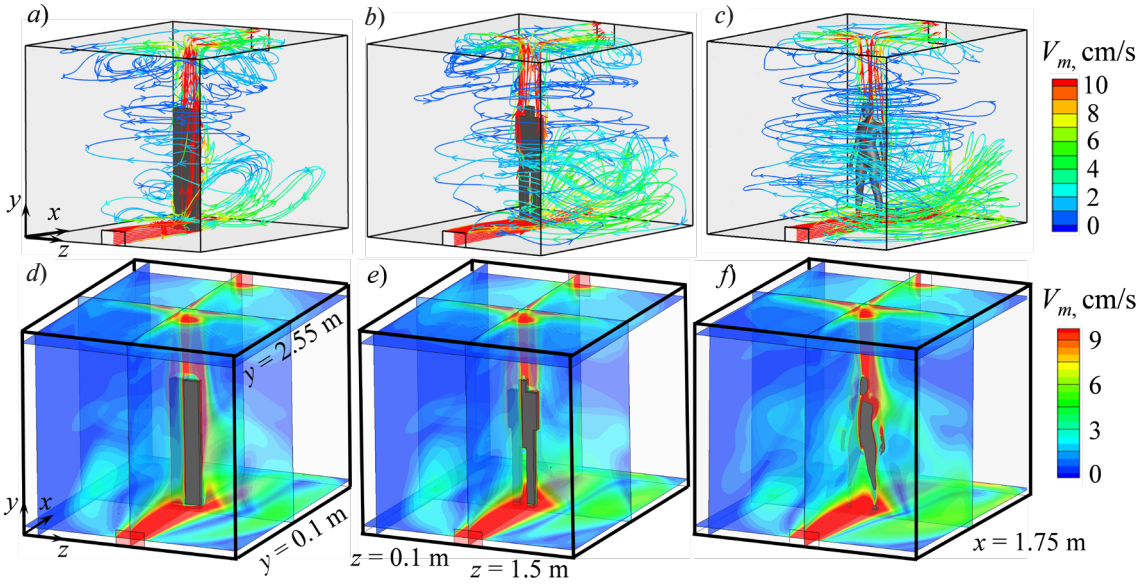


Рис. 5. Линии тока (*a* – *c*), окрашенные в соответствии со значениями модуля скорости, а также поля модуля скорости (*d* – *f*) в нескольких сечениях помещения, полученные в расчетах с использованием трех форм манекена: параллелепипеда (*a*, *d*), блочной (*b*, *e*), детальной (*c*, *f*)

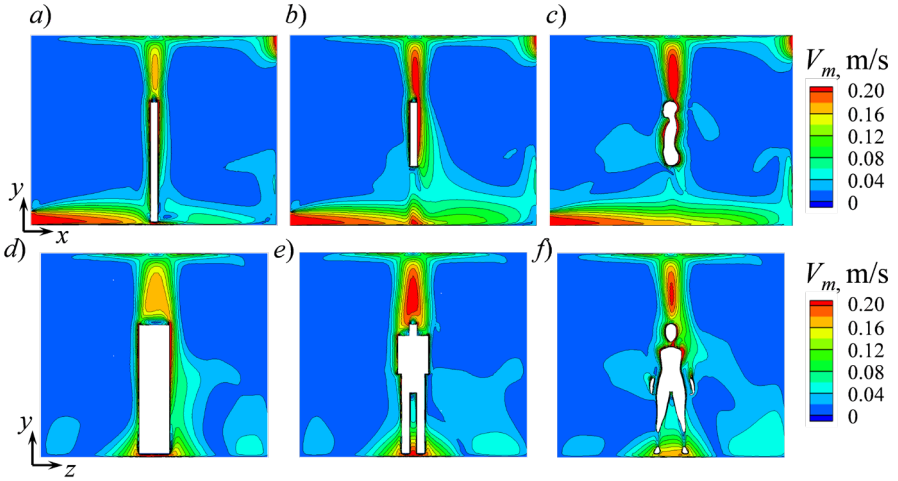


Рис. 6. Распределения модуля скорости в двух сечениях помещения: $z = 1{,}50$ м (*a* – *c*) и $x = 1{,}75$ м (*d* – *f*), полученные в расчетах с использованием трех форм манекена: параллелепипед (*a*, *d*), блочная (*b*, *e*), детальная (*c*, *f*)

го угла. Это видно по локальным максимумам скорости в нижней правой части помещения (рис. 6,*d*,*e*,*f*). Отметим, что несимметричное решение было получено для обеих топологий расчетной сетки, которые использовались для манекена в форме параллелепипеда.

На рис. 5 и 6 представлены результаты для решения с прилипанием струи к правой боковой стенке, которое, как оказалось, не является единственным. Для варианта манекена в форме параллелепипеда были получены два устойчивых решения (сошедшихся по невязкам) с прилипанием струи к противоположным боковым стенкам вентилируемого помещения. Тот факт, что решение было не единственным, обнаружен для обеих топологий расчетной сетки.

Полученные данные показывают, что глобальная структура течения, формирующаяся в помещении, слабо меняется при изменении формы манекена. Однако в зависимости от формы манекена изменяются локальные характеристики потока. Так, в области струйного течения различия полей скорости наблюдаются при взаимодействии струи с манекеном (см. рис. 6). В области свободноконвективного течения наблюдаются различия характерных значений скорости в тепловом факеле над манекеном. Максимальные значения скорости в тепловом факеле для манекена в форме параллелепипеда составили 0,180 м/с, для блочной формы – 0,230 м/с, для детальной – 0,255 м/с. Таким образом, для манекенов детальной и блочной форм интенсивность формируемого свободноконвективного течения выше, чем для варианта манекена в форме параллелепипеда.

Сравнение расчетных и экспериментальных данных. Результаты численного моделирования были сопоставлены с экспериментальными данными [13] (рис. 7). На рис. 7,*a* схематично показано расположение сечений I и II, в которых проводились PIV-измерения в работе [13]. Оба сечения находятся в центре помещения ($z = 1{,}5$ м): сечение I – над манекеном, а сечение II – перед ним, в окрестности лица. Распределения модуля скорости вблизи поверхности манекена в сечениях I и II по данным эксперимента [13] показано на рис. 7,*b*,*c*. Модуль скорости построен по двум компонентам V_x и V_y, однако в работе [13] расположение координатных осей x', y' при представлении экспериментальных данных точно не описано. Поля модуля скорости, полученные по данным численного моделирования для вариантов с разной формой манекена, приведены на рис. 7,*d*,*e*,*f*. Модуль скорости построен по трем компонентам, но вклад компоненты скорости V_z в среднем сечении минимален.

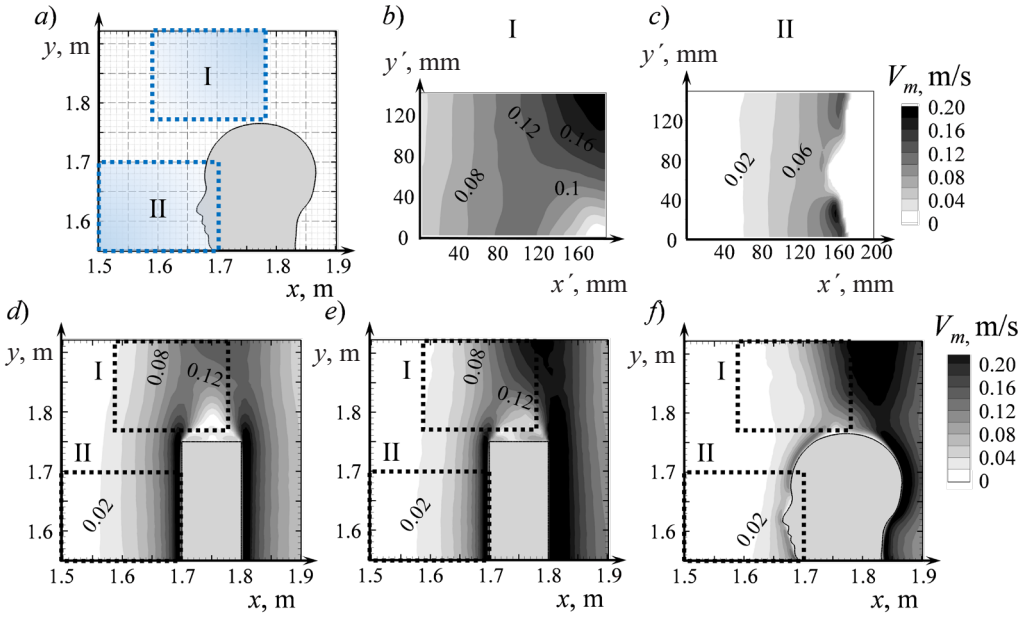


Рис. 7. Схема расположения сечений I и II (*a*), а также сравнение распределений модуля скорости в сечениях I (*b*) и II (*c*) по данным эксперимента [13] с расчетными результатами для трех форм манекена: параллелепипед (*d*), блочная (*e*), детальная (*f*) (показана центральная плоскость $z = 1{,}5$ м)

При изменении формы теплового манекена структура подъемного течения вблизи его поверхности существенно меняется: характерные значения скорости перед манекеном (при $x < 1{,}7$ м) в вариантах с блочной формой и формой параллелепипеда заметно выше, чем в варианте с детальной формой. В случае упрощенной (плоской) формы манекена, в отсутствие на поверхности каких-либо неоднородностей, постановка приближена к задаче о свободноконвективном течении вблизи нагретой пластины, в которой подъемная скорость увеличивается вверх по течению. В варианте с детальной формой манекена, вблизи передней части торса формируется сложное трехмерное свободноконвективное подъемное течение, которое меняет свое направление в области плеч манекена, и, как показывают линии тока (см. рис. 5,*d*), поднявшийся вблизи торса воздушный поток перетекает над плечами на заднюю часть манекена и далее движется вверх вдоль задней части головы. Таким образом, значения скорости в области лица оказываются заметно ниже для детального манекена, чем полученные для манекенов упрощенной формы (параллелепипед и блочная).

На рис. 8 приведены распределения скорости в нескольких сечениях помещения, полученные в эксперименте и в результате расчетов с использованием трех форм манекена. Линия l_6, распределение скорости вдоль которой показано на рис. 8,*c*, расположена в сечении II; координата x' отсчитывается от поверхности лица манекена. Полученная в расчетах структура течения вблизи детального манекена в сечении II (вблизи лица) как качественно (см. рис. 7), так и количественно (рис. 8,*c*) согласуется со структурой течения, полученной в эксперименте. При использовании более простых форм манекена (и блочной, и параллелепипеда) значения скорости в этой области оказываются завышенными приблизительно в два раза.

По значениям скорости в сечении I можно оценить интенсивность формирующегося над манекеном теплового факела. Распределение скорости вдоль находящейся в этом сечении линии l_5 показано на рис. 8,*b*. Как было отмечено ранее, изменение формы манекена суще-

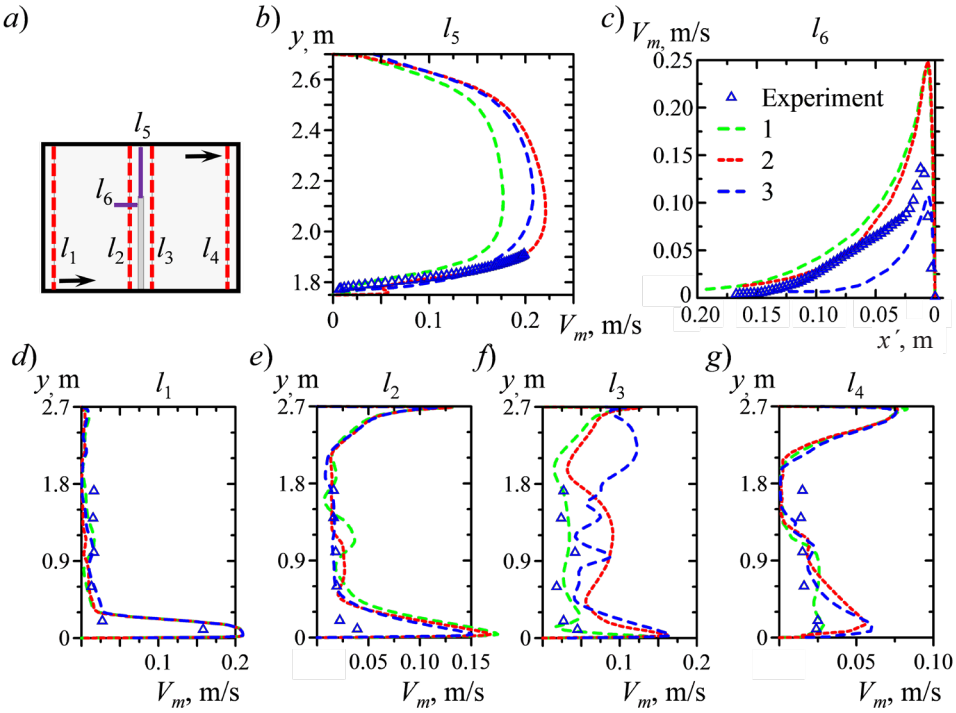


Рис. 8. Схема расположения сечений (*a*), а также профили модуля скорости, построенные вдоль линий $l_1 - l_6$ (*b* – *g*), которые получены в решениях с использованием трех форм манекена: параллелепипед (*1*), блочная (*2*) и детальная (*3*)

ственно меняет положение теплового факела и характерные скорости подъемного течения. Наиболее приближенные к эксперименту данные о скорости в сечении I можно получить при использовании как детальной, так и блочной форм манекена.

Распределения скорости вдали от поверхности манекена показаны на рис. 8,*d*,*e*,*g*. Анализ графиков позволяет отметить удовлетворительное согласие результатов расчета и данных эксперимента в области пристенной струи (сечения l_1 и l_2 при $y < 0{,}3$ м): расчетные значения скорости в струе, правда, несколько выше, чем данные эксперимента. В области низкоскоростного течения перед манекеном (сечение l_1 при $y > 0{,}3$ м и l_2 при $0{,}6 < y < 2{,}1$ м) характерные значения скорости составляют 0,025 м/с. Здесь данные расчета в целом соответствуют экспериментальным значениям скорости. Наблюдается достаточно слабое влияние изменения формы манекена на структуру течения в этой области.

Более существенное влияние формы манекена на структуру течения можно отметить в сечении l_3, расположенном непосредственно за манекеном вблизи его поверхности (рис. 8,*f*). Диапазон изменения характерных значений скорости в этой области не превышает 0,1 м/с. Экспериментальные значения скорости ниже, чем полученные в расчетах с использованием всех форм манекена. По всей видимости, различия расчетных и экспериментальных данных в этой области связаны с тем, что при постановке численного моделирования, даже в случае детальной геометрии манекена, расположение его ног не воспроизводится точно. В то же время в сечении l_4 (рис. 8,*g*) расчетные результаты, относящиеся к скорости, для трех различных вариантов форм манекена совпадают как между собой, так и с данными эксперимента. Некоторые различия данных имеются в нижнем углу помещения при $y < 0{,}6$ м.

Параметры теплоотдачи от поверхности манекена. Распределения температуры T_w по поверхности теплового манекена, полученные в вариантах задачи с различной формой мане-

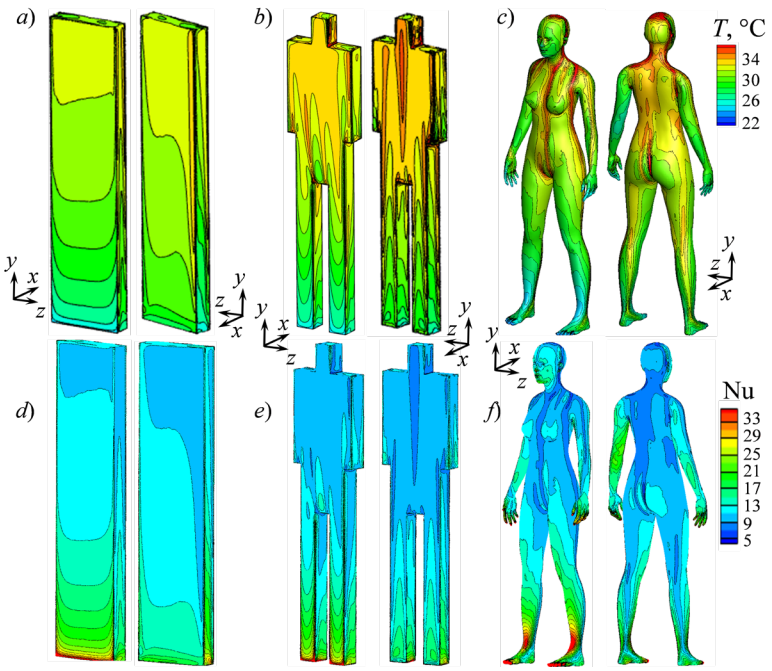


Рис. 9. Расчетные распределения температуры (*a* – *c*) и числа Нуссельта (*d* – *f*) по поверхностям манекенов различной формы: параллелепипеда (*a*, *d*), блочной (*b*, *e*) и детальной (*c*, *f*)

кена, приведены на рис. 9,*a*–*c*. Соответствующие распределения безразмерной теплоотдачи – числа Нуссельта

$$\mathrm{Nu} = q_w l_w / \lambda \left(T_{in} - T_w \right),$$

где $l_m = 0{,}1$ м для всех форм манекена, представлены на рис. 9,*d*,*e*,*f*.

В табл. 3 приведены пределы диапазонов изменения температуры по поверхностям манекенов различной формы: минимальный $T_{w,\min}$, максимальный $T_{w,\max}$; представлены также усредненные по поверхности манекена значения температуры $\langle T_w \rangle$ и числа Нуссельта $\langle \mathrm{Nu} \rangle$.

Для всех рассмотренных форм манекена распределения температуры с наветренной (противоположной направлению оси *x*) и подветренной (по направлению оси *x*) сторон различаются. С подветренной стороны значения температуры выше, чем с наветренной; в соответствии с этим теплоотдача с этой стороны ниже. Имеются локальные различия распределений температуры для разных форм манекена. Так, для наиболее простой формы (параллелепипед) распределение практически однородно в *z*-направлении, тогда как для детальной формы наблюдается неоднородное распределение.

Следует отметить увеличение температуры и уменьшение теплоотдачи по высоте теплового манекена. Минимальное значение температуры по поверхности манекена расположено в его нижней части, это значение приближено к температуре приточной воздушной струи $T_{in} = 22$ °C, и оно слабо изменяется от одной формы манекена к другой. Максимальное значение температуры расположено в верхней части манекена, вблизи изгибов поверхности. Величина $T_{w,\max}$ существенно зависит от формы манекена и принимает значения 33,6 °C для параллелепипеда, 41,7 °C для блочной формы и 51,4 °C для детальной (см. табл. 3). Широкий диапазон изменения максимальных значений температуры при детализации формы манекена свидетельствует о том, что при оценке локальных параметров те-

Таблица 3

Сравнение расчетных и экспериментальных значений параметров теплоотдачи с поверхностей манекенов различной формы

Параметр	Расчетное значение для формы манекена			Эксперимент
	параллелепипед	блочная	детальная	детальная
$T_{w,\min}$, °C	23,18	23,21	22,33	–
$T_{w,\max}$, °C	33,60	41,70	51,40	–
$\langle T_w \rangle$, °C	30,50	31,30	30,70	32,2
$\langle \mathrm{Nu} \rangle$	13,2	12,1	12,6	10,6

плового комфорта упрощение формы манекена может привести к большим погрешностям. Следует отметить, впрочем, что при столь высоких локальных значениях температуры, которые фиксировались на поверхности манекена детальной формы, в реальных условиях включаются механизмы терморегуляции; пренебрежение же последними может привести к существенно бóльшим неопределенностям.

Среднее значение температуры – интегральный параметр для данной задачи – слабо зависит от используемой геометрической формы манекена и составляет около 31 °C. Важно отметить, что экспериментальное значение средней температуры согласуется с расчетным.

Заключение

Проведено численное исследование влияния формы нагретого теплового манекена на течение и теплообмен воздуха в модельном помещении с вытесняющей вентиляцией. Рассмотрены три варианта формы манекена: параллелепипед, блочная и детальная. Расчеты выполнены на основе RANS-подхода с использованием стандартной k-ε модели турбулентности.

Для самой простой формы – параллелепипеда – проведено исследование чувствительности решения к топологии и размерности расчетной сетки. Показано, что сетка с полиэдральными элементами размерностью примерно один миллион ячеек с измельчением в области приточной струи и теплового факела позволяет получить решение, слабо зависящее от параметров сетки. Исследовано влияние входных динамических условий на получаемое решение: в рассмотренном диапазоне скоростей установлена слабая чувствительность структуры течения в окрестности манекена от входного профиля скорости.

В ходе расчетов было обнаружено, что глобальная структура течения, формирующаяся в помещении, не симметрична относительно центральной плоскости. Для одного из вариантов геометрии было получено два сошедшихся решения, в которых струя отклоняется к противоположным боковым стенкам.

Установлено, что при использовании детальной и блочной форм манекена, интенсивность свободноконвективного течения выше, чем для манекена самой простой формы – одиночного параллелепипеда. Установлено также, что упрощение формы манекена существенно влияет на локальные характеристики течения и теплообмена. В то же время интегральные параметры слабо зависят от используемой формы манекена.

В целом можно сделать вывод о том, что при необходимости использование упрощенной формы манекена оправдано и не приводит к существенному искажению решения.

Исследование проведено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант №20-58-18013.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Fanger P.O., Melikov A.K., Hanzawa H., Ring J.** Air turbulence and sensation of draught // Energy and Buildings. 1988. Vol. 12. No. 1. Pp. 21–39.

2. ANSI/ASHRAE Standard 62.1–2019. Ventilation for acceptable indoor air quality. 2019. https://www.ashrae.org/technical-resources/bookstore/standards-62-1-62-2

3. **Pei J., Rim D.** Quality control of computational fluid dynamics (CFD) model of ozone reaction with human surface: Effects of mesh size and turbulence model // Building and Environment. 2021. Vol. 189. February. P. 107513.

4. **Al Assaad D., Ghali K., Ghaddar N., Katramiz E., Ghani S.** Evaluation of different personalized ventilation air terminal devices: Inhalation vs. clothing-mediated exposures // Building and Environment. 2021. Vol. 192. April. P. 107637.

5. **Ma J., Qian H., Nielsen P.V., Liu L., Li Y., Zheng X.** What dominates personal exposure? Ambient airflow pattern or local human thermal plume // Building and Environment. 2021. Vol. 196. June. P. 107790.

6. **Liu J., Zhu S., Kim M.K., Srebric J.** A review of CFD analysis methods for personalized ventilation (PV) in indoor built environments // Sustainability. 2019. Vol. 11. No. 15. P. 4166.

7. **Berrouk A.S., Lai A.C.K., Cheung A.C.T., Wong S.L.** Experimental measurements and large eddy simulation of expiratory droplet dispersion in a mechanically ventilated enclosure with thermal effects // Building and Environment. 2010. Vol. 45. No. 2. Pp. 371–379.

8. **Taghinia J.H., Rahman M.M., Lu X.** Effects of different CFD modeling approaches and simplification of shape on prediction of flow field around manikin // Energy and Buildings. 2018. Vol. 170. 1 July. Pp. 47–60.

9. **Zukowska D., Melikov A., Popiolek Z.** Thermal plumes above a simulated sitting person with different complexity of body geometry // Proceedings of Roomvent 2007, The Tenth International Conference on Air Distribution in Rooms. Helsinki, Finland, June 13–15, 2007. Vol. 3. Pp. 191–198.

10. **Topp C., Hesselholt P., Trier M.R., Nielsen P.V.** Influence of geometry of thermal manikins on room airflow // Proceedings of ISIAQ 7th International Conference "Healthy Buildings 2003". Singapore, December 7–22, 2003. 6 p.

11. **Brohus H., Nielsen P.V.** CFD models of persons evaluated by full-scale wind channel experiments // Proceedings of Roomvent'96, The Fifth International Conference on Air Distribution in Rooms. Yokohama, Japan, July 17–19, 1996. Vol. 2. Pp. 137–144.

12. **Yan Y., Li X., Yang L., Tu J.** Evaluation of manikin simplification methods for CFD simulations in occupied indoor environments // Energy and Buildings. 2016. Vol. 127. 1 September. Pp. 611–626.

13. **Nielsen P.V., Murakami S., Kato S., Topp C., Yang J.-H.** Benchmark tests for a computer simulated person. Aalborg, Denmark: Indoor Environmental Engineering, Aalborg University, 2003. 7 p.

14. **Deevy M., Sinai Y., Everitt P., Voigt L., Gobeau N.** Modelling the effect of an occupant on displacement ventilation with computational fluid dynamics // Energy and Buildings. 2008. Vol. 40. No. 3. Pp. 255–264.

15. **Martinho N., Lopes A., Silva M.** CFD modelling of benchmark tests for flow around a detailed computer simulated person // Proceedings of the 7th International Thermal Manikin and Modelling Meeting (at University of Coimbra). September, 2008. 6 p.

16. **Martinho N., Lopes A., da Silva M.G.** Evaluation of errors on the CFD computation of air flow and heat transfer around the human body // Building and Environment. 2012. Vol. 58. December. Pp. 58–69.

17. **Wilcox D.C.** Turbulence modeling for CFD. 3-th Ed. La Cañada, California: DCW Industries, Inc., 2006. 515 p.

18. **Launder B.E., Spalding D.B.** Lectures in mathematical models of turbulence. London: Academic Press, 1972. 169 p.

Статья поступила в редакцию 27.06.2021, принята к публикации 20.08.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СТЕПАШЕВА Екатерина Дмитриевна – *студентка Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

momoirin@yandex.ru

ЗАСИМОВА Марина Александровна – *кандидат физико-математических наук, ассистент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

zasimova_ma@spbstu.ru

ИВАНОВ Николай Георгиевич – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики, заведующий научно-исследовательской лабораторией гидроаэродинамики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

ivanov_ng@spbstu.ru

REFERENCES

1. **Fanger P.O., Melikov A.K., Hanzawa H., Ring J.,** Air turbulence and sensation of draught, Energy and Buildings. 12 (1) (1988) 21–39.

2. ANSI/ASHRAE Standard 62.1–2019. Ventilation for acceptable indoor air quality. 2019. https://www.ashrae.org/technical-resources/bookstore/standards-62-1-62-2

3. **Pei J., Rim D.,** Quality control of computational fluid dynamics (CFD) model of ozone reaction with human surface: Effects of mesh size and turbulence model, Building and Environment. 189 (February) (2021) 107513.

4. **Al Assaad D., Ghali K., Ghaddar N., et al.,** Evaluation of different personalized ventilation air terminal devices: Inhalation vs. clothing-mediated exposures, Building and Environment. 192 (April) (2021) 107637.

5. **Ma J., Qian H., Nielsen P.V., et al.,** What dominates personal exposure? Ambient airflow pattern or local human thermal plume, Building and Environment. 196 (June) (2021) 107790.

6. **Liu J., Zhu S., Kim M.K., Srebric J.,** A review of CFD analysis methods for personalized ventilation (PV) in indoor built environments, Sustainability. 11 (15) (2019) 4166.

7. **Berrouk A.S., Lai A.C.K., Cheung A.C.T., Wong S.L.,** Experimental measurements and large eddy simulation of expiratory droplet dispersion in a mechanically ventilated enclosure with thermal effects, Building and Environment. 45 (2) (2010) 371–379.

8. **Taghinia J.H., Rahman M.M., Lu X.,** Effects of different CFD modeling approaches and simplification of shape on prediction of flow field around manikin, Energy and Buildings. 170 (1 July) (2018) 47–60.

9. **Zukowska D., Melikov A., Popiolek Z.,** Thermal plumes above a simulated sitting person with different complexity of body geometry, Proceedings of Roomvent 2007, The Tenth International Conference on Air Distribution in Rooms, Helsinki, Finland, June 13–15, 3 (2007) 191–198.

10. **Topp C., Hesselholt P., Trier M.R., Nielsen P.V.,** Influence of geometry of thermal manikins on room airflow, Proceedings of ISIAQ 7th International Conference "Healthy Buildings 2003", Singapore, December 7–22, 2003.

11. **Brohus H., Nielsen P.V.,** CFD models of persons evaluated by full-scale wind channel experiments, Proceedings of Roomvent'96, The Fifth International Conference on Air Distribution in Rooms, Yokohama, Japan, July 17–19, 1996. 2 (1996) 137–144.

12. **Yan Y., Li X., Yang L., Tu J.,** Evaluation of manikin simplification methods for CFD simulations in occupied indoor environments, Energy and Buildings. 127 (1 September) (2016) 611–626.

13. **Nielsen P.V., Murakami S., Kato S., et al.,** Benchmark tests for a computer simulated person, Indoor Environmental Engineering, Aalborg University, Aalborg, Denmark, 2003.

14. **Deevy M., Sinai Y., Everitt P., et al.,** Modelling the effect of an occupant on displacement ventilation with computational fluid dynamics, Energy and Buildings. 40 (3) (2008) 255–264.

15. **Martinho N., Lopes A., Silva M.,** CFD modelling of benchmark tests for flow around a detailed computer simulated person, Proceedings of the 7th International Thermal Manikin and Modelling Meeting (at University of Coimbra), September, 2008.

16. **Martinho N., Lopes A., da Silva M.G.,** Evaluation of errors on the CFD computation of air flow and heat transfer around the human body, Building and Environment. 58 (December) (2012) 58–69.

17. **Wilcox D.C.,** Turbulence modeling for CFD, 3-th Ed., DCW Industries, Inc., La Cañada, California, 2006.

18. **Launder B.E., Spalding D.B.,** Lectures in mathematical models of turbulence. Academic Press, London, 1972.

Received 27.06.2021, accepted 20.08.2021.

THE AUTHORS

STEPASHEVA Ekaterina D.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
momoirin@yandex.ru

ZASIMOVA Marina A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
zasimova_ma@spbstu.ru

IVANOV Nikolay G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
ivanov_ng@spbstu.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14308
УДК 53.07, 538.9

ПРОЕКЦИОННЫЙ КЛАССИЧЕСКИЙ ДЕТЕКТОР МОТТА

В.Н. Петров[1], **П.Г. Габдуллин**[1], **А.В. Павлов**[1],
А.Б. Устинов[1], **В.Н. Строков**[2], **Ж.Х. Дил**[2]

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

[2] Институт Пауля Шеррера,
г. Бругг, Швейцария

В работе описывается новый спиновый детектор, разработанный, сконструированный и изготовленный в СПбПУ. Такой прибор позволяет анализировать поляризацию потока вторичных электронов, сохраняя информацию об их пространственном распределении. Представлены основные этапы создания и тестирования разработанного устройства, продемонстрированы результаты испытаний его отдельных узлов. В результате доказана принципиальная возможность реализации подобных устройств. При этом продемонстрированы как высокое пространственное разрешение данного прибора, так и его эффективность. Совмещение таких детекторов с полусферическими энергоанализаторами современных электронных спектрометров позволит получать спин-разрешенные дисперсионные зависимости исследуемой структуры.

Ключевые слова: детектор Мотта, спин, электронная спектроскопия, поляризация вторичных электронов

Ссылка при цитировании: Петров В.Н., Габдуллин П.Г., Павлов А.В., Устинов А.Б., Строков В.Н., Дил Ж.Х. Проекционный классический детектор Мотта // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 112–121. DOI: 10.18721/JPM.14308

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

PROJECTING CLASSICAL MOTT POLARIMETER

V.N. Petrov[1], **P.G. Gabdullin**[1], **A.V. Pavlov**[1],
A.B. Ustinov[1], **V.N. Strocov**[2], **J.H. Dil**[2]

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russian Federation;

[2] Paul Scherrer Institute,
Brugg, Switzerland

In this paper we describe a new spin detector designed and manufactured at SPbPU. This device makes it possible to analyze the polarization of the secondary electron flux conserving the information about the electrons' spatial distribution. The main stages of development, construction and testing the detector are discussed in details. As a result, the possibility of implementing such devices has been proved in principle. At the same time, both high spatial resolution of this device and its efficiency were demonstrated. Combining such detectors with hemispherical energy analyzers will make it possible to obtain spin-resolved dispersion images of the structure under study.

Keywords: Mott detector, spin, electron spectroscopy, secondary electron polarization

Citation: Petrov V.N., Gabdullin P.G., Pavlov A.V., Ustinov A.B., Strocov V.N., Dil J.H., Projecting classical Mott polarimeter, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 112–121. DOI: 10.18721/JPM.14308

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Как известно, для описания многих физических процессов и явлений важна конфигурация спиновой структуры некоторого ансамбля частиц. Для характеристики экспериментально измеряемой спиновой структуры используется физическая величина, известная как поляризация P. Поляризация относительно определенной оси квантования следует выражению

$$P = (N^{\uparrow} - N^{\downarrow})/(N^{\uparrow} + N^{\downarrow}),$$

где $N^{\uparrow}$, $N^{\downarrow}$ – количества электронов в ансамбле, у которых проекция спина на ось квантования может принимать значения $+\hbar/2$ и $-\hbar/2$, соответственно.

Спиновая степень свободы электрона также является основой для описания множества физических явлений. Результаты спиновых измерений сыграли важную роль в понимании таких эффектов, как гигантское магнетосопротивление [1], формирование магнитных доменов [2, 3], эффект Рашбы [4], появление топологически защищенных состояний в твердом теле [5].

Прямое детектирование поляризации потока частиц возможно, например, с помощью классического детектора Мотта [6, 7]. В таком приборе электроны ускоряются до энергий порядка 40 – 100 кэВ, после чего они рассеиваются на золотой фольге. На золотой фольге возникает спин-зависимое рассеивание электронов, которое достигается ввиду значительного спин-орбитального взаимодействия, при этом электроны с проекцией спина, направленной вдоль оси квантования, имеют более высокую вероятность рассеяться в один из детекторов, а имеющие противоположную проекцию спина – в другой.

В результате описанных воздействий возникает фиксируемая экспериментально асимметрия рассеяния электронов A, которая выражается как

$$A = (N_1 - N_2)/(N_1 + N_2),$$

где N_1, N_2 – количества электронов, поступивших в первый и второй детекторы соответственно.

Ввиду линейности по спину потенциала спин-орбитального взаимодействия, принято считать, что асимметрия пропорциональна величине поляризации, т. е. $A \sim P$, что позволяет вычислять значение поляризации, если известен коэффициент пропорциональности, который характеризует измерительную систему: $P = A/S$, где S – функция Шермана.

Важным современным экспериментальным методом является фотоэлектронная спектроскопия с разрешением по углу (ФЭСУР, *англ.* Angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES) [8]. Ее использование позволяет получать спектры вторичных электронов с разрешением не только по энергии, но и по углу, под которым эти электроны эмитируются из твердого тела [8]. Поскольку указанный угол связан с величиной импульса электрона в твердом теле, ФЭСУР можно применять для прямого измерения дисперсионных зависимостей электронов $E(\mathbf{k})$ изучаемой структуры (E – энергия электронов, $\mathbf{k}$ – волновой вектор).

Имеющиеся приборы чаще всего работают следующим образом: вторичные электроны, покидающие образец, направляются в энергоанализатор, где разделяются по энергии и по углу. Затем поток электронов усиливается посредством микроканальной пластины. После микроканальной пластины электроны попадают на люминесцентный экран, где осущест-

вляется их преобразование в излучение видимого диапазона; последнее фиксируется регистрирующей камерой, находящейся вне вакуумной камеры.

Такие энергоанализаторы делают возможным одновременное определение количества частиц, их импульсов и энергий в широком диапазоне, что значительно сокращает время необходимого накопления данных. Использование полусферического энергоанализатора, применяемого в ФЭСУР, в сочетании с детектором Мотта позволяет экспериментально измерять дисперсионные зависимости с разрешением по спину и углу (ФЭССУР, *англ.* Spin- and angle- resolved photoemission spectroscopy, SARPES) [9]. Указанный комплексный метод служит незаменимым инструментом при исследовании новых материалов.

Серьезным недостатком имеющихся SARPES-приборов является одноканальный режим работы имеющихся детекторов Мотта, а значит, регистрация только части потока вторичных электронов в каждый момент времени, с энергией и проекцией импульса в узком диапазоне; при этом нивелируются все возможности, которые могло бы давать использование пространственно-чувствительных детекторов. Указанный недостаток существенно снижает эффективность проводимых экспериментов.

Одно из возможных решений этой проблемы заключается в создании детектора Мотта, у которого возможности спинового анализа должны сочетаться с пространственной чувствительностью детекторов электронов. Впервые идея подобного прибора была представлена в работе [10].

В данной работе описан процесс создания и испытания подобного многоканального детектора поляризации на основе классического детектора Мотта.

Проектирование и разработка

В качестве основы для разработки многоканального детектора поляризации был взят классический детектор Мотта, в который были внесены изменения, необходимые для обеспечения пространственного разрешения.

На рис. 1 представлен упрощенный чертеж детектора Мотта. Проектирование велось таким образом, чтобы предусмотреть монтаж прибора сразу за выходной апертурой полусферического энергоанализатора SPECS PHOIBOS-150.

Работа прибора осуществляется следующим образом. Пройдя через энергоанализатор, электроны попадают во входную апертуру *1* детектора Мотта. Внутри детектора поток электронов сначала проходит через четырехсекционную электростатическую линзу *2*, которая фокусирует поток электронов. Сфокусированный электронный поток ускоряется потенциалом 40 кВ и попадает в дрейфовое пространство детектора Мотта *3*. Затем этот поток может попасть либо на ПЗС-матрицу, либо на золотую фольгу *5* (выбор осуществляется поворотом вакуумного манипулятора).

Первый режим (в центре детектора расположена ПЗС-матрица) необходим для настройки входной электронной оптики детектора. В этом случае фиксируется изображение, полученное на выходе энергоанализатора и сфокусированное электронной оптикой детектора Мотта (рис. 2). Во втором режиме электроны рассеиваются на золотой фольге. При этом электроны, в зависимости от ориентации спина, имеют высокую вероятность рассеяться и попасть в один из четырех детекторов – по два детектора на каждую проекцию спина. В итоге устройство обеспечивает анализ поляризации потока электронов.

После рассеяния на золотой фольге электроны попадают в детектор, состоящий из магнитной фокусирующей линзы (поз. *5* на рис. 1) и ПЗС-матрицы *6*, предназначенной для детектирования высокоэнергичных электронов. Магнитная линза предназначена для фокусирования рассеявшихся электронов, а матрица служит детектором, который измеряет не только факт прибытия частицы, но и позицию пикселя, зафиксировавшего частицу. В качестве

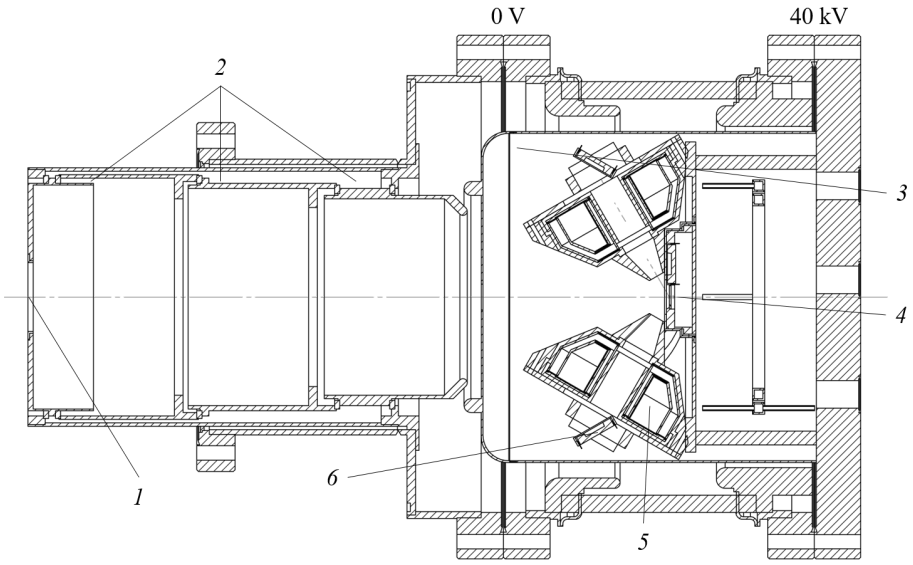


Рис. 1. Чертеж многоканального детектора Мотта:
1 – входная апертура, *2* – фокусирующая электростатическая линза, *3* – электростатический экран, *4* – золотая фольга или магнитная линза, *5* – магнитная линза, *6* – ПЗС-матрица. Надписи "0 V" и "40 kV" показывают значения потенциалов, приложенных к соответствующим частям прибора

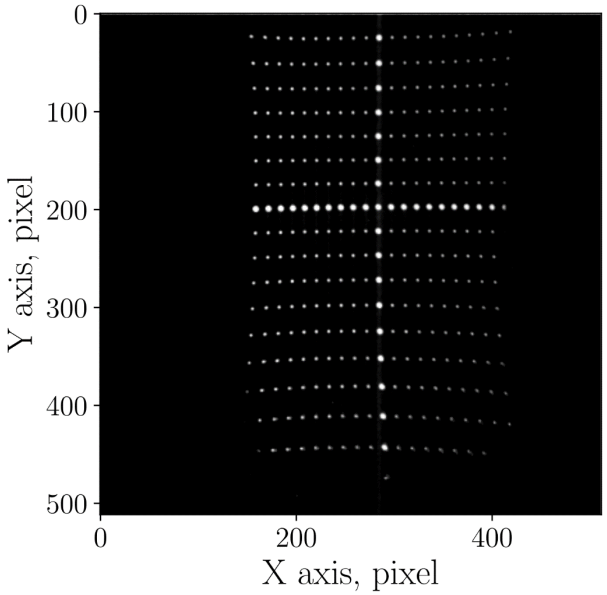


Рис. 2. Изображения апертуры, расположенной внутри энергоанализатора, полученные на ПЗС-матрице в центре детектора Мотта.
Интенсивность в каждой точке пропорциональна количеству электронов, попавших в данный пиксель матрицы. Из изображения вычтен фон, соответствующий темновому току матрицы и засветке от неупругих электронов

детектора было решено выбрать матрицы Hamamatsu S7170 (Япония), на которых отсутствие защитного слоя и ультрафиолетового фильтра позволяют эффективно детектировать высокоэнергичные заряженные частицы. Таким образом, прибор регистрировал факты соударения электронов высокой энергии с ПЗС-матрицей. Рис. 2 и 3 демонстрируют изображения

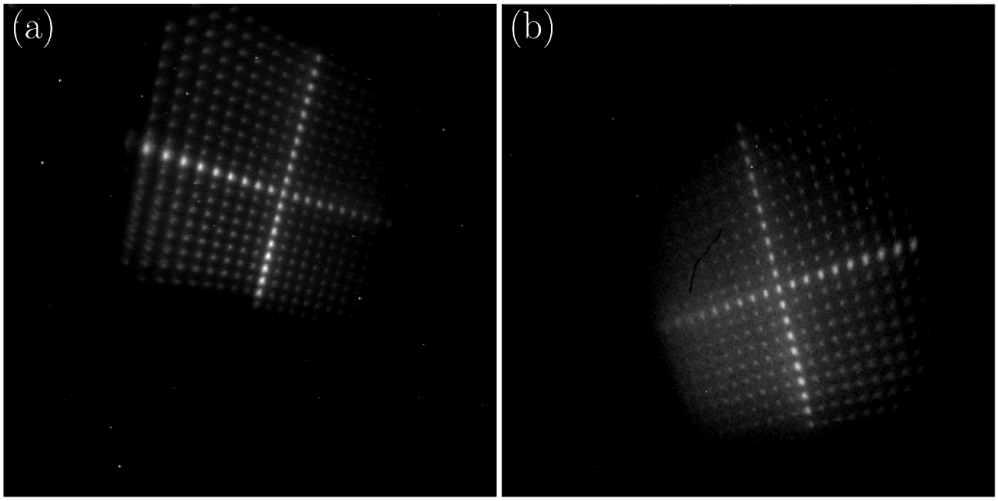


Рис. 3. Изображения апертуры, расположенной там же (см. рис. 2), но полученные на первой (*a*) и второй (*b*) ПЗС-матрицах после магнитных линз (см. также пояснения к рис. 2)

апертуры, расположенной внутри энергоанализатора, полученные на ПЗС-матрице в режиме счета вторичных электронов. Размер каждого пикселя (пк) такой матрицы составляет 24 × 24 мкм, ее разрешение – 512 × 512 пк.

Таким образом, описанный прибор обеспечивает не только спиновый анализ потока электронов, но и детектирование их распределения в пространстве. С его помощью можно измерять, например, спин-разрешенные дисперсионные соотношения $E(\mathbf{k})$ у исследуемых образцов.

Испытания и калибровка детектора Мотта

Создание прибора – это многоплановый процесс, включающий в себя несколько стадий и таких процедур, как создание чертежей прибора, изготовление его составных частей, их сварки, сборки и проверки на вакуумную герметичность. После такой проверки проводится ряд тестов на электрическую прочность изоляторов, входящих в состав детектора.

При правильном функционировании прибора, поток электронов на его входе должен без искажений попадать на золотую фольгу, а поток отразившихся от фольги электронов должен быть собран и сфокусирован на ПЗС-матрицу. Поскольку каждая точка сечения электронного потока несет информацию о физических свойствах исследуемого образца, требуется достигнуть минимального уровня искажений.

Для настройки электростатической и магнитной оптики внутрь энергоанализатора была помещена пластина с рисунком, составленным из отверстий диаметрами 0,50 и 0,25 мм. После прохождения электронов через энергоанализатор они распределялись в пространстве в соответствии с их энергией и углом выхода. Проходя через апертуру, такой поток электронов преобразовывался в изображение массива точек, электроны в которых имели близкие энергии и углы эмиссии.

Для тестирования электростатической линзы, в центр детектора Мотта (на место золотой фольги) была установлена ПЗС-матрица. Пример изображения электронного потока, полученного на этой матрице, показан на рис. 2. Здесь ось X параллельна направлению, вдоль которого изменялась энергия электронов, прошедших через энергоанализатор, а ось Y – направлению, вдоль которого измерялся угол эмиссии электронов в потоке. Четкое изображение апертуры на ПЗС-матрице соответствует оптимальной фокусировке электростатической

линзы. Настройка электронной оптики и изменение ускоряющего напряжения позволяло выбрать подходящий для эксперимента коэффициент усиления линзы.

После получения четкого изображения на ПЗС-матрице, расположенной в центре детектора Мотта, значения напряжения на электродах электростатической линзы были зафиксированы, и вместо ПЗС-матрицы в центр детектора была установлена золотая фольга.

Настройка магнитных линз проводилась путем варьирования значения тока, который протекает через катушку. Этот ток создает магнитное поле, в котором траектории электронов закручиваются вокруг оси линзы, что обеспечивает нужную фокусировку, однако с неизбежностью приводит к некоторым искажениям.

Рис. 3 демонстрирует изображения апертуры на ПЗС-матрицах, расположенных за магнитной линзой. При одинаковом направлении тока в катушке магнитной линзы изображение на левой и правой матрицах детектора Мотта должны быть повернуты в разные стороны. Небольшое размытие изображения связано с аберрациями, возникающими в сложной электронно-оптической системе, и могут быть в дальнейшем нивелированы путем более тонкой настройки системы и обработки изображения.

Последним испытанием данной системы являлось измерение асимметрии рассеяния электронов, идущих в детекторе Мотта от намагниченного образца. Для решения этой задачи было решено использовать аморфный образец борида железа FeB. Данное вещество, будучи магнитомягким материалом с прямоугольной петлей гистерезиса, обладает стабильным поверхностным магнетизмом, что делает его удобным для испытаний. В ходе эксперимента образец облучали потоком первичных электронов, а поток вторичных электронов направлялся через энергоанализатор в детектор Мотта, где осуществлялась их дисперсия по энергии с помощью полусферического зеркала; затем поток электронов попадал в детектор Мотта, где и происходил спиновый анализ.

Рис. 4 демонстрирует полученные зависимости асимметрии от энергии вторичных электронов, идущих от образца, для двух диапазонов энергии: 8,5 – 11,5 и 37 – 43 эВ (центральные значения энергии – 10 и 40 эВ соответственно). Как было отмечено выше, при прохож-

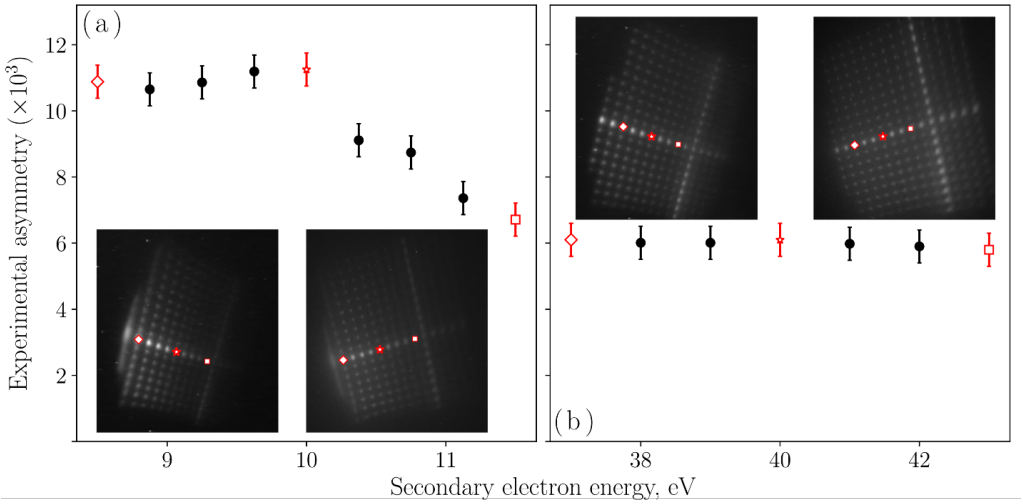


Рис. 4. Зависимости асимметрии потока электронов от энергии низкоэнергетических (*a*) и высокоэнергетических (*b*) вторичных электронов, идущих от образца, намагниченного боридом железа (измерения проведены с помощью детектора Мотта).
На вставках даны изображения с двух ПЗС-матриц (см. рис. 3), где ромбами, звездами и прямоугольниками помечены точки, сигнал с которых использовался для расчета асимметрии (они отмечены теми же символами на графиках)

дении через энергоанализатор с апертурой, поток электронов преобразуется в массив точек. При этом электроны внутри каждой точки имеют близкие значения энергии и угла выхода. Этот факт можно использовать для определения зависимости асимметрии потока электронов от энергии. Незатушеванными символами на рис. 4 показаны точки, уровень сигнала которых (см. изображения на вставке) использовался для расчета асимметрии. Анализ данных рис. 4 позволяет заключить, что низкоэнергетические электроны обладают более высокой поляризацией, по сравнению с более высокоэнергетичными, что хорошо согласуется с литературными данными [11, 12].

Дальнейшие эксперименты позволят определить значение функции Шермана S для данного детектора Мотта. После окончательной настройки всех частей системы станет возможным прямое измерение спин-разрешенных дисперсионных зависимостей для вторичных электронов.

Заключение

В данной работе описан процесс создания и испытания нового проекционного классического детектора Мотта. Продемонстрированы результаты испытаний отдельных узлов устройства на различных этапах его создания.

Хотя созданное устройство требует финальной наладки и ввода в эксплуатацию, уже получен главный результат: доказана принципиальная возможность реализации подобных устройств. При этом продемонстрированы как высокое пространственное разрешение данного прибора, так и его эффективность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Baibich M.N., Broto J.M., Fert A., et al.** Giant magnetoresistance of (001) Fe/(001)Cr magnetic superlattices // Physical Review Letters. 1988. Vol. 61. No. 21. P. 2472.

2. **Kirschner J., Rebenstorff D., Ibach H.** High-resolution spin-polarized electron-energy-loss spectroscopy and the stoner excitation spectrum in nickel // Physical Review Letters. 1984. Vol. 53. No. 7. P. 698.

3. **Vaterlaus A., Stamm C., Maier U., Pini M.G., Politi P., Pescia D.** Two-step disordering of perpendicularly magnetized ultrathin films // Physical Review Letters. 2000. Vol. 84. No. 10. P. 2247.

4. **Hoesch M., Muntwiler M., Petrov V.N., Hengsberger M., Patthey L., Shi M., Falub M., Greber T., Osterwalder J.** Spin structure of the Shockley surface state on Au (111) // Physical Review B. 2004. Vol. 69. No. 24. P. 241401.

5. **Hasan M.Z., Kane Ch.L.** Colloquium: topological insulators // Reviews of Modern Physics. 2010. Vol. 82. No. 4. P. 3045.

6. **Petrov V.N., Galaktionov M.S., Kamochkin A.S.** Comparative tests of conventional and retarding-potential Mott polarimeters // Review of Scientific Instruments. 2001. Vol. 72. No. 9. Pp. 3728–3730.

7. **Petrov V.N., Grebenshikov V.V., Grachev B.D., Kamochkin A.S.** New compact classical 40 kV Mott polarimeter // Review of Scientific Instruments. 2003. Vol. 74. No. 3. Pp. 1278–1281.

8. **Шикин А.М.** Взаимодействие фотонов и электронов с твердым телом. СПб.: Издательство ВВМ, 2008. 11 с.

9. **Hoesch M., Greber T., Petrov V.N., Muntwiler M., Hendsberger M., Auwarter W., Osterwalder J.** Spin-polarized Fermi surface mapping // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 2002. Vol. 124. No. 2–3. Pp. 263–279.

10. **Strocov V.N., Petrov V.N., Dil J.H.** Concept of a multichannel spin-resolving electron analyzer based on Mott scattering // Journal of Synchrotron Radiation. 2015. Vol. 22. Part 3. May. Pp. 708–716.

11. **Penn D.R., Apell S.P., Girvin S.M.** Theory of spin-polarized secondary electrons in transition metals // Physical Review Letters. 1985. Vol. 55. No. 5. P. 518.

12. **Oepen H.P., Frömter R.** Scanning electron microscopy with polarization analysis // Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials (Eds. H. Kronmüller, S. Parkin, R. Wiesendanger, G. Guntherodt). Wiley Online Library, 2007. https: //doi.org/10.1002/9780470022184. hmm309

Статья поступила в редакцию 28.06.2021, принята к публикации 05.07.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПЕТРОВ Владимир Никифорович – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
petrov@physics.spbstu.ru

ГАБДУЛЛИН Павел Гарифович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
gabdullin_pg@spbstu.ru

ПАВЛОВ Александр Валерьевич – *преподаватель кафедры общей физики Санкт-Петербургского национального исследовательского академического университета имени Ж.И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
a.pavlov@physics.spbstu.ru

УСТИНОВ Александр Борисович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ustinov@physics.spbstu.ru

СТРОКОВ Владимир Николаевич – *доктор физико-математических, наук, научный сотрудник Института Пауля Шеррера, г. Бругг, Швейцария.*

5232, 111, Forschungsstrasse, Villigen PSI, Switzerland
vladimir.strocov@psi.ch

ДИЛ Жан Хьюго – *PhD, глава научной группы CORHEE Института Пауля Шеррера, г. Бругг, Швейцария.*

5232, 111, Forschungsstrasse, Villigen PSI, Switzerland
jan-hugo.dil@psi.ch

REFERENCES

1. **Baibich M.N., Broto J.M., Fert A., et al.,** Giant magnetoresistance of (001) Fe/(001)Cr magnetic superlattices, Phys. Rev. Lett. 61 (21) (1988) 2472.

2. **Kirschner J., Rebenstorff D., Ibach H.,** High-resolution spin-polarized electron-energy-loss spectroscopy and the stoner excitation spectrum in nickel, Phys. Rev. Lett. 53 (21) (1988) 698.

3. **Vaterlaus A., Stamm C., Maier U., et al.,** Two-step disordering of perpendicularly magnetized ultrathin films, Phys. Rev. Lett. 84 (10) (2000) 2247.

4. **Hoesch M., Muntwiler M., Petrov V.N., et al.,** Spin structure of the Shockley surface state on Au (111), Phys. Rev. B. 69 (24) (2004) 241401.

5. **Hasan M.Z., Kane Ch.L.,** Colloquium: topological insulators // Rev. Mod. Phys. 82 (4) (2010) 3045.

6. **Petrov V.N., Galaktionov M.S., Kamochkin A.S.,** Comparative tests of conventional and retarding-potential Mott polarimeters, Rev. Sci. Instr. 72 (9) (2001) 3728–3730.

7. **Petrov V.N., Grebenshikov V.V., Grachev B.D., Kamochkin A.S.,** New compact classical 40 kV Mott polarimeter, Rev. Sci. Instr. 74 (3) (2003) 1278–1281.

8. **Shikin A.M.,** Vzaimodeystaiye fotonov i elektronov s tverdym telom [Interaction of photons and electrons with solids], BBM Publishing, St. Petersburg, 2008 (in Russian).

9. **Hoesch M., Greber T., Petrov V.N., et al.,** Spin-polarized Fermi surface mapping, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 124 (2–3) (2002) 263–279.

10. **Strocov V.N., Petrov V.N., Dil J.H.,** Concept of a multichannel spin-resolving electron analyzer based on Mott scattering, J. Synchrotron Rad. 22-3 (May) (2015) 708–716.

11. **Penn D.R., Apell S.P., Girvin S.M.,** Theory of spin-polarized secondary electrons in transition metals, Phys. Rev. Lett. 55 (5) (1985) 518.

12. **Oepen H.P., Frömter R.,** Scanning electron microscopy with polarisation analysis, Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials (Eds. H. Kronmüller, S. Parkin, R. Wiesendanger, G. Guntherodt). Wiley Online Library, 2007. https: //doi.org/10.1002/9780470022184. hmm309

Received 28.06.2021, accepted 05.07.2021.

THE AUTHORS

PETROV Vladimir N.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
petrov@physics.spbstu.ru

GABDULLIN Pavel G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
gabdullin_pg@spbstu.ru

PAVLOV Alexander V.
Alferov University of RAS
8-3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
a.pavlov@physics.spbstu.ru

USTINOV Alexander B.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
ustinov@physics.spbstu.ru

STROCOV Vladimir N.
Paul Scherrer Institute
111, Forschungsstrasse, Villigen PSI, 5232, Switzerland
vladimir.strocov@psi.ch

DIL Jan Hugo
Paul Scherrer Institute
111, Forschungsstrasse, Villigen PSI, 5232, Switzerland
jan-hugo.dil@psi.ch

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14309
УДК 621.455.4; 621.455.34

МОДЕЛЬ ИОННО-ПЛАЗМЕННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО РАКЕТНОГО ДВИГАТЕЛЯ С СИСТЕМОЙ УДАЛЕННОГО КОНТРОЛЯ И УПРАВЛЕНИЯ

Д.Б. Дюбо[1], **С.Б. Макаров**[1], **Ю.В. Кулешов**[2], **П.С. Гончаров**[2], **Н.А. Шуневич**[2], **В.В. Мартынов**[2], **О.Ю. Цыбин**[1]

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация;

[2] Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Российская Федерация

Данная статья продолжает цикл публикаций о создании ионно-плазменного электрического ракетного двигателя (ИЭРД) космического аппарата. С целью контроля и управления работой двигателя предлагается использовать систему с обратной связью, основанную на сигнале, пропорциональном интенсивности излучения плазмы ИЭРД. Предполагается, что интенсивность такого излучения в ультрафиолетовом, видимом и инфракрасном диапазонах пропорциональна мгновенной силе тяги ИЭРД. Соответственно, введение сигнала с датчика регистрации излучения в цепь обратной связи позволит создать бортовую замкнутую систему контроля и управления работой ИЭРД. Для использования в данной системе рассматривается фотоприемник на основе динамического *p—i—n*-диода-интегратора.

Ключевые слова: ионно-плазменный электрический ракетный двигатель, нейтрализация, излучение плазмы, фотоприемник, автоматическое управление

Ссылка при цитировании: Дюбо Д.Б., Макаров С.Б., Кулешов Ю.В., Гончаров П.С., Шуневич Н.А., Мартынов В.В., Цыбин О.Ю. Модель ионно-плазменного электрического ракетного двигателя с системой удаленного контроля и управления // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 122–132. DOI: 10.18721/JPM.14309

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creative-commons.org/licenses/by-nc/4.0/)

A MODEL OF AN ION PLASMA ELECTRICALLY POWERED SPACECRAFT PROPULSION WITH A REMOTE MONITORING AND A CONTROL SYSTEM

D.B. Dyubo[1], **S.B. Makarov**[1], **Yu.V. Kuleshov**[2], **P.S. Goncharov**[2], **N.A. Shunevich**[2], **V.V. Martynov**[2], **O.Yu. Tsybin**[1]

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

[2] Military Space Academy Named after A.F. Mozhaysky, St. Petersburg, Russian Federation

This paper continues the publication cycle on developing the ion plasma electrically powered spacecraft propulsion (EPSP) of the spacecraft. For monitoring and control of the EPSP operation, a feedback system based on a signal proportional to the EPSP plasma radiation intensity has been proposed to be used. It was assumed that the radiation intensity in the ultraviolet, visible and infrared ranges being proportional to the instantaneous thrust value of the EPSP. Accordingly, the introduction of a signal from the radiation registration detector into the feedback loop should allow to create an onboard closed

system for monitoring and control of the EPSP operation. A photodetector based on a dynamic *pin*-diode integrator was considered for use in this system.

Keywords: ion plasma thruster, acceleration, neutralization, plasma radiation, photodetector, automatic control

Citation: Dyubo D.B., Makarov S.B., Kuleshov Yu.V., Goncharov P.S., Shunevich N.A., Martynov V.V., Tsybin O.Yu., A model of an ion plasma electrically powered spacecraft propulsion with a remote monitoring and a control system, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 122–132. DOI: 10.18721/JPM.14309

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

В последние годы стремительно растет активность освоения космоса. Происходит переход от создания больших космических аппаратов к малым, а также от запусков одиночных космических аппаратов к их групповым запускам. Немалый интерес представляет и освоение дальнего космического пространства, а также межпланетные миссии. Эта ситуация предъявляет новые требования к ионно-плазменным электрическим ракетным двигателям (ИЭРД), которые обеспечивают ускоренное движение космических аппаратов в космическом пространстве [1 – 4]. В таких двигателях на начальном этапе реализуется ионизация частиц в потоке рабочего тела, а затем осуществляется ускорение полученных ионов с использованием электрического поля. Ускоренные ионы нейтрализуются при выходе из ускоряющей системы двигателя, затем следует свободное расширение потока образовавшихся нейтралов в космическое пространство. В результате электрическая энергия преобразуется в кинетическую энергию движения аппарата. Коэффициент полезного действия двигателя можно охарактеризовать параметром, который определяет эффективность преобразования электрической энергии в кинетическую энергию потока рабочего тела [4]. Тяга, создаваемая ИЭРД, принципиально ограничена, так как для получения значительных механических импульсов хотя и требуются высокие значения электрической мощности, но они не должны превосходить мощности солнечных батарей системы электроснабжения космического аппарата. Традиционно основным рабочим телом ИЭРД служит ксенон, преимуществами которого являются химическая инерция и относительно большая атомная масса. Однако ксенон имеет высокую стоимость и ограниченное производство в силу недостаточных запасов земных ресурсов.

Указанные недостатки использования ксенона в ИЭРД порождают потребность в разработке и создании новых ИЭРД, действующих на рабочем теле, альтернативном ксенону. Новые ИЭРД должны быть простыми, экономичными, стабильными, хорошо управляемыми, надежными и долговечными, а также с приемлемой стоимостью. Такой двигатель должен безотказно допускать многократные включения и паузы в работе. Кроме того, рост числа космических аппаратов, на которые устанавливаются ИЭРД, требует совершенствования системы управления движением этих аппаратов. В настоящее время управление работой ИЭРД находится под контролем блока питания и управления (БПУ) ИЭРД. Информация о работе ИЭРД через систему телеметрического контроля поступает на наземный комплекс управления полетом космического аппарата. После обработки информации, полученной с наземного комплекса, на аппарат поступают управляющие команды (через бортовой комплекс управления в БПУ).

Набор основных рабочих параметров ИЭРД включает:

силу тяги F,

массовый расход рабочего тела $\dot{m}_w$,

ток ионного пучка I_i,
скорость v_i ускоренных ионов на выходе из ускорителя,
напряжение ускорения U_k каждого k-го электрода,
скорость ускоренных нейтральных частиц в факеле v_{ex},
значение потока нейтральных частиц $\dot{m}_{ex}$ в уходящем факеле
и некоторые другие.

Поскольку отдельно взятый параметр не дает полного представления о работе ИЭРД, все они должны измеряться одновременно и логически совмещаться в командах. Последнее представляет собой довольно сложную пошаговую процедуру, в которой могут возникать ошибки и ложные сигналы.

В предположении, что реактивный факел представляет собой моноскоростной поток нейтральных частиц, силу тяги можно определить через упрощенную формулировку закона сохранения импульса [1 – 4]:

$$F = \frac{d\left(mv\right)_{ex}}{dt} = \dot{m}_{ex} v_{ex}, \dot{v}_{ex} = 0, \tag{1}$$

где $\dot{m}_{ex}$, v_{ex} – массовый расход рабочего тела и скорость истечения его частиц.

Параметры $\dot{m}_{ex}$, v_{ex} в формуле (1) относятся только к нейтральному выходному факелу. Из-за зеркальной зарядки космического аппарата при уходе заряженных частиц, ионы не могут полностью его покинуть и тем самым создать силу тяги. Обычно указанные параметры не доступны для простого измерения на борту. В упрощенной теории полагают, что параметр $\dot{m}_{ex}$ равен расходу рабочего тела, а скорость v_{ex} соответствует разности потенциалов U, пройденной ионом от плоскости инжекции до эквипотенциальной области, в которой происходит нейтрализация.

В этом представлении идеальный ИЭРД обеспечивает значение тяги F, созданное током ионного пучка I_i однозарядных ионов, ускоренных электрическим напряжением U [4]:

$$F = I_i \sqrt{\frac{2\mu_i U}{e}}, \tag{2}$$

где μ_i, e – масса и элементарный заряд иона.

Формула (2) выведена для идеального случая, когда каждый ион должен быть мгновенно нейтрализован в плоскости его выхода из ускоряющего модуля. Коррекцию можно произвести с помощью двух дополнительных параметров: η_m, η_n – эффективность использования массы рабочего тела и эффективность массового использования, соответственно. От них зависит сила тяги $F(t)$:

$$F\left(t\right) = \eta_m \eta_n I_i\left(t\right) \sqrt{\frac{2\mu_i U}{e}}. \tag{3}$$

Величины η_m, η_n есть соотношения, которыми измеряются эффективности соответственно ионизации нейтрального потока рабочего тела и нейтрализации его ионизованного потока.

Каждый параметр в соотношении (3) может быть нестабильным и зависеть от времени. Кроме того, часть электрической мощности ионного потока затрачивается на электромагнитное излучение. Насколько можно судить по данным из известных литературных источников, связь плазменного электромагнитного излучения с силой и мощностью тяги ЭРД пока не определена.

Целью данной работы является описание модели ионно-плазменного электрического ракетного двигателя с системой удаленного контроля и управления; при этом в основе описания лежит идея использования излучения плазмы ИЭРД для генерации сигнала и передачи его в бортовой комплекс управления космическим аппаратом и передачи в составе телеметрической информации на наземный комплекс управления полетом.

Излучение плазмы ИЭРД

Для мониторинга функционирования и управления работой ИЭРД (в том числе стабилизации силы тяги) предлагается использовать сигнал с датчика, регистрирующего интенсивность излучения плазмы ИЭРД. Для этого необходимо проводить измерения интегрального контрольного сигнала и пользоваться полученными данными для автоматического регулирования в цепи обратной связи. Контрольный сигнал пропорционален силе тяги F.

Принцип создания механической тяги заключается в том, что поверхностные заряды, индуцированные на поверхностях электродов ускорителя, формируют силу притяжения электродов к ускоренным ионам. Электрическое поле внешних источников, совместно с собственным электрическим полем ускоряемых ионов, индуцируют заряды. Ионы могут производить на данном электроде положительную силу тяги в течение отрезка времени, пока они находятся в ускоряющем электрическом поле со стороны этого электрода. Сила, порождаемая ионом, становится нулевой сразу после его нейтрализации, поскольку нейтральные частицы не взаимодействуют с электродами ИЭРД.

Напряжение U в формулах (2) и (3) равно разности потенциалов между точкой инжекции иона из ионизатора в межэлектродный зазор ускорительного модуля и ускоряющим электродом (плоскостью выхода иона из ускорителя). Если ион оседает до своей нейтрализации на каком-либо электроде ускорительного модуля, то его общий вклад в силу тяги исчезает. Кроме того, снижение тяги происходит в случае неполной нейтрализации ионов. Таким образом, ионный ток I_i в формулах (2) и (3) оказывается неизмеримым по величине и не связанным однозначно с силой тяги F. Точнее говоря, значение силы тяги двигателя можно оценивать путем измерения параметров плазмы, которая формируется в объеме нейтрализации.

Известно, что интенсивное излучение ультрафиолетового, видимого, инфракрасного света и микроволн от потока ускоренных ионов сопровождает работу ИЭРД [7 – 10]. Плазма ИЭРД обеспечивает высокую светимость излучения на стадии нейтрализации, что позволяет проводить ее диагностику с помощью оптической и микроволновой спектроскопии [7 – 9]. Многие публикации содержат фотографии яркого светового потока, который сопровождает работу ИЭРД, в том числе в нашей статье [10].

Свечение факела плазмы ИЭРД возникает, главным образом, вследствие рекомбинации, которая вызвана нейтрализацией ионных зарядов, столкновениями и резонансным обменом зарядов, спонтанной релаксацией возбуждения. Основные механизмы излучения определяются как индивидуальными свойствами заряженных и нейтральных частиц, содержащихся в плазме, так и ее коллективными свойствами, преимущественно колебательно-волнового характера. Излучение индивидуальных частиц генерируется электронными переходами в атоме или ионе между дискретными энергетическими уровнями, электронным торможением в облаке ионов, циклотронным излучением электронов в магнитном поле.

Структура бортовой системы удаленного контроля и управления

Для реализации удаленного контроля и управления работой ИЭРД, в его конструкцию необходимо включить фотоприемник, регистрирующий интенсивность свечения плазмы [11, 12]. Соответственно, интенсивность электромагнитного излучения плазмы может служить параметром оперативного контроля параметров ИЭРД в процессе его работы.

Интенсивность I_{rad} (ω, t) излучения в ультрафиолетовой, видимой и инфракрасной областях можно представить в виде следующего интегрального параметра:

$$I_{rad}(\omega,t)=\eta_{rad}(\omega)I_i(t). \tag{4}$$

В соотношение (4) входит коэффициент эффективности генерации частотно-зависимого излучения η_{rad} (ω), имеющий значение менее единицы, т. е. η_{rad} (ω) < 1. Когда бортовой приемник принимает излучение I_{rad} (ω, t), исходящее из объема нейтрализации, параметр η_{rad} (ω) показывает эффективность нейтрализации рабочего ионного тока I_i (t) как основного источника излучения. Интенсивность излучения I_{rad} (ω, t) можно представить сигналом S(ω, t), зависящим от времени, который по сути учитывает колебания всех значений параметров: вакуумных условий и температуры, источника электроэнергии, потока рабочего тела, ионизатора, потерь частиц в ускорителе, нестабильности нейтрализации ионного потока.

Сигнал $S(\omega, t) = kI_{rad}(\omega, t)$ может также служить комплексным индикатором контроля и управления работой ИЭРД. Соответственно, формулы (2), (4) показывают, что сигнал S(ω, t) пропорционален силе тяги F(t):

$$S(\omega,t)=\left[\left(k\cdot\eta_{rad}/\eta_n\eta_m\right)\left(e/2\mu_iU\right)^{1/2}\right]\cdot F(t)=\mathrm{const}(\omega)F(t), \tag{5}$$

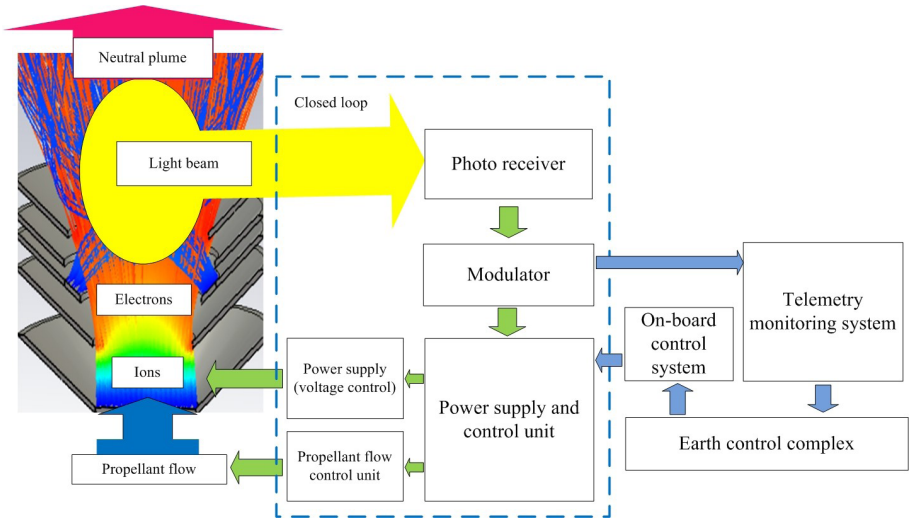
и может быть использован для контроля величины силы тяги F(t) в бортовом комплексе управления.

На рисунке показана упрощенная блок-схема функционирования ИЭРД с замкнутой системой удаленного контроля и управления. Конструкция ИЭРД, пространственные характеристики ионных и электронных пучков в самостоятельном электрическом поле, а также индуцированный поверхностный электрический заряд были рассчитаны с помощью программного пакета Computer Science Technology (CST) Particle studio [5, 6].

На блок-схеме показаны поток рабочего тела (Propellant flow), ускоренные ионные (Ions) и электронные (Electrons) потоки, совмещенные друг с другом внутри зоны нейтрализации, и нейтральный выходной факел (Neutral plume).

В принципе такая ионно-электронная схема нейтрализации по своему устройству является общей для широко используемых как сеточных, так и холловских ЭРД.

В составе ИЭРД с замкнутой системой удаленного контроля и управления показаны фотоприемник (Photo receiver), модулятор (Modulator), блок питания и управления (БПУ, Power supply and control unit) ИЭРД, источник питания (Power supply (voltage control)) и блок управления расходом рабочего тела (Propellant flow control unit). Источник питания электрической энергией, управляемый БПУ, генерирует напряжение, приложенное к электродам ИЭРД. Излучение плазмы, фотоприемник, модулятор, блок питания и управления, источник питания и блок управления расходом рабочего тела создают обратную связь, обеспечивающую автоматическое управление работой ИЭРД. Фотоприемник генерирует мгновенный сигнал управления, направленный в модулятор. Сигнал из модулятора поступает в БПУ и в систему телеметрического контроля (Telemetry monitoring system), которая отправляет информацию о работе ИЭРД на наземный комплекс управления (Earth control complex). После обработки информации о работе ИЭРД, полученной наземным комплексом управления от космического аппарата, при необходимости отправляются управляющие команды в бортовой комплекс управления (On-board control system)). В случае нестабильности силы тяги и, соответственно, коррелированных изменений излучения плазмы, замкнутая система удаленного контроля и управления обеспечивает оперативную стабилизацию путем коррекции напряжений на электродах ускоряющего модуля.



Блок-схема функционирования ИЭРД с замкнутой системой удаленного контроля и управления

Для обеспечения корректной работы ИЭРД, к фотоприемнику при разработке должен предъявляться ряд требований [13, 14]: малая масса и малые габаритные размеры, надежность, длительный срок службы, высокая чувствительность, низкий коэффициент шума и наличие шумовой защиты. Широко известные фотодиоды не содержат интегрирования амплитудно-временных характеристик шума и сигналов в самом устройстве, поэтому для их работы в составе ИЭРД необходимы дополнительные внешние модули широкого динамического и частотного диапазонов, включающие предусилитель, интегратор, компаратор и другие компоненты.

К числу фотоприемников, удовлетворяющих указанным требованиям, относится недавно разработанный новый фотодетектор-интегратор, основанный на динамическом *p–i–n*-диоде-триоде, включающем ряд необходимых функций в одном устройстве [15]. Указанный диод-триод с захваченными в ловушку носителями заряда и встроенным потенциальным барьером, формируемым в области затвора, представляет собой устройство, обладающее отношением сигнал/шум более единицы и высокой чувствительностью в диапазоне длин волн от 400 до 700 нм. Экспериментальные измерения показали, что характеристики устройства близки к требованиям по его использованию в бортовой системе удаленного контроля и управления ИЭРД [16, 17]. Выходной аналоговый сигнал пропорционален поглощенной энергетической дозе излучения плазмы. Таким образом, фотодетектор выступает в качестве интегратора заряда и компаратора, который работает как преобразователь «доза облучения – интервал времени». Измерение задержки времени фототока (а не его величины) обеспечивает новый эффективный метод регистрации излучения плазмы. Уровень шума и другие паразитные сигналы снижаются эффектом усреднения в самом устройстве. Величина прямого тока контролируется только прямым напряжением и не зависит от интенсивности излучения.

Заключение

В основе функционирования замкнутой системы удаленного контроля и управления действием ионно-плазменного электрического ракетного двигателя (ИЭРД) космического аппарата лежит использование излучения плазмы в ультрафиолетовом, видимом и инфракрасном диапазонах в качестве сигнала, характеризующего режим работы этого двигателя. Система должна измерять, точно регулировать тягу ИЭРД и передавать полученные данные через систему телеметрического контроля на наземный комплекс управления полетом кос-

мического аппарата. Предположение о том, что в соответствии с соотношением (5) сигнал $S(\omega, t)$ пропорционален силе тяги $F(t)$ ИЭРД, позволяет построить конструкцию нового ИЭРД с замкнутой системой удаленного контроля и управления работой (планируется испытать новый ИЭРД экспериментально).

Устройством для получения и сбора исходных данных выбран и предложен фотодетектор на основе p–i–n-фотодиода-триода, работающего в динамическом режиме и имеющего подходящие свойства и параметры. Предлагаемый фотодетектор должен позволить в удаленном и автоматическом режимах устанавливать требуемые параметры функционирования ИЭРД, обеспечивать более точное выполнение маневров космического аппарата, быстро выявлять ошибки и неисправности в работе ИЭРД, контролировать и оптимизировать потребление рабочего тела.

Работа частично поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации по контракту от 17 ноября 2020 №075-15-2020-934.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Nauschütt M., Kiefer B., Kunze F., et al.** Ion thrusters for electric propulsion: Scientific issues developing a niche technology into a game changer // Review of Scientific Instruments. 2020. Vol. 91. No. 6. P. 061101.

2. **Levchenko I., Xu S., Mazouffre S., Lev D., Pedrini D., Goebel D., Garrigues L., Taccogna F., Bazaka K.** Perspectives, frontiers, and new horizons for plasma-based space electric propulsion // Physics of Plasmas. 2020. Vol. 27. No. 2. P. 020601.

3. **Levchenko I., Bazaka K., Ding Y., et al.** Space micropropulsion systems for Cubesats and small satellites: From proximate targets to furthermost frontiers // Applied Physics Reviews. 2018. Vol. 5. No. 1. P. 011104.

4. **Goebel D.M., Katz I.** Fundamentals of electric propulsion ion and Hall thrusters. Hoboken, New Jersey, USA: John Wiley & Sons, 2008. Pp. 1–507.

5. **Kurushin A.** Basic course of design of microwave devices using CST Studio Suite. Moscow: OneBook, 2014. 433 p.

6. **Дюбо Д.Б., Цыбин О.Ю.** Компьютерная модель ускорителя ионов с контактной ионизацией для электроракетных двигателей космических летательных аппаратов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 78–91.

7. **Holste K., Dietz P., Scharmann S., Keil K., Henning T., Zschätzsch D., Reitemeyer C.M., Batishchev O., Martinez-Sanchez M.** Use of emission spectroscopy for real-time assessment of relative wall erosion rate of BHT-200 hall thruster for various regimes of operation // Vacuum. 2010. Vol. 84. No. 9. Pp. 1085–1091.

8. **Ferreira J.L., Souza J.H.C., Rego I.S., Ferreira I.S.** Plasma diagnostic and performance of a permanent magnet Hall thruster. 2004. Режим доступа: https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00003100.

9. **Nishiyama K., Shimizu Y., Funaki I., Kuninaka H., Toki K.** Measurements of the electromagnetic emissions from the MUSES-C ion engine system // Proceedings of the 27th International Electric Propulsion Conference, 15–19 October, 2001, Pasadena, CA. 2001. Paper IEPC-01-112.

10. **Цыбин О.Ю., Макаров С.Б., Дюбо Д.Б., Кулешов Ю.В., Гончаров П.С., Мартынов В.В., Шуневич Н.А.** Электростатический ионный ускоритель с контактной ионизацией для перспективных электрических ракетных двигателей // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 2. С. 99–115.

11. **Пеньков М.М., Гончаров П.С., Мартынов В.В., Цыбин О.Ю.** Электроракетный двигатель. Патент 2726152 МПК H05H 1/54 (2006.01) F03H 1/00 (2006.01) B64G 1/54 (2006.01). Заявитель и

патентообладатель: Федеральное государственное бюджетное военное образовательное учреждение высшего образования «Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского» Министерства обороны Российской Федерации (RU). № 2019140727; заявл. 9.12.2019; опубл. 09.07.2020, Бюлл. № 19.

12. **Гончаров П.С., Мартынов В.В., Шуневич Н.А., Цыбин О.Ю.** Использование электромагнитного излучения плазмы электрического ракетного двигателя // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. 2020. № 11. С. 197–202.

13. **Kawabata Y., Kawakatsu Y.** On-board orbit determination using sun sensor and optical navigation camera for deep-space missions // Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences. 2017. Vol. 15. Pp. 13–19.

14. **Hufenbach B., Habinc S., Vuilleumier P.** Space applications for smart sensors // European Space Agency. European Space Research and Technology Centre. 1999. Pp. 9–16. Режим доступа: http://microelectronics. esa.int/vhdl/doc/ SmartSensor.pdf

15. **Okhonin S., Gureev M., Sallin, D., et al.** A dynamic operation of a *pin* photodiode // Applied Physics Letters. 2015. Vol. 106. No. 3. P. 031115.

16. **Dyubo D., Tsybin O.Yu.** A novel photodiode in on-board micro receiver in 400–800 nm range // Proceedings of the First Joint International Conference on Astrophysics for Young Scientists. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University. Higher school of Applied Physics and Space Technologies. St. Petersburg, 2017. Pp. 53–57.

17. **Дюбо Д.Б., Цыбин О.Ю.** Связь объемных и поверхностных эффектов с высотой зарядового барьера в динамическом *p–i–n*-фотодиоде // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 2. С. 16–25.

Статья поступила в редакцию 15.06.2021, принята к публикации 06.07.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ДЮБО Дмитрий Борисович – *инженер Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

dyubo_db@spbstu.ru

МАКАРОВ Сергей Борисович – *доктор технических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, главный научный сотрудник научной лаборатории «Космические телекоммуникационные системы» того же университета, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

makarov@cee.spbstu.ru

КУЛЕШОВ Юрий Владимирович – *доктор технических наук, профессор, заместитель начальника Военно-космической академии имени А.Ф. Можайского по учебной и научной работе Военно-космической академии имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

197198, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Ждановская ул., 13

vka@mil.ru

ГОНЧАРОВ Павел Сергеевич – *кандидат технических наук, начальник 12-го отдела Военного института (научно-исследовательского) Военно-космической академии имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

197198, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Ждановская ул., 13

vka@mil.ru

ШУНЕВИЧ Николай Александрович – *кандидат технических наук, начальник лаборатории, старший научный сотрудник 122-й лаборатории 12-го отдела Военного института (научно-исследовательского) Военно-космической академии имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

197198, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Ждановская ул., 13

vka@mil.ru

МАРТЫНОВ Виктор Васильевич – *старший научный сотрудник 121-й лаборатории 12-го отдела Военного института (научно-исследовательского) Военно-космической академии имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

197198, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Ждановская ул., 13

vka@mil.ru

ЦЫБИН Олег Юрьевич – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

otsybin@rphf.spbstu.ru

REFERENCES

1. **Nauschütt M., Kiefer B., Kunze F., et al.,** Ion thrusters for electric propulsion: Scientific issues developing a niche technology into a game changer, Rev. Sci. Instrum. 91 (6) (2020) 061101.

2. **Levchenko I., Xu S., Mazouffre S., et al.,** Perspectives, frontiers, and new horizons for plasma-based space electric propulsion, Physics of Plasmas. 27 (2) (2020) 020601.

3. **Levchenko I., Bazaka K., Ding Y., et al.,** Space micropropulsion systems for Cubesats and small satellites: From proximate targets to furthermost frontiers, Appl. Phys. Rev. 5 (1) (2018) 011104.

4. **Goebel D.M., Katz I.,** Fundamentals of electric propulsion: Ion and Hall thrusters, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, USA (2008) 1–507.

5. **Kurushin A.,** Basic course of design of microwave devices using CST Studio Suite, One-Book, Moscow, 2014.

6. **Dyubo D.B., Tsybin O.Yu.,** A computer model of the contact ionization ion accelerator for the electrically powered spacecraft propulsion, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 78–91.

7. **Holste K., Dietz P., Scharmann S., et al.,** Use of emission spectroscopy for real-time assessment of relative wall erosion rate of BHT-200 hall thruster for various regimes of operation, Vacuum. 84 (9) (2010) 1085–1091.

8. **Ferreira J.L., Souza J.H.C., Rego I.S., Ferreira I.S.,** Plasma diagnostics and performance of a permanent magnet Hall thruster, 2004. Access mode: https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00003100

9. **Nishiyama K., Shimizu Y., Funaki I., et al.,** Measurements of the electromagnetic emissions from the MUSES-C ion engine system, Proceedings of the 27th International Electric Propulsion Conference, 15–19 October, 2001, Pasadena, CA. 2001. Paper IEPC-01-112.

10. **Tsybin O.Yu., Makarov S.B., Dyubo D.B., et al.,** An electrically powered ion accelerator with contact ionization for perspective electrically powered thrusters, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (2) (2020) 99–115.

11. **Penkov M.M., Goncharov P.S., Martynov V.V., Tsybin O.Yu.,** Elektroraketnyy dvigatel [Electrically powered spacecraft propulsion]. Pat. No. 2726152, Russian Federation, MPK H05H 1/54 (2006.01) F03H1/00 (2006.01) B64G 1/54 (2006.01). Mozhaisky Military Space Academy is a declarant and patentee. No. 2019140727; declar. 09.12.2019; publ. 09.07.2020. Bull. No. 19.

12. **Goncharov P.S., Martynov V.V., Shunevich N.A., Tsybin O.Y.,** Use of plasma electromagnetic radiation of an electric rocket thruster, Izvestiya Tula State University. (11) (2020) 197–202.

13. **Kawabata Y., Kawakatsu Y.,** On-board orbit determination using sun sensor and optical navigation camera for deep-space missions, Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences. 15 (2017) 13–19.

14. **Hufenbach B., Habinc S., Vuilleumier P.,** Space applications for smart sensors, European Space Agency, European Space Research and Technology Centre (1999) 9–16. Access mode: http://microelectronics.esa.int/vhdl/doc/Smart Sensor. pdf.

15. **Okhonin S., Gureev M., Sallin, D., et al.,** A dynamic operation of a *pin* photodiode, Appl. Phys. Lett. 106 (3) (2015) 031115.

16. **Dyubo D.B., Tsybin O.Yu.,** A novel photodiode in on-board micro receiver in 400–800 nm range, Proceedings of the First Joint International Conference on Astrophysics for Young Scientists, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Higher School of Applied Physics and Space Technologies (2017) 53–57.

17. **Dyubo D.B., Tsybin O.Yu.,** The relation of volume and surface effects with a charge barrier height in a dynamic *p–i–n*-photodyode, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (2) (2018) 16–25.

Received 15.06.2021, accepted 06.07.2021.

THE AUTHORS

DYUBO Dmitry B.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
dyubo_db@spbstu.ru

MAKAROV Sergey B.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
makarov@cee.spbstu.ru vka@mil.ru

KULESHOV Yuri V.
A.F. Mozhaysky Military-Space Academy
13 Zhdanovskaya St., St. Petersburg, 197198, Russian Federation
vka@mil.ru

GONCHAROV Pavel S.
A.F. Mozhaysky Military-Space Academy
13 Zhdanovskaya St., St. Petersburg, 197198, Russian Federation
vka@mil.ru

SHUNEVICH Nikolay A.
A.F. Mozhaysky Military-Space Academy
13 Zhdanovskaya St., St. Petersburg, 197198, Russian Federation
vka@mil.ru

MARTYNOV Viktor V.
A.F. Mozhaysky Military-Space Academy
13 Zhdanovskaya St., St. Petersburg, 197198, Russian Federation
vka@mil.ru

TSYBIN Oleg Yu.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
otsybin@rphf.spbstu.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14310
УДК 621.373.8

НОВЫЙ ПОДХОД К ОЦЕНКЕ МОЩНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ ГЕЛИЙ-НЕОНОВОГО ЛАЗЕРА С РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ ПОПЕРЕЧНОГО СЕЧЕНИЯ АКТИВНОГО ЭЛЕМЕНТА

В.А. Кожевников, В.Е. Привалов, А.Э. Фотиади

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Предлагаемое исследование продолжает цикл статей, посвященных методам расчета ключевых энергетических параметров гелий-неонового (He-Ne) газоразрядного лазера. Рассмотрено применение предложенного ранее метода расчета мощности излучения к лазерам, обладающим поперечными сечениями активного элемента в виде прямоугольника и эллипса. Использовано представление об эффективном модовом объеме лазера, указан расчетный алгоритм и предложена процедура, снижающая громоздкость расчетов. Варьирование значений лазерных параметров позволило получить развернутую картину зависимости выходной мощности лазерного излучения от геометрических параметров объектов. Сравнение полученных результатов дало возможность выявить оптимальные значения параметров лазеров для достижения максимальной выходной мощности. Установлено, что результаты расчетов мощности излучения хорошо согласуются как с соответствующими результатами по коэффициентам усиления лазера для заданных сечений, так и с экспериментальными данными.

Ключевые слова: гелий-неоновый лазер, мощность лазерного излучения, геометрия сечения трубки

Ссылка при цитировании: Кожевников В.А., Привалов В.Е., Фотиади А.Э. Новый подход к оценке мощности излучения гелий-неонового лазера с различной геометрией поперечного сечения активного элемента // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 133–145. DOI: 10.18721/JPM.14310

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creative-commons.org/licenses/by-nc/4.0/)

A NEW APPROACH TO THE ASSESSMENT OF THE OUTPUT POWER FOR A HELIUM-NEON GAS LASER WITH DIFFERENT CROSS-SECTIONAL GEOMETRY OF THE ACTIVE ELEMENT

V.A. Kozhevnikov, V.E. Privalov, A.E. Fotiadi

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russian Federation

The proposed study continues a series of articles devoted to design methods for the key energy parameters of a helium-neon (He-Ne) gas laser. An application of the previously proposed method for designing the emission power to lasers with the rectangle- and ellipse-shaped cross sections of active elements has been considered. An idea of effective mode volume was used, a calculation algorithm was presented, and a procedure reducing unwieldy calculations was put forward. Varying the parameter values made it possible to get a detailed picture of dependencies of the output laser energy on the geometrical parameters of objects under study. A comparison of the obtained results permitted to find optimal laser parameters for maximum output power. The calculation results of the radiation energy were established to agree well both with those of the laser gain for the given cross sections and those of the experimental data.

Keywords: helium-neon laser, laser power, tube geometry, rectangular and elliptical cross sections

Citation: Kozhevnikov V.A., Privalov V.E., Fotiadi A.E., A new approach to the assessment of the output power for a helium-neon gas laser with different cross-sectional geometry of the active element, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 133–145. DOI: 10.18721/JPM.14310

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

В последнее время активно изучаются эллиптические пучки (*англ.* Mathieu beams или Mathie-Gauss beams), которые представляют собой одно из четырех (наряду с обычными Гауссовыми, Бессель-Гауссовыми и параболическими пучками) фундаментальных семейств недифрагирующих решений волнового уравнения. Это связано с их экспериментальным обнаружением и теоретическим рассмотрением [1 – 5].

В работе [6] нами был предложен метод оценки мощности излучения газоразрядного лазера с произвольной формой поперечного сечения активного элемента. Напомним кратко суть этого метода.

Для оптического резонатора с радиусом кривизны соответствующего эквивалентного конфокального резонатора R_e модуль электрического поля E основной Гауссовой моды TEM_{00} в цилиндрических координатах (r, z, φ) имеет следующий вид:

$$E = E_0\sqrt{\frac{2}{1+\xi^2}}\exp\left[-\frac{kr^2}{R_e\left(1+\xi^2\right)}\right], \tag{1}$$

где $\xi = 2z/R_e$, $k = 2\pi/\lambda$ (координата z отсчитывается от перемычки Гауссового пучка, λ – длина волны лазерного излучения); E_0 – значение E при $\xi = 1$ и $r = 0$.

В первом приближении теории возмущений мощность индуцированного излучения можно считать пропорциональной произведению $E^2\delta N$, где δN – инверсия населенностей активной среды. В первом приближении величина δN удовлетворяет однородному уравнению Гельмгольца

$$\Delta\left(\delta N\right) + \lambda^2\delta N = 0 \tag{2}$$

с однородным граничным условием

$$\delta N\big|_{\Gamma} = 0, \tag{3}$$

где Γ – граница поперечного сечения активного элемента.

В предложенном методе было введено понятие эффективного модового объема NMV как тела, ограниченного поверхностью, где величина $|E|^2\delta N$ спадает в e^2 раз, по сравнению с величиной $E_0^2\delta N_0$ (δN_0 – инверсия населенностей на оси). Введение этой величины учитывает как инверсию населенностей, так и распределение поля в резонаторе при произвольной геометрии активного элемента.

В работе [6] было предложено оценивать выходную мощность излучения лазера с помощью модового объема NMV по следующей формуле:

$$P = \iiint\limits_{\text{NMV}} \varepsilon|E|^2\,\delta N dV, \tag{4}$$

где ε – соответствующий коэффициент пропорциональности.

Там же был указан алгоритм нахождения мощности излучения лазера при произвольной форме сечения активного элемента, состоящий из трех этапов.

Шаг 1. Расчет инверсии населенностей активной среды δN путем решения уравнений (2), (3) для данного значения границы Г (например, методом нахождения приближенного решения этих уравнений (см. нашу работу [7]), позволяющим получать решения с высокой точностью при относительно небольшой вычислительной сложности).

Шаг 2. Нахождение границы эффективного модового объема NMV.

Шаг 3. Непосредственное интегрирование по формуле (4).

Метод оценки мощности излучения был проверен (см. работу [6]) для случая цилиндрической геометрии, и результаты расчетов по нему дали отличное согласие с экспериментальными данными.

В данной работе рассматриваются поперечные сечения активного элемента в виде прямоугольника и эллипса.

Прямоугольное сечение активного элемента

Пусть стороны прямоугольника равны a и b, причем $b \le a$. Если использовать предложенный в статье [7] метод решения уравнения Гельмгольца при произвольной форме границы поперечного сечения активного элемента, то в цилиндрической системе координат (начало отсчета которой находится в центре прямоугольника, а полярная ось, от которой отсчитывается полярный угол φ, направлена параллельно большей стороне), вследствие симметрии, решение δN уравнений (2), (3) представимо в следующем виде:

$$\delta N(r,\varphi) = \delta N_0 \left\{ J_0(\lambda r) + \sum_{m=1}^{s} a_{2m} J_{2m}(\lambda r) \cdot \cos(2m\varphi) \right\},$$

где $J_m(\lambda_r)$ – функции Бесселя порядка m.

С другой стороны, решение уравнений (2), (3) для прямоугольника можно найти точно: легко проверить, что функция

$$\delta N(r,\varphi) = \delta N_0 \cos(\pi n r \cos\varphi / a) \cos(\pi m r \sin\varphi / b)$$

удовлетворяет однородному уравнению (2) при

$$\lambda_{n,m}^2 = \left(n^2\pi^2/a^2\right) + \left(m^2\pi^2/b^2\right), \; n = 1, 2, ..., \; m = 1, 2, ...$$

Если рассмотреть основной вклад с $n = m = 1$, то можно получить следующее уравнение для определения границы NMV в полярных координатах:

$$\ln\left|\cos\left(\frac{\pi}{a} r\cos\varphi\right)\right| + \ln\left|\cos\left(\frac{\pi}{b} r\sin\varphi\right)\right| + \ln\left(\frac{2R_e}{kw^2(z)}\right) + 2 - \frac{2r^2}{w^2(z)} = 0, \qquad (5)$$

где $w(z) = \sqrt{\left(R_e + 4z^2/R_e\right)/k}$.

Для каждого значения пары (z, φ) уравнение (5) можно решить численно относительно r и получить уравнение поверхности $r(z, \varphi)$, ограничивающей эффективный модовый объем NMV.

Ограничимся для определенности резонатором плоскость-сфера; в этом случае

$$R_e = 2\left\{d\left(R-d\right)\right\}^{1/2},$$

где R – радиус кривизны сферического зеркала, d – расстояние между зеркалами.

Тогда мощность излучения лазера с прямоугольным сечением трубки находится по формуле:

$$P = \frac{4E_0^2\delta N_0\varepsilon}{k}\sqrt{d\left(R-d\right)}\iiint\limits_{\mathrm{NMV}}\cos\left(\frac{\pi}{a}r\cos\varphi\right)\cos\left(\frac{\pi}{b}r\sin\varphi\right)\times$$
$$\times\exp\left(\frac{-2r^2}{w^2\left(z\right)}\right)\frac{1}{w^2\left(z\right)}dzd\varphi rdr. \qquad (6)$$

Расчеты по формулам (5), (6) мы проводили с различными параметрами лазеров. На рис. 1 приведена зависимость приведенной мощности лазера P/α (где коэффициент α выражается как $\alpha = \varepsilon E_0^2\delta N_0/k$) от отношения сторон прямоугольника (a/b) при следующих значениях параметров:

d = 2,2 м; R = 10 м; b = 5 мм;
a меняется от 5 до 150 мм; длина трубки l = 1,2 м;
активный элемент расположен в центре резонатора.

При указанных выше параметрах лазера, поверхность $r(z,\varphi)$, ограничивающая объем NMV, представляет собой эллипс с малым эксцентриситетом. Результаты расчета показывают, что при фиксированном z эксцентриситет этого эллипса растет с увеличением отношения a/b, а при фиксированном значении этого отношения размеры эллипса растут с увеличением z.

Представляло интерес сравнить мощности излучения лазеров, имеющих одинаковую площадь сечения активного элемента, но сечения разной формы: круглой и прямоугольной (и, соответственно, имеющих одинаковый объем при одинаковой длине трубки). Для круглого сечения использовался метод расчета мощности, предложенный в работе [6], причем для данных сторон a и b прямоугольника брался радиус круглого сечения $r_0 = (ab/\pi)^{1/2}$ и те же значения d, R и l; величина $E_0^2\delta N_0$ считалась одинаковой для обоих лазеров. Результаты расчетов показали, что мощность лазера с прямоугольным сечением активного элемента примерно на 4 – 6 % меньше мощности лазера с цилиндрическим сечением (той же площади).

Следует отметить, что полученные нами результаты по оценке мощности излучения лазера прямоугольного сечения хорошо согласуются как с нашими расчетными данными по усилению лазера [8], так и с экспериментальными. Из результатов, представленных в нашей работе [8], следует, что средний по сечению коэффициент усиления прямоугольного лазера, во-первых, не зависит от отношения сторон прямоугольника, а во-вторых, примерно на 6 % меньше соответствующего коэффициента лазера цилиндрического сечения.

Из анализа графика на рис. 1 следует, что при увеличении отношения a/b в 30 раз мощность увеличивается примерно всего на 6,5 %, а начиная со значения $a/b \approx 6$ можно считать, что мощность практически не меняется. Тот факт, что мощность лазера прямоугольного сечения примерно на 4 – 6 % меньше таковой для цилиндрического сечения, соответствует экспериментальным данным работы [9]. Поэтому мы можем считать, что предложенный нами метод расчета мощности лазера вполне корректен.

Несколько непривычное соотношение между значениями длины резонатора и длины активного элемента определяется тем, что такими они были в экспериментальной установке работы [9]. Может возникнуть вопрос, почему в расчетах не фигурируют значения темпера-

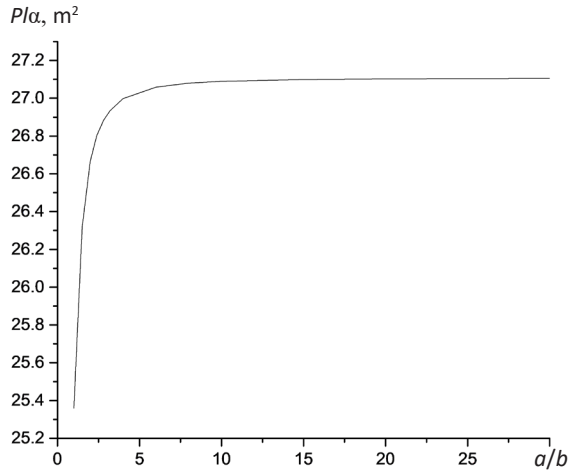


Рис. 1. Зависимость мощности излучения лазера P/α ($\alpha = \alpha = \varepsilon E_0^2 \delta N_0 / k$) от отношения сторон прямоугольника при $d = 2{,}2$ м, $R = 10$ м, $b = 5$ мм, $l = 1{,}2$ м

туры электронов и газа. Они, конечно, влияют на инверсию населенностей. Но в эксперименте это автоматически учитывается, так как в работе [9] измерялась мощность излучения лазера, которая включает в себя инверсию населенностей

Эллиптическое сечение активного элемента

Пусть полуоси эллипса равны a и b ($b < a$). Для нахождения точного решения однородного уравнения (2) для эллипса рассмотрим его в эллиптических координатах (u, v, z). Их связь с декартовыми координатами такая:

$$x = \rho \cdot \mathrm{ch}(u) \cdot \cos v, \;\; y = \rho \cdot \mathrm{sh}(u) \cdot \sin v, \;\; z = z,$$
$$\rho = \mathrm{const} > 0, \;\; u \geq 0, \;\; 0 \leq v < 2\pi.$$

Представим δN как $\delta N = \delta N_0 f(u, v, z)$ и найдем функцию $f(u, v, z)$, воспользовавшись методом разделения переменных:

$$f(u, v, z) = \varphi(z) \cdot w(u) \cdot g(v).$$

Отсюда получаем набор трех уравнений:

$$\varphi^{-1} d^2\varphi / dz^2 = -c,$$
$$w^{-1} d^2 w / du^2 + (\lambda^2 - c)\rho^2 \mathrm{ch}(2u)/2 = d,$$
$$-g^{-1} d^2 g / dv^2 + (\lambda^2 - c)\rho^2 \cos(2v)/2 = d,$$

где c, d – постоянные разделения.

Обозначая $q = (\lambda^2 - c)\rho^2/4$, получаем из третьего уравнения каноническую форму уравнения Матье (здесь и далее, при вводе функций Матье и связанных с ними величин, мы придерживаемся обозначений из книг [10, 11], у разных авторов они различаются):

$$\frac{d^2 g(v)}{dv^2} + \left(d - 2q\cos(2v)\right) g(v) = 0, \tag{7}$$

а из второго уравнения – модифицированное уравнение Матье:

$$\frac{d^2w(u)}{du^2}-\left(d-2q\mathrm{ch}(2u)\right)w(u)=0. \tag{8}$$

Выберем за начало отсчета значение $u = 0$, т. е. центр эллиптического сечения. При независимости от z постоянная разделения $c = 0$ (отсюда $q = \lambda^2\rho^2/4$). Ввиду симметрии задачи, нас интересует четное по v периодическое решение, и из теории следует, что будет существовать бесконечная счетная последовательность собственных значений $d = d_r(q)$, отвечающих четным периодическим решениям (7), причем для вещественного $q > 0$ эти собственные значения вещественны, различны и $d_0 < d_1 < d_2 \ldots$. Как и для сечений в виде круга и прямоугольника, мы рассматриваем основную моду с минимальным значением параметра λ, поэтому интересующее нас решение (7) – функция Матье вида $ce_0(v, q)$. Уравнение (8) получается из (7) заменой $v = iu$, и интересующее нас решение – это функция Матье $Ce_0(u, q)$. Итак,

$$f(u,v)=\alpha\cdot Ce_0(u,q)\cdot ce_0(v,q),$$

где α – нормировочный множитель (поскольку по определению $\delta N = \delta N_0 f$, функция f должна быть нормирована на единицу в центре сечения).

Пусть эллипс имеет полуоси a и b, тогда его уравнение в декартовых координатах имеет вид

$$\left(x^2/a^2\right)+\left(y^2/b^2\right)=1,$$

и для его уравнения $u = u_0$ в эллиптических координатах выполняются выражения

$$a=\rho\cdot\mathrm{ch}(u_0),\ \ b=\rho\cdot\mathrm{sh}(u_0),$$

откуда $\rho = (a^2 - b^2)^{1/2}$ (т. е. ρ – фокальное расстояние),

$$u_0=\mathrm{Arsh}(b/\rho)=\ln\left[(a+b)/(a-b)\right]/2.$$

В качестве α тогда нужно взять значение

$$\alpha=1/\left(Ce_0(0,q)\cdot ce_0(\pi/2,q)\right).$$

Итак, решение однородного уравнения Гельмгольца (2) принимает вид

$$\begin{gathered}\delta N=\delta N_0 Ce_0\left(u,\lambda^2\left(a^2-b^2\right)/4\right)\times\\ \times ce_0\left(v,\lambda^2\left(a^2-b^2\right)/4\right)/\left(Ce_0\left(0,\lambda^2\left(a^2-b^2\right)\right)/4\right)\times\\ \times ce_0\left(\pi/2,\lambda^2\left(a^2-b^2\right)/4\right).\end{gathered} \tag{9}$$

Из однородного граничного условия (3) следует, что λ должно быть такое, что

$$Ce_0\left(\frac{1}{2}\ln\frac{a+b}{a-b},\frac{\lambda^2\left(a^2-b^2\right)}{4}\right)=0. \tag{10}$$

Отсюда можно получить уравнение для определения границы объема NMV в эллиптических координатах:

$$\ln\left(\frac{2R_e}{kw^2(z)}\right)+2-\frac{2\left(a^2-b^2\right)}{w^2(z)}\left(\mathrm{ch}^2u\cdot\cos^2 v+\right.$$
$$\left.+\,\mathrm{sh}^2u\sin^2 v\right)-\ln\left[\left|Ce_0\left(0,\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\right|\right]+$$
$$+\ln\left[\left|Ce_0\left(u,\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\right|\right]-\ln\left[\left|ce_0\left(\frac{\pi}{2},\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\right|\right]+$$
$$+\ln\left[\left|ce_0\left(v,\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\right|\right]=0.$$

Для упрощения анализа формы NMV, последнее уравнение лучше переписать в цилиндрических координатах. Как известно [12], для установления взаимно-однозначного соответствия между точками плоскости $0xy$ (за исключением полуоси $(-1, \infty)$) и областью плоскости $0uv$ ($u \geq 0$, $0 \leq v < 2\pi$), частям гиперболы

$$\left[x^2/\left(\rho^2\cos^2 v\right)\right]-\left[y^2/\left(\rho^2\sin^2 v\right)\right]=1,$$

принадлежащих I, II, III и IV квадрантам, приписываются соответственно значения

$$v,\ \pi-v,\ \pi+v,\ 2\pi-v\ \left(0\leq v\leq\pi/2\right).$$

Тогда уравнение для определения границы NMV в цилиндрических координатах (r, φ, z) имеет вид

$$\ln\left(\frac{2R_e}{kw^2(z)}\right)+2-\frac{2r^2}{w^2(z)}-\ln\left[\left|Ce_0\left(0,\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\right|\right]+$$
$$+\ln\left[\left|Ce_0\left(u(r,\varphi),\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\right|\right]+$$
$$+\ln\left[\left|ce_0\left(v(r,\varphi),\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\right|\right]-\qquad(11)$$
$$-\ln\left[\left|ce_0\left(\frac{\pi}{2},\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\right|\right]=0,$$

где

$$u(r,\varphi)=\mathrm{Arsh}\left\{\left[\left(r^2-\left(a^2-b^2\right)+\left(\left(r^2-\left(a^2-b^2\right)\right)^2+\right.\right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.\left.+\,4r^2\left(a^2-b^2\right)\sin^2\varphi\right)^{1/2}\right)\Big/\left(2\left(a^2-b^2\right)\right)\right]^{1/2}\right\},$$

$$v(r,\varphi)=\arccos\left\{\left[\left(r^2+\left(a^2-b^2\right)-\left(\left(r^2+\left(a^2-b^2\right)\right)^2-\right.\right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.\left.-4r^2\left(a^2-b^2\right)\cos^2\varphi\right)^{1/2}\right)\Big/\left(2\left(a^2-b^2\right)\right)\right]^{1/2}\right\}.$$

Для каждого значения (z, φ) уравнение (11) можно решить численно относительно r и получить уравнение поверхности $r(z, \varphi)$, ограничивающей объем NMV.

Далее, учитывая, что

$$dV=\left(a^2-b^2\right)\left(\mathrm{sh}^2u+\sin^2v\right)dudvdz,$$

получаем выражение для оценки мощности излучения лазера с эллиптическим поперечным сечением активного элемента:

$$\begin{aligned}P&=\gamma\iiint\limits_{\mathrm{NMV}(u,v,z)}dzdvdu\left(a^2-b^2\right)\frac{\mathrm{sh}^2u+\sin^2v}{w^2(z)}\times\\&\times Ce_0\left(u,\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)ce_0\left(v,\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\times\\&\times\exp\left[\frac{-2\left(a^2-b^2\right)}{w^2(z)}\left(\mathrm{sh}^2u+\cos^2v\right)\right]=\\&=\gamma\iiint\limits_{\mathrm{NMV}(r,\varphi,z)}dzd\varphi rdr\frac{1}{w^2(z)}Ce_0\left(u(r,\varphi),\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\times\\&\times ce_0\left(v(r,\varphi),\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\cdot\exp\left(\frac{-2r^2}{w^2(z)}\right),\end{aligned}\tag{12}$$

где $\gamma=\dfrac{2E_0^2\delta N_0\varepsilon R_e}{k\cdot Ce_0\left(0,\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)\cdot ce_0\left(\frac{\pi}{2},\frac{\lambda^2}{4}\left(a^2-b^2\right)\right)}$.

Громоздкость расчетов возникает при вычислении функций Матье, и методы вычисления функций Матье до сих пор являются предметом многих исследований (см., например, работы [13, 14]). Для их вычисления обычно используется следующий ряд:

$$ce_0(v,q)=\sum_{k=0}^{\infty}A_{2k}^0(q)\cos(2kv)\tag{13}$$

(формула для $Ce_0(u, q)$ получается заменой $v = iu$, т. е. заменой тригонометрического косинуса гиперболическим), но получение коэффициентов $A_{2k}^0(q)$ не тривиально. Для нахождения функций Матье мы использовали следующий алгоритм.

В таблицах [15] есть табулированный набор коэффициентов для 145 значений q (следует отметить связь обозначений, приведенных там и у нас:

$$be_0 = d_0 + 2q;\ \ s = 4q;\ \ A \cdot Se_0(s,v) = ce_0(v,q);\ \ A \cdot De_{2k}(s) = A_{2k}(q).$$

Для данных λ, a, b мы рассчитывали q и с помощью значений из работ [10, 11, 15] находили $d_0(q)$ (для недостающих значений мы проводили интерполяцию). Далее мы находили коэффициенты A_{2k}, придерживаясь правила: если q достаточно близко к одному из значений в работах [10, 11, 15], то проводили интерполяцию коэффициентов, в противном случае использовали следующие рекуррентные соотношения для коэффициентов A_{2k}:

$$\begin{gathered} dA_0 - qA_2 = 0,\ (d-4)A_2 - q(2A_0 + A_4) = 0,\ \ldots, \\ (d - m^2)A_m - q(A_{m-2} + A_{m+2}) = 0,\ m \geq 3. \end{gathered} \tag{14}$$

При найденных значениях d и q выражали с помощью формул (14) все коэффициенты A_{2k} через A_0. Далее использовали условие нормировки функций Матье (следует учесть, что нормировки у разных авторов тоже различаются):

$$2A_0^2 + A_2^2 + A_4^2 + A_6^2 + \ldots = 1. \tag{15}$$

Взяв достаточное количество коэффициентов A_{2k} в равенстве (15) и подставив их выражения через A_0, получали формулу для нахождения A_0. Затем обратно из формул (14) получали коэффициенты A_{2k} и по выражению для ряда (13) строили функцию $ce_0(v, q)$ (аналогично строили $Ce_0(u, q)$). При этом мы значительно упростили первый шаг алгоритма: находили λ при данных a, b с помощью метода, использованного в работе [7], что частично избавляло нас от весьма громоздких вычислений. Мы контролировали это значение λ с помощью формулы (10), и тот факт, что это уравнение удовлетворялось с хорошей точностью, служит еще одним признаком правильности нахождения λ по методу [7]. После построения функций $ce_0(v, q)$ и $Ce_0(u, q)$ появилась возможность решить уравнение (11) и затем рассчитать мощность излучения лазера с эллиптическим поперечным сечением активного элемента по формуле (12).

Расчеты производились с варьированием параметров лазеров. В качестве примера на рис. 2 приведены результаты для следующих параметров (они близки к использованным в расчетах для лазера с прямоугольным поперечным сечением, описанных выше):

d = 2,2 м; R = 10 м; b = 2,5 мм; a = 2,75 – 15,0 мм; l = 1,2 м;

трубка расположена в центре резонатора;

резонатор полуконфокальный.

При данных параметрах лазера, функция $r(z, \varphi)$, которая является решением уравнения (11), также представляет собой эллипс с малым эксцентриситетом, причем поведение зависимостей аналогично прямоугольному случаю: эксцентриситет при фиксированном z растет с увеличением отношения a/b, а при фиксированном значении отношения a/b размеры эллипса растут с увеличением значения z.

Мы также сравнивали мощности излучения лазеров с эллиптическим и круглым поперечными сечениями активного элемента одинаковой площади (и при одинаковой длине трубки – одинакового объема): при заданных значениях a и b мы брали радиус круглого сечения как $r_0 = (ab)^{1/2}$ с теми же значениями d, R и l и рассчитывали мощности излучения по методу, представленному в работе [6], считая величину $E_0^2 \delta N_0$ одинаковой для обоих лазеров.

Результаты расчетов мощности лазера с эллиптическим сечением согласуются с таковыми для наших расчетов коэффициента усиления лазера. В работе [7] был получен средний по сечению коэффициент усиления эллиптического лазера для отношения полуосей a/b. Было

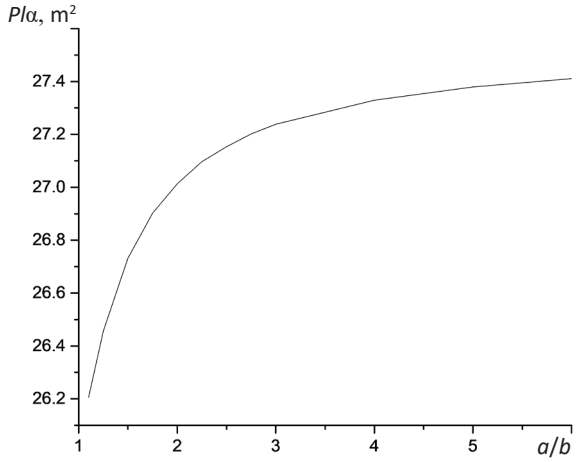


Рис. 2. Зависимость мощности излучения лазера P/α ($\alpha = \alpha = \varepsilon E_0^2 \delta N_0 / k$) от отношения полуосей эллипса при значениях $d = 2{,}2$ м, $R = 10$ м, $b = 2{,}5$ мм, $l = 1{,}2$ м

установлено, что усиление лазера эллиптического поперечного сечения несколько ниже, чем цилиндрического, и их разность растет с увеличением отношения a/b (напомним, что при этом в работе [7] использовалось приближенное решение). Несмотря на то, что эллиптические пучки (*англ.* Mathieu beams или Mathie-Gauss beams), которые представляют одно из четырех (наряду с обычными Гауссовыми, Бессель-Гауссовыми и параболическими пучками) фундаментальных семейств недифрагирующих решений волнового уравнения, в последнее время активно изучаются после их экспериментального обнаружения и теоретического рассмотрения [1 – 5], а также считаются перспективными для лазерной обработки материалов [16], нам не удалось найти в литературе описания экспериментов по измерениям мощности газоразрядных лазеров с эллиптическим сечением активного элемента.

Заключение

Таким образом, нами предложена новая методика расчета выходной мощности излучения газоразрядного лазера, имеющего произвольное поперечное сечение активного элемента. Были проведены расчеты мощности излучения лазера с круговым (см. работу [6]), прямоугольным и эллиптическим поперечными сечениями активного элемента. Результаты расчетов мощности излучения хорошо согласуются с результатами проведенных ранее расчетов коэффициента усиления лазеров и экспериментальными данными. В настоящее время проводится поиск формы сечения активного элемента, оптимальной по признаку мощности излучения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Gutiérrez-Vega J.C., Iturbe-Castillo M.D., Ramírez G.A., Tepichín E., Rodrígues-Dagnino R.M., Cháves-Cerda S., New G.H.C.** Experimental demonstration of optical Mathieu beams // Optics Communications. 2001. Vol. 195. No. 1–4. Pp. 35–40.

2. **Ren Z., Hu H., Peng B.** Generation of Mathieu beams using the method of 'combined axicon and amplitude modulation' // Optics Communications. 2018. Vol. 426. 1 November. Pp. 226–230.

3. **Ren Z., He J., Shi Y.** Generation of Mathieu beams using angular pupil modulation // Chinese Physics B. 2018. Vol. 27. No. 12. P. 124201.

4. **Julián-Macías I., Rickenstorff-Parrao C., Cabrera-Rosas O.J., Espíndola-Ramos E., Juárez-Reyes S.A., Ortega-Vidals P., Silva-Ortigoza G., Sosa-Sánchez C.T.** Wavefronts and caustics associated with Mathieu beams // Journal of the Optical Society of America A. 2018. Vol. 35. No. 2. Pp. 267–274.

5. **Zeylikovich I., Nikitin A.** The formation and propagation of Mathieu–Gauss type spatial structures on diffraction of a multi segment-shaped laser beam // The European Physical Journal D. 2020. Vol. 74. No. 9. P. 182.

6. **Кожевников В.А., Привалов В.Е., Фотиади А.Э.** Эффективный модовый объем и оценка мощности выходного излучения гелий-неонового лазера // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 119–132.

7. **Кожевников В.А., Привалов В.Е.** Усиление в лазерах при неоднородных граничных условиях // Известия высших учебных заведений. Физика. 2020. Т. 63. № 9 (730), С. 165–171.

8. **Kozhevnikov V.A., Privalov V.E., Shemanin V.G.** Upgrade the evaluation of the contribution of the active element cross section geometry to the He-Ne laser energy characteristics // Optical Memory and Neural Networks. 2019. Vol. 28. No. 3. Pp. 215–221.

9. **Привалов В.Е., Ходовой В.А.** Экспериментальное исследование He-Ne лазера с разрядным промежутком прямоугольного сечения // Оптика и спектроскопия. 1974. Т. 37. № 4. С. 797–799.

10. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. Под ред. М. Абрамовица и И. Стигана. Пер. с англ. М.: Наука, 1979. 832 с.

11. **Мак-Лахлан.** Теория и приложения функций Матьё. Пер. с англ. В.А. Братановского под ред. И.Н. Денисюка. М.: Изд-во ИЛ, 1953. 476 с.

12. **Бермант А.Ф.** Отображения. Криволинейные координаты. Преобразования. Формулы Грина. М.: Физматгиз, 1958, 308 с.

13. **Frenkel D., Portugal R.** Algebraic methods to compute Mathieu functions // Journal of Physics A. 2001. Vol. 34. No. 17. Pp. 3541–3551.

14. **Bibby M.M., Peterson A.F.** Accurate computation of Mathieu functions. Synthesis lectures on computational electromagnetics #32. USA: Morgan & Claypool Publishers, 2014. 124 p.

15. Таблицы для вычисления функций Матье; собственные значения, коэффициенты и множители связи. М.: Вычислительный центр АН СССР, 1967. 279 с.

16. **Orlov S., Vosylius V., Gotovski P., Grabusovas A., Baltrukonis J., Gertus T.** Vector beams with parabolic and elliptic cross-sections for laser material processing applications // Journal of Laser Micro/Nanoengineering. 2018. Vol. 13. No. 3. Pp. 280–286.

Статья поступила в редакцию 02.07.2021, принята к публикации 02.08.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОЖЕВНИКОВ Вадим Андреевич – *старший преподаватель кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

vadim.kozhevnikov@gmail.com

ПРИВАЛОВ Вадим Евгеньевич – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

vaevpriv@yandex.ru

ФОТИАДИ Александр Эпаминондович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

fotiadi@rphf.spbstu.ru

REFERENCES

1. **Gutiérrez-Vega J.C., Iturbe-Castillo M.D., Ramírez G.A., et al.,** Experimental demonstration of optical Mathieu beams, Opt. Commun. 195 (1–4) (2001) 35–40.

2. **Ren Z., Hu H., Peng B.,** Generation of Mathieu beams using the method of 'combined axicon and amplitude modulation', Optics Communications. 426 (1 November) (2018) 226–230.

3. **Ren Z., He J., Shi Y.,** Generation of Mathieu beams using angular pupil modulation, Chin. Phys. B. 27 (12) (2018) 124201.

4. **Julián-Macías I., Rickenstorff-Parrao C., Cabrera-Rosas O.J., et al.,** Wavefronts and caustics associated with Mathieu beams, J. Opt. Soc. Am. A. 35 (2) (2018) 267–274.

5. **Zeylikovich I., Nikitin A.,** The formation and propagation of Mathieu–Gauss type spatial structures on diffraction of a multi segment-shaped laser beam, Eur. Phys. J. D. 74 (9) (2020) 182.

6. **Kozhevnikov V.A., Privalov V.E., Fotiadi A.E.,** The effective mode volume and estimation of helium-neon laser output power, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 119–132 (in Russian).

7. **Kozhevnikov V.A., Privalov V.E.,** Laser gain for inhomogeneous boundary conditions, Russian Physics Journal. 63 (9) (2021) 1631–1638.

8. **Kozhevnikov V.A., Privalov V.E., Shemanin V.G.,** Upgrade the evaluation of the contribution of the active element cross section geometry to the He-Ne laser energy characteristics, Opt. Mem. Neural Networks. 28 (3) (2019) 215–221.

9. **Privalov V.E., Khodovoy V.A.,** Eksperimentalnoye issledovaniye He-Ne lazera s razryadnym promezhutkom pryamougolnogo secheniya [An experimental investigation of a He-Ne laser with a rectangular cross-section discharge gap], Optics and Spectroscopy. 37 (4) (1974) 797–799 (in Russian).

10. Handbook of mathematical functions: with formulas, graphs, and mathematical tables, Edited by M. Abramowitz, I.A. Stegun. National Bureau of Standards, Tenth Printing, 1972.

11. **McLachlan N.W.,** Theory and application of Mathieu functions, Oxford University Press, Oxford, 1951.

12. **Bermant A.F.,** Otobrazheniya. Krivolineynyye koordinaty. Preobrazovaniya. Formuly Grina [Mapping. Curvlinear coordinates. Transformations. Green's formulae], Fizmatgiz Publishing, Moscow, 1958 (in Russian).

13. **Frenkel D., Portugal R.,** Algebraic methods to compute Mathieu functions, J. Phys. A. 34 (17) (2001) 3541–3551.

14. **Bibby M.M., Peterson A.F.,** Accurate computation of Mathieu functions, Synthesis lectures on computational electromagnetics #32, Morgan & Claypool Publishers, USA, 2014.

15. Tables relating to Mathieu functions. Characteristic values, coefficients, and joining factors. National Bureau of Standarts, Computation Laboratory, Columbia University Press, New York, 1951.

16. **Orlov S., Vosylius V., Gotovski P., et al.,** Vector beams with parabolic and elliptic cross-sections for laser material processing applications, J. Laser Micro/Nanoeng. 13 (3) (2018) 280–286.

Received 02.07.2021, accepted 02.08.2021.

THE AUTHORS

KOZHEVNIKOV Vadim A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vadim.kozhevnikov@gmail.com

PRIVALOV Vadim E.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vaevpriv@yandex.ru

FOTIADI Alexandr E.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
fotiadi@rphf.spbstu.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14311
УДК 543.51+ 681.2–5

АЛГОРИТМ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ДЛЯ ПЕРВИЧНОЙ ДИАГНОСТИКИ ЗАБОЛЕВАНИЙ ПО ВЫДЫХАЕМЫМ ГАЗАМ

В.В. Манойлов, Л.В. Новиков, А.Г. Кузьмин, Ю.А. Титов, И.В. Заруцкий

Институт аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе предложен алгоритм обработки масс-спектров газов, выдыхаемых пациентами. Масс-спектры регистрируются на квадрупольном масс-спектрометре МС7-200 с электронной ионизацией и прямым капиллярным вводом пробы. Алгоритм основан на преобразовании массива спектров (не менее десяти) в пространство главных компонент. Вероятность заболевания определяется по евклидову расстоянию координат пациента от центроиды. Тестирование алгоритма проведено на данных масс-спектров газов, выдыхаемых больными с онкологическими заболеваниями. Предлагаемая процедура имеет ряд преимуществ перед традиционными лабораторными методами; алгоритм использует многомерную плотность вероятности распределения параметров выдыхаемых газов контрольных групп и тестируемого пациента; позволяет за короткое время составить общую картину вероятных заболеваний.

Ключевые слова: диагностика, метод главных компонент, многомерная плотность вероятности, обработка многомерных данных

Ссылка при цитировании: Манойлов В.В., Новиков Л.В., Кузьмин А.Г., Титов Ю.А., Заруцкий И.В. Алгоритм обработки данных масс-спектрометрического анализа для первичной диагностики заболеваний по выдыхаемым газам // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 146–157. DOI: 10.18721/JPM.14311

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creative-commons.org/licenses/by-nc/4.0/)

AN ALGORITHM FOR PROCESSING MASS SPECTROMETRIC ANALYSIS DATA FOR INITIAL DIAGNOSTICS OF DISEASES BY EXHALED GASES

V.V Manoilov, L.V. Novikov, A.G. Kuzmin, Yu.A. Titov, I.V. Zarutskii

Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russian Federation

An algorithm for processing mass spectra of gases exhaled by patients has been proposed in the paper. The mass spectra are recorded on the MS7-200 quadrupole mass spectrometer, with electronic ionization and with direct capillary injection of the sample. The algorithm is based on transforming an array of spectra (not less than 10) in the space of principal components. The probability of a disease is determined through the Euclidean distance of the patient's coordinates from the centroid. Testing of the algorithm was carried out on the data of mass spectra of gases exhaled by cancer patients. The proposed procedure has several advantages over traditional laboratory methods. The algorithm uses the multidimensional probability density of the distribution of the parameters of the exhaled gases of control groups and the patient being tested and allows to compile an overall picture of the patient's probable diseases in a short time.

Keywords: diagnostics, principal component analysis, multivariate probability density, multivariate data processing

Citation: Manoilov V.V., Novikov L.V., Kuzmin A.G., Titov Yu.A., Zarutskii I.V., An algorithm for processing mass spectrometric analysis data for initial diagnostics of diseases by exhaled gases, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 146–157. DOI: 10.18721/JPM.14311

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

В последнее время для диагностики заболеваний применяется анализ состава выдыхаемых газов [1, 2]. Он позволяет выявлять ряд серьезных недугов, среди которых болезнь Альцгеймера [3], эпилепсия [4], болезни почек [5], онкологические заболевания [6] и другие. Важной составляющей в развитии указанного способа диагностики является алгоритмическое обеспечение приборов, используемых для подобного анализа. Компьютерная программа, реализующая предлагаемый в работе алгоритм, выполняет обработку масс-спектров выдыхаемых газов; состав газов измеряют с помощью прибора с квадрупольным анализатором. Для проверки алгоритма были проведены измерения выдыхаемых газов у пациентов с онкологическими заболеваниями.

При классическом подходе к анализу масс-спектров, изначально производится так называемая первичная, или предварительная обработка масс-спектров; при этом выполняется обнаружение масс-спектрометрических пиков и оценка их параметров: позиция на шкале массовых чисел и амплитуда (иногда площадь). В ряде случаев первичной обработки масс-спектров выполняется математическое улучшение разрешающей способности прибора путем разделения наложившихся спектральных линий [7].

За первичной следует вторичная обработка данных. Описываемый ниже алгоритм обработки масс-спектров реализуется именно на этом этапе в офлайн-режиме, по информации, записанной в памяти компьютера в виде линейчатых спектров. В результате работы программы, реализующей данный алгоритм, выполняется предварительная оценка того, насколько вероятна принадлежность испытуемых лиц к классу больных с определенной патологией либо к классу практически здоровых людей.

Таким образом, данный алгоритм дополняет возможности классификации методами дискриминантного и кластерного анализов по многомерным статистическим данным. Классификация масс-спектров выдыхаемых газов методами дискриминантного и кластерного анализов описана в работе [8].

Главным отличием масс-спектров выдыхаемых газов у пациентов с какими-либо патологиями от таковых у практически здоровых людей является, прежде всего, присутствие дополнительных компонент, например, с массами 71, 64, 59 и 55 Да. Присутствие указанных линий в масс-спектре выдыхаемых газов у обследуемого лица указывает на высокую вероятность патологии в состоянии его организма. По аналогии с отпечатками пальцев, для каждого масс-спектра выдыхаемого воздуха характерен свой неповторимый профиль (набор пиков разной интенсивности), поэтому можно предположить, что различные профили «отпечатков» выдоха могут служить индикаторами определенной патологии. После набора достаточного количества таких данных появится возможность определять с весьма высокой эффективностью конкретный тип заболевания и либо назначать дополнительные обследования, либо сразу начинать лечение пациента.

Основные предпосылки

Массив данных масс-спектров под названием «здоровые люди» образует матрицу. По всем столбцам матрицы, кроме первого, записываются интенсивности пиков их масс-спектра на заданных значениях массы. Первый столбец матрицы содержит номер масс-спектра выдыхаемых газов определенного человека, а каждая ее строка – информацию об интенсивности отдельных линий масс-спектра.

Обозначим такую матрицу как $\mathbf{XS} = [x_{ij}]$, где i, j – номера объектов (людей) и признаков (массовых чисел) соответственно, $i = 1, 2, ..., I$, $j = 1, 2, ..., J$; x_{ij} – интенсивность j-й спектральной компоненты i-го здорового человека.

Аналогично образуем матрицу $I_0 \times J$ для масс-спектров выдыхаемых газов у больных. Каждая строка такой матрицы содержит интенсивности отдельных линий соответствующего масс-спектра. Обозначим эту матрицу $\mathbf{XI_1} = \left[x_{ij}^0\right]$, где i, j, J имеют тот же смысл, но $i = 1, 2, ..., I_0$; x_{ij}^0 – интенсивность j-й спектральной компоненты i-го больного.

Объединим матрицы здоровых и больных испытуемых и получим единую матрицу данных $\mathbf{X}$ размера $(I_0 + I) \times J$:

$$\mathbf{X} = \left(\left[\mathbf{XS}; \mathbf{XI}_1\right]\right).$$

Преобразуем данную матрицу по алгоритму построения пространства главных компонент (ГК) и вычислим матрицу счетов $\mathbf{T}$.

На основе клинических обследований большого количества больных и здоровых пациентов полученные масс-спектры разделяются на два множества: контрольные и тестируемые группы.

Контрольные группы масс-спектров – это данные для пациентов с известным диагнозом их заболевания и данные для здоровых людей. В то же время в процессе обработки множества тестируемых масс-спектров – иная ситуация: неизвестно, принадлежат ли они здоровым людям или пациентам с какой-либо патологией.

Число масс-спектров выдыхаемых газов у пациентов в каждой из двух групп должно быть не менее тридцати. Каждый полученный масс-спектр выдоха пациента из контрольной группы представляется в многомерном пространстве в виде точки. Такие точки всех пациентов группы, собранные вместе, образуют «облако» исходных данных. Чем ближе к центру (центроиде) облака находится точка, определяющая масс-спектр выдоха тестируемого пациента, тем выше вероятность того, что пациент страдает заболеванием, соответствующим контрольной группе. Если пациент здоров, то вероятность патологии его состояния оценивается по контрольной группе здоровых пациентов; чем дальше от центра (центроиды) облака находится точка, определяющая масс-спектр выдоха тестируемого пациента, тем выше вероятность патологии его состояния.

С математической точки зрения, масс-спектры выдыхаемых газов пациентов одной группы образуют пространство данных с некоторым известным заболеванием. Вероятность принадлежности тестируемого пациента к одной из этих групп проверяется последовательно по формуле многомерной плотности вероятности.

Результатом описанного обследования является полная вероятностная картина заболевания тестируемого пациента. Это позволяет оперативно разработать пути дальнейшего, более тщательного обследования и последующего лечения.

Теоретическое описание работы алгоритма

Пусть x_{ij} – j-й параметр, а в конкретном случае – величина интенсивности спектральной линии для данных i-го пациента одной из групп, причем $i = 1, 2, ..., I$ и $j = 1, 2, ..., J$, и рас-

сматривается набор из I пациентов J регистрируемых спектральных линий выдыхаемого воздуха. Образуем из этих данных матрицу размером $I \times J$. Назовем такую матрицу обучающей и обозначим ее как $\mathbf{X}$. Столбцы этой матрицы обозначим как X_j: $\mathbf{X} = [X_1, X_2, ..., X_j, ..., X_J]$ [9].

Вектор X_j является случайной величиной. Предположим, что эта случайная величина имеет нормальное распределение с математическим ожиданием $\overline{X}_j$ и дисперсией σ_j^2. Элементы матрицы $\mathbf{X}$ формируют в J-мерном пространстве «облако». Обозначим такое облако через G, состоящее из $I \times J$ точек, с центроидой в точке $\overline{X}$. Ее координаты выражаются как

$$\overline{X} = \left[\overline{X}_1, \overline{X}_2, ..., \overline{X}_j\right].$$

Для пациента, состояние которого исследуется, характерна патология (или он здоров), если измеренный вектор параметров выдыхаемого им воздуха имеет вид

$$X_d = \left[X_{d,1}, X_{d,2}, ..., X_{d,j}\right].$$

$X_{i,j}$ является параметром в J-мерном пространстве G, т. е. $X_d \in G$. Данное условие будет выполняться, если вероятность P отклонения точки X_d от центроиды $\overline{X}$ не превышает некоторый порог α. Для того, чтобы вычислить данную вероятность, построим многомерное распределение вероятности принадлежности события пространству G, предполагая, что это распределение подчиняется нормальному закону [10]:

$$P\left(\mathbf{X}_d\right) = W * \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\mathbf{X}_d - \overline{\mathbf{X}}\right)^T \mathbf{K}_X^{-1}\left(\mathbf{X}_d - \overline{\mathbf{X}}\right)\right\}, \mathbf{X}_d \in G, \quad (1)$$

где $\mathbf{K}_X$ – ковариационная матрица, $\mathbf{K}_X = \mathrm{E}\left[\left(\mathbf{X} - \overline{\mathbf{X}}\right) * \left(\mathbf{X} - \overline{\mathbf{X}}\right)^T\right]$ (E – символ математического ожидания); W – нормирующий множитель; $(...)^T$ – символ транспонирования матрицы.

Очевидно, что вероятность P этого события равна единице, если для очередного проверяемого пациента окажется, что $\mathbf{X}_d \equiv \overline{\mathbf{X}}$. Это условие выполняется, если в формуле (1) положить $W = 1$. Тогда условие, при котором тестируемый пациент будет принадлежать к контрольной группе, имеет вид $P(\mathbf{X}_d) < \alpha$, где величина α выбирается методом экспертной оценки.

Стоит отметить, что расчет требуемой вероятности P по формуле (1) связан со значительными вычислительными трудностями, вызванными наличием большого числа параметров J и корреляционных связей между столбцами матрицы $\mathbf{X}$. С целью сжатия данных и сокращения размерности пространства G, используется ортогональное преобразование данных в пространство главных компонент – метод главных компонент (МГК) [11].

Чтобы перейти в пространство ГК, необходимо сформировать новую матрицу, состоящую из всех строк матрицы $\mathbf{X}$ и строки $\mathbf{X}_d$. Обозначим эту матрицу как $\mathbf{XI}$. В новой системе координат получим:

$$\mathbf{XI} = \mathbf{TP}^T + \mathbf{e} = \sum_{j=1}^{A} t_j \mathbf{p}_j^T + \mathbf{e}, \quad (2)$$

где $\mathbf{p}_j^T$ – собственные функции ковариационной матрицы $\mathbf{K}_X$; $\mathbf{T}$ называется матрицей счетов и выражается как $\mathbf{T} = [T_1, T_2, ..., T_A]$, ее размерность – $I \times A$; $\mathbf{P}^T$ называется матрицей нагрузок, ее размерность – тоже $I \times A$; $\mathbf{e}$ – матрица остатков (шумов), ее размерность – $(I \times J)$; векторы-столбцы T_j ($j = 1, 2, ..., A$) называются главными компонентами (A – число главных компонент).

Величина A намного меньше числа переменных J. Данное обстоятельство означает, что почти вся основная информация о состоянии тестируемого пациента сосредоточена в нескольких первых ГК. Последняя строка матрицы (2), вектор T_d, – координаты параметров пациента в пространстве ГК:

$$\mathbf{T}_d = \left[t_{d,1}, t_{d,2}, ..., t_{d,A} \right].$$

Средние значения столбцов матрицы **T** равны нулю, а дисперсия – вектор σ^2 с элементами – равна $\sigma_j^2 = \lambda_j$, т. е. собственным числам ковариационной матрицы. Свойство разложения по ГК таково, что дисперсия быстро уменьшается уже к четвертой ГК, а столбцы матрицы **T** не коррелированы, т. е.

$$\mathbf{T}_m \mathbf{T}_n' = \begin{cases} 0 \text{ при } n \neq m, \\ \lambda_j \text{ при } n = m. \end{cases}$$

Если принять во внимание это обстоятельство, то в новой системе координат формула (1) принимает вид:

$$P\left(\mathbf{T}_d\right) = \exp\left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{T}_d \sigma^{-2} \mathbf{T}_d' \right\} = \exp\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{A} \frac{t_{d,j}^2}{\sigma_j^2} \right\} \tag{3}$$

и евклидово расстояние от пациента с индексом d до центроиды контрольной группы равно

$$D(d) = \sqrt{\sum_{j=1}^{A} t_{d,j}^2}. \tag{4}$$

Основные шаги алгоритма

Рассматриваемый алгоритм можно разделить на два этапа: обучение и диагностика; они выполняются последовательно во времени.

На первом этапе (обучение), по результатам клинического обследования большого количества пациентов, формируется K матриц $\mathbf{X}^k$ (k = 1, 2, ..., K), где K – число подгрупп с информацией об интенсивности линий спектра выдыхаемых газов для каждого вида патологии. Следует отметить, что число строк I^k каждой матрицы должно быть больше числа столбцов J^k. Этап обучения выполняется один раз, по результатам накопления данных по спектрам газов, выдыхаемых пациентами (их обследуют в клинике).

На втором этапе алгоритма (диагностика) выполняется измерение спектральных компонент газов, выдыхаемых тестируемыми пациентами, и в несколько шагов выполняется вычисление вероятности их принадлежности к одной из контрольных групп.

Шаг 1. На основе данных по интенсивностям спектральных компонент на заданных массах образуется вектор-строка $\mathbf{X}_d = \left\{ x_{d,1}, x_{d,2}, ..., x_{d,J} \right\}$.

Шаг 2. Вычисляется матрица $\mathbf{XI}^k = \left[\mathbf{X}^k; \mathbf{X}_d \right]$ размером $\left(I^k + 1 \times J^k \right)$; последняя строка в этой матрице – вектор X_d.

Шаг 3. Вычисляются нормированные значения этой матрицы. Коэффициентом нормировки является максимальное значение ее элементов.

Шаг 4. Рассчитывается матрица счетов $\mathbf{T}^k$ и вектор собственных чисел λ_j^k по алгоритму метода ГК [12].

Шаг 5. Находятся главные компоненты и определяется число A (количество главных компонент) матрицы $\mathbf{T}^k$ таким образом, чтобы $\sigma_A^k = \sqrt{\lambda_A^k} < \varepsilon$. Без потери достоверности можно положить ε = (0,001, ..., 0,01). Последняя строка матрицы $\sigma_A^k = \sqrt{\lambda_A^k} < \varepsilon$ – главные компоненты параметров выдыхаемых газов обследуемого пациента.

Шаг 6. Вычисляется вероятность $P\left(T_d^k\right), k = 1, 2, ..., K,$ по формуле (3).

Шаг 7. Переход к шагу 2 ($k = k + 1$), для того чтобы определить вероятность принадлежности обследуемого пациента к другой группе возможных патологий.

Шаг 8. Анализ результатов вычисления вероятности $P\left(\mathbf{T}_d^k\right), k = 1, 2, ..., K,$ для всех K патологий, с целью определения патологии с наибольшей вероятностью.

Тестирование разработанного алгоритма

Выдыхаемые газы обследуемых пациентов вводились в квадрупольный масс-спектрометр, который имеет диапазон детектирования 1 – 200 Да, разрешение по массовым числам – 0,5 Да; скорость регистрации одного масс-спектра – до 15 с.

Были проведены измерения выдыхаемых воздуха у 43 пациентов с диагностированными онкологическими заболеваниями[1]. Эти пациенты были разделены на контрольную группу (36 чел.) и группу тестируемых пациентов (7 чел.). При этом интенсивность компонентов выдыхаемого воздуха первого тестируемого пациента, например, совпадала с центроидой контрольной группы. Также для проверки эффективности алгоритма были привлечены еще 10 тестируемых пациентов[2] с другими видами патологии. Пациентам обеих групп тестируемых были присвоены порядковые номера: соответственно, d = (1, 2, ..., 7) и d = (1, 2, ...,10).

Масс-спектрометр регистрировал масс-спектр воздуха, выдыхаемого каждым пациентом, в диапазоне от 50 до 100 Да. В результате обследования большого числа пациентов и последующего анализа полученных данных было установлено, что в выдыхаемых газах содержатся компоненты спектра на массах 53, ..., 69 Да (всего 12), которые являются маркерами большинства заболеваний. Из исходных данных, содержащих информацию о контрольной группе, была сформирована матрица, в которой содержатся 12 столбцов; по ее строкам были расположены интенсивности компонент спектра – маркеров.

На рис. 1 показан пример масс-спектра выдыхаемого газа одним из семи тестируемых пациентов. По горизонтальной оси откладывается масса однозарядных ионов в дальтонах (русское обозначение – Да, международное – Da). Поочередно выбирались данные по выдыхаемым газам тестируемых пациентов и выполнялись шаги *1 – 6* алгоритма. При этом оказалось, что в пространстве ГК достаточно положить $A = 6$, так как $\sigma_A^k \cong 0$. По формулам (4) и (3) были вычислены евклидово расстояние до центроиды контрольной группы и вероятность диагностики онкологического заболевания у каждого тестируемого пациента. Для всех тестируемых пациентов эти результаты представлены в таблице.

На рис. 2,*a* изображено пространство первых двух главных компонент матрицы (PC1 и PC2), где нанесены координаты пациентов контрольной группы 1 (см. таблицу) (o) и семи тестируемых (+) пациентов. Из данных таблицы для этой группы, состоящей из 7 чел., видно, что по мере удаления координат масс-спектра выдыхаемых газов от центра облака (центроиды) вероятность наличия онкологического заболевания у этих пациентов уменьшается, но остается большой.

На рис. 2,*b* в пространстве первых двух PC (PC1 и PC2) изображены координаты пациентов контрольной группы 2 и десяти тестируемых пациентов. Оказалось, что все пациенты

[1] Данные о выдыхаемых газах для этой группы пациентов предоставлены Национальным медицинским исследовательским центром имени В.А. Алмазова, Санкт-Петербург.

[2] Данные о выдыхаемых газах для этой группы предоставлены Санкт-Петербургским клиническим научно-практическим центром специализированных видов медицинской помощи (онкологическим).

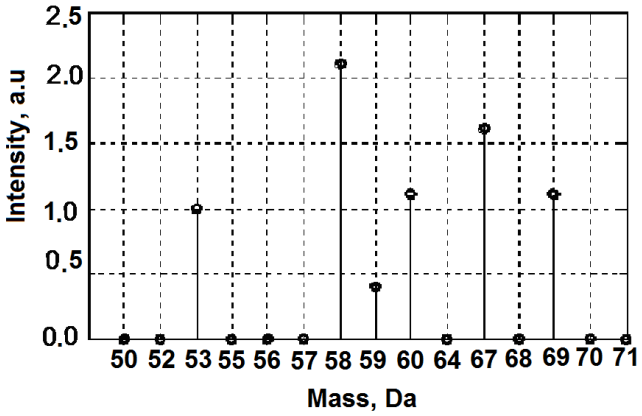


Рис. 1. Масс-спектр газов, выдыхаемых пациентом с патологией его состояния

Таблица

Результаты оценки вероятности онкологического заболевания у пациентов двух контрольных групп

Номер пациента	Евклидово расстояние	Вероятность заболевания
Группа 1		
1	0,0116	0,9854
2	0,1076	0,1888
3	0,1499	0,2055
4	0,2044	0,1164
5	0,2554	0,2864
6	0,2892	0,3458
7	0,3247	0,1197
Группа 2		
1	2,8791	0,0159
4	4,5739	0,0000
3	4,7337	0,0000
2	5,5927	0,0000
5	5,6321	0,0000
8	5,7129	0,0000
9	5,7322	0,0000
6	5,8520	0,0000
10	5,8635	0,0000
7	5,9168	0,0000

Примечания. 1. Данные для пациентов *групп 1 и 2* были получены в разных медицинских учреждениях (см. соответственно сноски 1 и 2 на стр. 151).
2. Пациенты *группы 2* страдали онкологическим заболеванием, но другого типа, по сравнению с заболеваниями пациентов *группы 1*.

(кроме первого) находятся вне облака контрольной группы. Из данных таблицы для группы 2 видно, что у этих пациентов вероятность онкологического заболевания, но другого типа, по сравнению с онкологическим заболеванием пациентов группы 1, ничтожно мала.

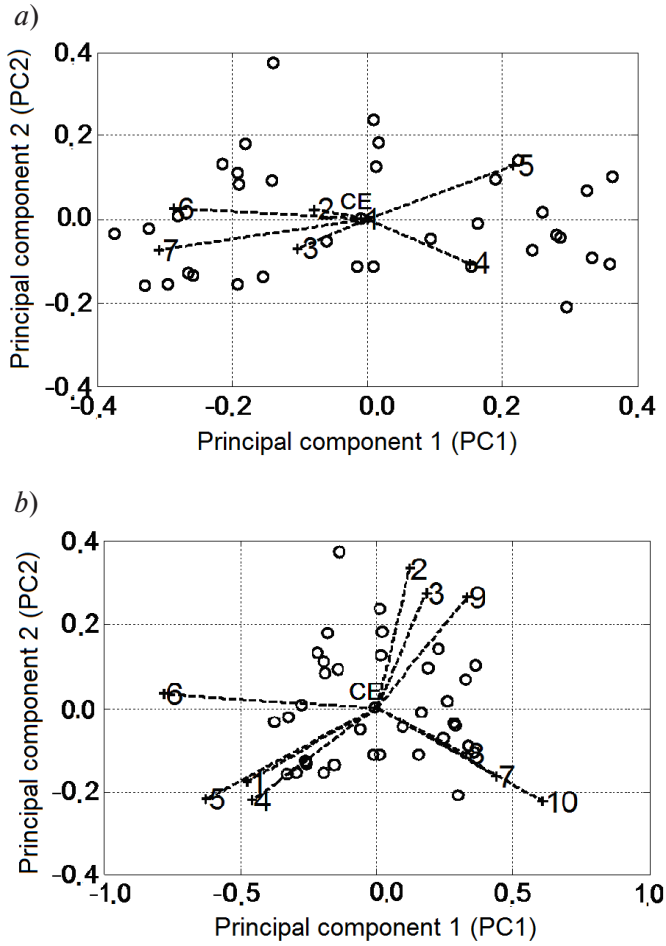


Рис. 2. Представление результатов обследований в пространстве главных компонент (PC1 и PC2) матрицы для контрольных групп 1 (*a*) и 2 (*b*) (см. таблицу). Центральные точки (CE) обозначают евклидов центр, остальные точки (o) – координаты (данные масс-спектров) пациентов соответствующих групп. Пунктирами показаны евклидовы расстояния до пациентов (+), которым присвоены номера

Заключение

Разработанный нами и представленный в настоящей статье алгоритм медицинской диагностики по многомерной плотности вероятности распределения параметров выдыхаемых газов контрольных групп и тестируемых пациентов, позволяет за короткое время выявить общую совокупность наиболее вероятных патологий пациента и при необходимости рекомендовать ему провести дальнейшие обследования. Предложенные алгоритм и метод могут быть также полезны для проведения скрининговых обследований пациентов, например, при проведении диспансеризации.

Эффективность успешного применения алгоритма зависит от объема и достоверности составления массива данных масс-спектров «здоровые» и массива данных «больные». В массив данных «здоровые» должны быть занесены данные зарегистрированных масс-спектров газов, выдыхаемых людьми, которые были предварительно обследованы различными медицинскими специалистами (с большой тщательностью). Эти специалисты должны подтвердить отсутствие патологий различного рода на момент проведения эксперимента по масс-спектрометрическому анализу выдыхаемых газов. Так например, при заполнении массива данных «здоровые» могут быть взяты масс-спектры выдыхаемых газов у лиц, находящихся на воен-

ной службе, или курсантов военных училищ и академий, которые были тщательно обследованы медицинскими специалистами и были признаны годными к службе или прохождению обучения. В последнее время авторами данной статьи были проведены эксперименты по масс-спектрометрическому анализу выдыхаемых газов у более чем 30 курсантов Военно-медицинской академии им. С.М. Кирова (г. Санкт-Петербург), которые были тщательно обследованы медицинскими специалистами и позволили сформировать массив данных «здоровые» и уточнить результаты тестирования алгоритма, представленные в таблице.

В массив данных «больные» должно быть занесено большое количество масс-спектров больных с точно установленным диагнозом, например онкологическим заболеванием определенного типа. Такой массив данных «больные» был составлен в процессе выполнения данной работы, но для повышения достоверности принятия решения о состоянии здоровья обследуемых пациентов такой массив данных следует увеличить хотя бы вдвое-втрое.

Для дальнейшего расширения возможностей описанного алгоритма желательно его применить для обработки данных масс-спектров выдыхаемых газов не только для приборов с квадрупольным анализатором, но и для приборов с другими типами анализаторов: статическим, времяпролетным и др. Для проведения исследований на таких приборах можно использовать систему ввода пробы в анализатор, аналогичную той, которая применялась в наших экспериментах.

Работа выполнена в рамках государственного задания 075-00780-19-02 (номер гос. регистрации АААА-А19-119053190069-2)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Li X., Huang D., Zeng J., Chan Ch.K., Zhou Z.** Positive matrix factorization: A data preprocessing strategy for direct mass spectrometry-based breath analysis // Talanta. 2019. Vol. 192. 15 January. Pp. 32–39.

2. **Li X., Huang L., Zhu H., Zhou Z.** Direct human breath analysis by secondary nano electrospray ionization ultrahigh resolution mass spectrometry: Importance of high mass resolution and mass accuracy // Rapid Communications in Mass Spectrometry. 2017. Vol. 31. No. 3. Pp. 301–308.

3. **Tiele A., Wicaksono A., Daulton E., Ifeachor E., Eyre V., Clarke S., Timings L., Pearson S., Covington J.A., Li X.** Breath-based non-invasive diagnosis of Alzheimer's disease: A pilot study // Journal of Breath Research. 2020. Vol. 14. No. 2. P. 026003.

4. **Van Dartel D., Schelhaas H.J., Colon A.J., Kho K.H., de Vos C.C.** Breath analysis in detecting epilepsy // Journal of Breath Research. 2020. Vol. 14. No. 3. P. 031001.

5. **Chen Ch.-Ch., Hsieh J.-Ch., Chao Ch.-H., Yang W.-Sh., Li X., Cheng H.-T., Chan Ch.-K., Lu Ch.-J., Meng H.-F., Zan H.-W.** Correlation between breath ammonia and blood ureanitrogen levels in chronic kidney disease and dialysis patients // Journal of Breath Research. 2020. Vol. 14. No. 3. P. 036002.

6. **Kononov A., Korotetsky B., Jahatspanian I., et al.** Online breath analysis using metal oxide semiconductor sensors (electronic nose) for diagnosis of lung cancer // Journal of Breath Research. 2020. Vol. 14. No. 1. P. 016004.

7. **Manoilov V.V., Novikov L.V., Belozertsev A.I., Zarutskii I.V., Titov Yu.A., Kuzmin A.G., El-Salim S.Z.** Processing of mass spectra of exhaled gases based on correlation algorithms // Journal of Analytical Chemistry. 2020. Vol. 75. No. 13. Pp. 1678–1684.

8. **Manoilov V.V., Novikov L.V., Zarutskii I.V., Kuzmin A.G., Titov Yu.A.** Methods for processing mass spectrometry signals from exhaled gases for medical diagnosis // Biomedical Engineering. 2020. Vol. 53. No. 5. Pp. 355–359.

9. **Большаков А.А., Каримов Р.Н.** Методы обработки многомерных данных и временных рядов. М.: Горячая линия-Телеком, 2007. 522 с.

10. **Ширяев А.Н.** Вероятность. В 2 кн. 4-е изд., перераб. и доп. Т. 1. Вероятность–1. М.: МЦНМО, 2007. 552 с.

11. **Айвазян С.А., Бухштабер В.М., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д.** Прикладная статистика. Классификация и снижение размерности. М.: Финансы и статистика, 1989. 607 с.

12. **Эсбенсен К.** Анализ многомерных данных: избранные главы. Пер. с англ. Под ред. О.Е. Родионовой. Черноголовка.: ИПХФ РАН, 2005. 161 с.

Статья поступила в редакцию 21.06.2021, принята к публикации 19.07.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МАНОЙЛОВ Владимир Владимирович – *доктор технических наук, заведующий лабораторией автоматизации измерений и цифровой обработки сигналов Института аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

190103, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Рижский пр., 26

manoilov_vv@mail.ru

НОВИКОВ Лев Васильевич – *доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории оптики заряженных частиц и математического моделирования Института аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

190103, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Рижский пр., 26

novik38@mail.ru

КУЗЬМИН Алексей Георгиевич – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории экологической масс-спектрометрии Института аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

190103, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Рижский пр., 26

agqz55@rambler.ru

ТИТОВ Юрий Алексеевич – *научный сотрудник лаборатории автоматизации измерений и цифровой обработки сигналов Института аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

190103, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Рижский пр., 26

toplm@mail.ru

ЗАРУЦКИЙ Игорь Вячеславович – *кандидат технических наук, старший научный сотрудник лаборатории автоматизации измерений и цифровой обработки сигналов Института аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

190103, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Рижский пр., 26

igorzv@yandex.ru

REFERENCES

1. **Li X., Huang D., Zeng J., et al.,** Positive matrix factorization: A data preprocessing strategy for direct mass spectrometry-based breath analysis, Talanta. 192 (15 January) (2019) 32–39.

2. **Li X., Huang L., Zhu H., Zhou Z.,** Direct human breath analysis by secondary nano electrospray ionization ultrahigh resolution mass spectrometry: Importance of high mass resolution and mass accuracy, Rapid Commun. Mass Spectrom. 31 (3) (2017) 301–308.

3. **Tiele A., Wicaksono A., Daulton E., et al.,** Breath-based non-invasive diagnosis of Alzheimer's disease: A pilot study, J. Breath Res. 14 (2) (2020) 026003.

4. **Van Dartel D., Schelhaas H.J., Colon A.J., et al.,** Breath analysis in detecting epilepsy, J. Breath Res. 14 (3) (2020) 031001.

5. **Chen Ch.-Ch., Hsieh J.-Ch., Chao Ch.-H., et al.,** Correlation between breath ammonia and blood ureanitrogen levels in chronic kidney disease and dialysis patients, J. Breath Res. 14 (3) (2020) 036002.

6. **Kononov A., Korotetsky B., Jahatspanian I., et al.,** Online breath analysis using metal oxide semiconductor sensors (electronic nose) for diagnosis of lung cancer, J. Breath Res. 14 (1) (2020) 016004.

7. **Manoilov V.V., Novikov L.V., Belozertsev A.I., et al.,** Processing of mass spectra of exhaled gases based on correlation algorithms, J. Analytical Chem. 75 (13) (2020) 1678–1684.

8. **Manoilov V.V., Novikov L.V., Zarutskii I.V., et al.,** Methods for processing mass spectrometry signals from exhaled gases for medical diagnosis, Biomed. Eng. 53 (5) (2020) 355–359.

9. **Bolshakov A.A., Karimov R.N.,** Metody obrabotki mnogomernykh dannykh i vremennykh ryadov [Methods for processing multivariate data and time series], Goryachaya Liniya-Telekom Publishing, Moscow, 2007 (in Russian).

10. **Shiryayev A.N.,** Probability, Springer-Verlag, New-York, 1996.

11. **Ayvazyan S.A., Bukhshtaber V.M., Enyukov I.S., Meshalkin L.D.,** Prikladnaya statistika. Klassifikatsiya i snizheniye razmernosti [Applied statistics. Classification and dimension reduction], Finance and Statistics Publishing, Moscow, 1989 (in Russian).

12. **Esbensen K.H.,** Multivariate data analysis – in Practice, CAMO, Oslo, 1994 – 2002.

Received 21.06.2021, accepted 19.07.2021.

THE AUTHORS

MANOILOV Vladimir V.
Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences
26, Rizhsky Ave., St. Petersburg, 190103, Russian Federation
manoilov_vv@mail.ru

NOVIKOV Lev V.
Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences
26, Rizhsky Ave., St. Petersburg, 190103, Russian Federation
novik38@mail.ru

KUZMIN Aleksey G.
Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences
26, Rizhsky Ave., St. Petersburg, 190103, Russian Federation
agqz55@rambler.ru

TITOV Yuriy A.
Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences
26, Rizhsky Ave., St. Petersburg, 190103, Russian Federation
toplm@mail.ru

ZARUTSKII Igor V.
Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences
26, Rizhsky Ave., St. Petersburg, 190103, Russian Federation
igorzv@yandex.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14312
УДК 539.12

АНАЛИЗ РОЖДЕНИЯ φ-МЕЗОНОВ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ПУЧКОВ ПРОТОНОВ С ЯДРАМИ АЛЮМИНИЯ И ЗОЛОТА ПРИ ЭНЕРГИЯХ 200 ГэВ

М.М. Митранкова, Е.В. Банников, А.Я. Бердников, Я.А. Бердников, А.В. Дубов, Д.О. Котов, Ю.М. Митранков

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе изучено рождение φ-мезонов в релятивистских столкновениях пучков протонов с ядрами алюминия (p + Al) и золота (p + Au) при энергиях 200 ГэВ, в области малых быстрот. Исследование проведено с помощью детекторной системы «ФЕНИКС» на коллайдере RHIC. С помощью различных теоретических моделей рассчитаны факторы ядерной модификации φ-мезонов в указанных взаимодействиях при условиях, идентичных экспериментальным, проведено сравнение результатов. Установлено, что учет фазы образования кварк-глюонной плазмы (КГП) при моделировании дает хорошее согласие с экспериментом для взаимодействия p + Au и не дает его для p + Al, что может говорить о недостаточности размера системы взаимодействия последнего при энергии 200 ГэВ для формирования КГП, а также достаточности созданных минимальных условий для ее формирования в первом случае.

Ключевые слова: кварк-глюонная плазма, эффект холодной ядерной материи, фактор ядерной модификации

Ссылка при цитировании: Митранкова М.М., Банников Е.В., Бердников А.Я., Бердников Я.А., Дубов А.В., Котов Д.О., Митранков Ю.М. Анализ рождения φ-мезонов в столкновениях пучков протонов с ядрами алюминия и золота при энергиях 200 ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 158–167. DOI: 10.18721/JPM.14312

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creative-commons.org/licenses/by-nc/4.0/)

AN ANALYSIS OF φ MESON PRODUCTION IN THE COLLISIONS OF PROTON BEAMS WITH ALUMINUM AND GOLD NUCLEI AT ENERGIES OF 200 GeV

M.M. Mitrankova, E.V. Bannikov, A.Ya. Berdnikov, Ya.A. Berdnikov, A.V. Dubov, D.O. Kotov, Iu.M. Mitrankov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russian Federation

In the paper, φ meson production in the relativistic collisions at energies of 200 GeV measured by the PHENIX experiment (RHIC) has been studied. Phi mesons' nuclear modification factors were calculated for the mentioned interactions under conditions identical to the experimental ones, using different theoretical models, the results being compared. The accounting for the formation phase of quark-gluon plasma (QGP) in simulation was established to agree well with experiment for the p + Au collisions and disagree for the p + Al ones. This result could indicate an insufficient size of the interaction system of the latter to form QGP at an energy of 200 GeV and the sufficiency of the created minimum conditions for its formation in the former interaction system.

Keywords: quark-gluon plasma, cold nuclear matter effect, nuclear modification factor

Citation: Mitrankova M.M., Bannikov E.V., Berdnikov A.Ya., Berdnikov Ya.A., Dubov A.V., Kotov D.O., Mitrankov Iu.M., An analysis of φ meson production in the collisions of proton beams with aluminum and gold nuclei at energies of 200 GeV, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 158–167. DOI: 10.18721/JPM.14312

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Расчеты квантовой хромодинамики на решетке предсказывают фазовый переход адронного газа в такое состояние вещества, как кварк-глюонная плазма (КГП) при температуре $T \approx 150$ МэВ $\approx 10^{12}$ К (рис. 1 [1]). КГП представляет собой материю из сильно взаимодействующих элементарных частиц, в которой кварки и глюоны находятся в несвязанном состоянии и могут двигаться как квазисвободные частицы.

Систематическое изучение столкновений релятивистских ядер представляет уникальную возможность для исследования фазового перехода квантовой хромодинамики (КХД) в лабораторных условиях. Физическая программа эксперимента «ФЕНИКС» [2] на релятивистском коллайдере тяжелых ионов (*англ.* The Relativistic Heavy Ion Collider, RHIC [3]) включает широкий спектр систем сталкивающихся ядер: от базовых взаимодействий протонных пучков до столкновений тяжелых ионов. Это позволяет изучать различные аспекты условий, необходимых для формирования КГП.

Экспериментальные свидетельства образования КГП были ранее получены при проведении соударений таких систем, как тяжелые ионы золота (Au + Au) [4], меди и золота (Cu + + Au), при ускорении ядер до релятивистской энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ, а также ускорении ядер урана (U + U) при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 192 ГэВ [5]. Что же касается динамики протонных взаимодействий ($p + p$), то она хорошо описывается расчетами пертурбативной КХД [1].

Изучение эллиптического и триангулярного потоков заряженных адронов в малых системах взаимодействий, таких как пучков протонов с ядрами золота (p + Au), ядер дейтерия с ядрами золота (d + Au), ядер гелия-3 с ядрами золота (^{3}He + Au), позволило выдвинуть предположение, что плотность энергии в таких столкновениях достаточна для образования горячей и плотной материи КГП [6, 7]. Для более глубокого понимания эволюции системы необходимы дальнейшие экспериментальные исследования.

Исследование особенностей рождения легких адронов – это один из широко используемых способов изучения процесса образования КГП во взаимодействиях релятивистских ядер [5].

Среди большого разнообразия легких адронов φ-мезон представляет особый интерес [8], поскольку он содержит (анти)странные кварки ($s\bar{s}$), его выходы измеримы до больших значений поперечного импульса и он имеет относительно небольшое сечение адронного взаимодействия, а также время жизни большее, чем время жизни КГП (~ 46 фм/c, по сравнению со значением ~5 фм/c, где c – скорость света в вакууме [1]).

Изучение рождения легких адронов в результате взаимодействий релятивистских ядер позволяет наблюдать различные эффекты горячей (предполагающей образование КГП) [1] и холодной (отражающей начальные и конечные условия взаимодействия) [9] ядерной материи. К явлениям, свидетельствующим об образовании горячей и плотной материи, относят коллективные эффекты, такие как повышенный выход странности [10] и эффект гашения струй [11]. Под эффектами холодной ядерной материи подразумевают эффект Кронина [12], многократное партонное рассеяние [13], модификация начальных функций распределения партонов в ядре [14] и другие эффекты.

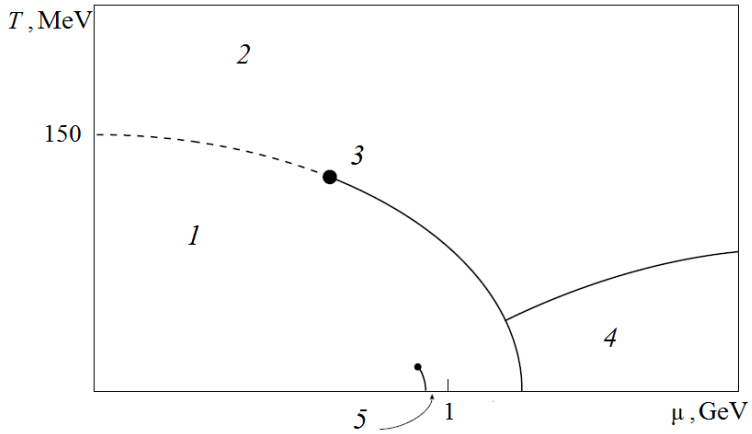


Рис. 1. Теоретическая фазовая диаграмма ядерной материи
как функция температуры *T* и барионного химического потенциала μ:
1 – адронный газ, *2* – кварк-глюонная плазма, *3* – критическая точка,
4 – цветовая сверхпроводимость, *5* – нормальная ядерная материя.
Пунктирной линией показан фазовый переход второго рода

Таким образом, множество эффектов, обусловленных различной природой и свидетельствующих об образовании или отсутствии КГП способны влиять на рождение φ-мезона во взаимодействии релятивистских ядер. Моделирование взаимодействий при тех же самых условиях, при которых проводили эксперимент, позволяет получать, с помощью различных теоретических моделей, ожидаемое влияние эффектов горячей и холодной ядерной материи на рождение φ-мезонов.

Интерпретация экспериментальных данных на основе сравнения с результатами моделирования необходима для понимания минимальных условий формирования КГП.

В данной работе ставилась цель исследования эволюции столкновения систем протонных пучков с ядрами алюминия и золота при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ путем моделирования и сравнения с экспериментом особенностей рождения φ-мезона в подобных столкновениях.

Для моделирования эволюции системы без образования фазы КГП использовались программные пакеты PYTHIA [15] и AMPT [16] с параметрами по умолчанию. Для рассмотрения коллективных эффектов (эффектов КГП) использовалась конфигурация программного пакета AMPT «плавление струн».

Методика измерения и используемые модели

Наборы экспериментальных данных, использованные в анализе, были получены в эксперименте «ФЕНИКС» на коллайдере RHIC при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ в (p + Al)- и (p + Au)-взаимодействиях в области малых быстрот (|η| < 0,35). Рождение φ-мезонов изучалось по каналу распада на два разнозаряженных *K*-мезона. Значения массы φ-мезона, его среднего времени жизни и вероятности распада по данному каналу (Br) представлены в таблице [14].

Таблица

Основные характеристики изучаемого распада φ-мезона

Канал распада	Масса, МэВ/c^2	Среднее время жизни, фм/c	Br, %
$\varphi \to K^+K^-$	1019,455 ± 0,020	46,3 ± 0,4	48,9 ± 0,5

Согласно модели Глаубера [17], при отсутствии коллективных эффектов, взаимодействие релятивистских ядер можно представить в виде суперпозиции элементарных нуклон-нуклонных взаимодействий. Однако различные эффекты как горячей материи, так и холодной могут влиять на эволюцию системы сталкивающихся ядер. Поэтому для изучения коллективных эффектов, влияющих на рождение частиц в столкновениях ультрарелятивистских ядер, используются факторы ядерной модификации R_{AB} [18]. Эта величина вычисляется как отношение инвариантных выходов адронов в столкновении $A + B$ к инвариантному выходу этих же адронов в столкновениях протонных пучков ($p + p$) при той же энергии, нормированное на число неупругих нуклон-нуклонных столкновений (N_{coll}) в системе $A + B$.

В модели Глаубера значение N_{coll} оценивается с помощью моделирования Монте-Карло.

Для более глубокого анализа полученных экспериментальных данных, с помощью программных пакетов PYTHA и AMPT было осуществлено моделирование взаимодействий p + Al и p + Au при энергиях $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ, аналогичных взаимодействиям, проведенным экспериментально. Модель Лунда фрагментации струн широко используется для описания процесса адронизации ($p + p$)-столкновений и для выполнения расчетов КХД [19].

В 1997 году на основе этой модели был создан программный пакет PYTHIA, целью которого является моделирование процесса взаимодействия протонов при высокой энергии. Современной версией программного пакета является PYTHIA 8, которая и использовалась в настоящей работе. Однако результаты вычислений, относящихся к рождению φ-мезона во взаимодействиях протонных пучков при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ, имеют расхождение с экспериментальными данными [20]. Для описания взаимодействий тяжелых (тяжелее протона) релятивистских ядер, на базе PYTHIA была создана новая гибридная модель PYTHIA/Angantyr [21]. В рамках этой модели взаимодействие ядер $A + B$ описывается как суперпозиция элементарных нуклон-нуклонных взаимодействий разного типа (упругое, дифракционное, поглощающее).

В данной работе вычисление факторов ядерной модификации φ-мезона на основе моделирования взаимодействий в программном пакете PYTHIA произведено в соответствии с той же процедурой, которая применялась к экспериментальным данным. Значения фактора ядерной модификации R_{AB} вычислялись как отношение инвариантных выходов φ-мезонов во взаимодействиях p + Al или p + Au, полученных с помощью программного пакета PYTHIA/Angantyr, к аналогичному инвариантному выходу φ-мезонов во взаимодействии протонных пучков при той же энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ, полученное с помощью стандартного пакета PYTHIA 8. Данное отношение нормировано на экспериментальное число неупругих нуклон-нуклонных столкновений (N_{coll}) в системе p + Al или p + Au соответственно. Благодаря такой процедуре вычисления факторов ядерной модификации, устраняется вышеупомянутое расхождение экспериментальных данных с расчетными для инвариантного выхода φ-мезонов во взаимодействиях протонных пучков, выполненных с помощью пакета PYTHIA 8.

Другой теоретической моделью, широко используемой для описания эволюции столкновений релятивистских ионов, является многофазная транспортная модель (*англ.* A Multi-Phase Transport model, AMPT model). Программный пакет, основанный на данной модели, дает возможность всестороннего исследования процесса возможного образования КГП. Модель AMPT с параметрами по умолчанию описывает эволюцию взаимодействия релятивистских ядер без учета образования КГП. Данная конфигурация модели AMPT включает следующие стадии:

начальные условия;

партонный каскад с учетом связанного состояния кварков и глюонов;

переход от партонной к адронной материи на основе модели Лунда фрагментации струн;

адронные взаимодействия.

В расширенной конфигурации программного пакета AMPT «плавление струн» учитывается формирование фазы КГП: проводится моделирование партонного каскада, после которого следует объединение партонов в адроны с помощью модели кварковой коалесценции [16]. В данном случае факторы ядерной модификации φ-мезона были рассчитаны как отношение их инвариантных выходов в изучаемых взаимодействиях, полученных с помощью программного пакета AMPT, к экспериментальному значению аналогичного инвариантного выхода во взаимодействии протонных пучков ($p + p$) при той же энергии [22], нормированное на экспериментальное число N_{coll} неупругих нуклон-нуклонных столкновений p + Al или p + Au соответственно.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Сравнение факторов ядерной модификации φ-мезонов в столкновениях p + Al и p + Au при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ, полученных в эксперименте «ФЕНИКС», и факторов ядерной модификации φ-мезонов в аналогичных взаимодействиях, рассчитанных с помощью

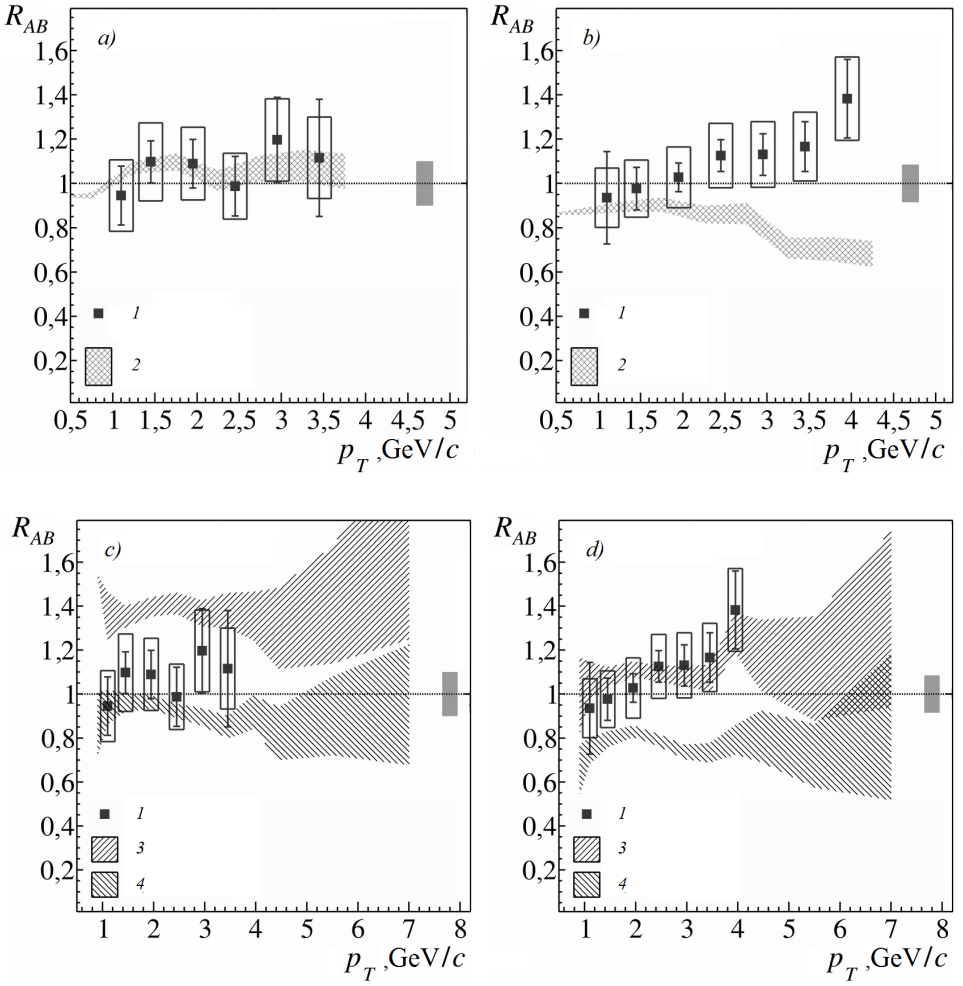


Рис. 2. Распределения факторов ядерной модификации φ-мезонов по поперечному импульсу p_T в (p + Al)- (a,c) и (p + Au)- (b,d) взаимодействиях при $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ; данные получены экспериментально (*1*), с помощью программного пакета PYTHIA (*2*), программного пакета AMPT, версия с плавлением струн (*3*) и с параметрами по умолчанию (*4*). «Усы» и «прямоугольники» обозначают статистическую и систематическую неопределенности измерений, затушеванные прямоугольники справа обозначают нормировочную неопределенность

программного пакета PYTHIA, представлено на рис. 2, *a*,*b*. Видно, что результаты расчета факторов ядерной модификации φ-мезонов, полученные с помощью программного пакета PYTHIA, хорошо согласуются с экспериментальными результатами в столкновениях p + + Al при $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ. Однако во взаимодействиях p + Au при $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ значения R_{AB}, рассчитанные с помощью модели PYTHIA, оказываются меньше, чем R_{AB}, полученные в эксперименте. При этом следует отметить, что расхождение растет с увеличением поперечного импульса p_T.

На рис. 2,*c*,*d* представлены распределения факторов ядерной модификации R_{AB} по поперечному импульсу, измеренные для φ-мезонов в (p + Al)- и (p + Au)-взаимодействиях при той же энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ, в эксперименте «ФЕНИКС» и с помощью программного пакета AMPT. Модель AMPT с параметрами по умолчанию хорошо описывает экспериментальные результаты в (p + Al)-взаимодействиях, в то время как для (p + Au)-взаимодействий конфигурация AMPT «плавление струн» дает меньшие значения R_{AB}, чем экспериментальные. С другой стороны, значения факторов ядерной модификации φ-мезонов, рассчитанные с помощью конфигурации модели AMPT «плавление струн», превосходят экспериментальные в (p + Al)-взаимодействиях, но хорошо согласуются с таковыми в (p + Au)-взаимодействиях.

Заключение

В настоящей работе проведен анализ рождения φ-мезонов в столкновениях протонных пучков с ядрами алюминия и ядрами золота при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ в области малых быстрот. Проведено моделирование взаимодействий при тех же условиях, что исследовались в эксперименте, с помощью программных пакетов PYTHIA и AMPT и сравнение полученных экспериментальных результатов с данными теоретических расчетов.

Распределение факторов ядерной модификации φ-мезонов в (p + Au)-столкновениях при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ в области малых быстрот совпадает с расчетными результатами, выполненными с помощью конфигурации модели AMPT «плавление струн», в пределах погрешностей, в то время как значения факторов ядерной модификации, полученные в программных пакетах PYTHIA и AMPT с параметрами по умолчанию, оказались меньше экспериментальных значений.

Напротив, распределение факторов ядерной модификации φ-мезонов в (p + Al)-столкновениях при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ, в области малых быстрот, совпадает с расчетными данными, выполненными с помощью PYTHIA и AMPT с параметрами по умолчанию, в пределах погрешностей, в то время как значения факторов ядерной модификации, полученные помощью конфигурации модели AMPT «плавление струн», оказались больше экспериментальных значений.

Полученный результат может свидетельствовать в пользу того, что механизм образования φ-мезона при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ во взаимодействиях протонных пучков с ядрами алюминия существенно отличается от такового во взаимодействиях протонных пучков с ядрами золота. Минимальные условия (температура и барионная плотность), необходимые для формирования КГП, возможно, достигаются во взаимодействиях пучков протонов с ядрами золота при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ, в то время как во взаимодействиях пучков протонов с ядрами алюминия при той же энергии признаков образования КГП не наблюдается.

Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2020-0024).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Adcox K., Adler S.S., Afanasiev S., et al.** Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC: experimental evaluation by the PHENIX Collaboration // Nuclear Physics A. 2005. Vol. 757. No. 1–2. Pp. 184–283.

2. **Adcox K., Adler S.S., Aizama M., et al.** (PHENIX Collaboration). PHENIX detector overview // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2003. Vol. 499. No. 2–3. Pp. 469–479.

3. **Harrison M., Ludlam T., Ozaki S.** RHIC project overview // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. A. 2003. Vol. 499. No. 2–3. Pp. 235–244.

4. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** Nuclear modification factors of φ mesons in *d* + Au, Cu + + Cu and Au + Au collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 GeV // Physical Review. C. 2011. Vol. 83. No. 2. P. 024909.

5. **Berdnikov A., Berdnikov Ya., Kotov D., et al.** Phi meson measurements in Cu + Au collisions at 200 GeV and in U + U collisions at 192 GeV // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. Vol. 1135. No. 1. P. 012044.

6. **Aidala C., Akiba Y., Alfred M., et al.** (PHENIX Collaboration). Creation of quark-gluon plasma droplets with three distinct geometries // Nature Physics. 2019. Vol. 15. March. Pp. 214–220.

7. **Nagle J., Zajc W.** Small system collectivity in relativistic hadronic and nuclear collisions // Annual Review of Nuclear and Particle Science. 2018. Vol. 68. Pp. 211–235.

8. **Shor A.** Phi meson production as a probe of the quark-gluon plasma // Physical Review Letters. 1985. Vol. 54. No. 11. Pp. 1122–1125.

9. **Armesto N.** Small collision systems: theory overview on cold nuclear matter effects // EPJ Web of Conferences. 2018. Vol. 171. P. 11001.

10. **Koch P., Müller B., Rafelski J.** Strangeness in relativistic heavy ion collisions // Physics Reports. 1986. Vol. 142. No. 4. Pp. 167–262.

11. **d'Enterria D.** (CERN and MIT, LNS). 6.4. Jet quenching. Springer materials (Germany). Ed. by R. Stock. Landolt-Bornstein – Group I – Elementary Particles, Nuclei and Atoms. 2010. Vol. 23 (Relativistic Heavy Ion Physics). Pp. 471–520.

12. **Kopeliovich B.Z., Nemchik J., Schäfer A., Tarasov A.V.** Cronin effect in hadron production of nuclei // Physical Review Letters. 2002. Vol. 88. No. 23. P. 232303.

13. **Arneodo M.** Nuclear effects in structure functions // Physics Reports. 1994. Vol. 240. No. 5–6. Pp. 301–393.

14. **Nakamura K. et Particle Data Group.** Review of particle physics // Journal of Physics G. 2010. Vol. 37. No. 7A. P. 075021.

15. **Sjostrand T., Ask S., Christiansen J., Corke R., Desai N., Ilten P., Mrenna S., Prestel S., Rasmussen C., Skands P.** An introduction to PYTHIA 8.2 // Computer Physics Communications. 2015. Vol. 191. June. Pp. 159–177.

16. **Lin Z.-W., Ko C. M., Li B.-A., Zhang B., Pal S.** Multiphase transport model for relativistic heavy ion collisions // Physical Review C. 2005. Vol. 72. No. 6. P. 064901.

17. **Miller M., Reygers K., Sanders S., Steinberg P.** Glauber modeling in high energy nuclear collisions // Annual Review of Nuclear and Particle Science. 2007. Vol. 57. Pp. 205–243.

18. **Mitrankova M.M., Berdnikov Ya.A., Berdnikov A.Ya., Kotov D.O., Mitrankov Iu.M.** Production of light flavor hadrons in small systems measured by PHENIX at RHIC // Physica Scripta. 2021. Vol. 96. No. 8. P. 084010

19. **Andersson B., Mohanty S., Soderberg F.** Parton fragmentation and string dynamics // Physics Reports. 1983. Vol. 97. No. 2–3. Pp. 31–145.

20. **Adam J., Adamova D., Aggarwal M., et. al.** $K^*(892)^0$ and φ(1020) meson production at high transverse momentum in *p-p* and Pb-Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 2.76 TeV // Physical Review. C. 2017. Vol. 95. No. 6. P. 064606.

21. **Bierlich C., Gustafson G., Lönnblad L., Shah H.** The Angantyr model for heavy-ion collisions in PYTHIA 8 // Journal of High Energy Physics. 2018. Vol. 2018. No. 10. P. 134.

22. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** Measurement of neutral mesons in $p + p$ collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 GeV and scaling properties of hadron production // Physical Review D. 2011. Vol. 83. No. 5. P. 052004.

Статья поступила в редакцию 20.06.2021, принята к публикации 05.07.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МИТРАНКОВА Мария Максимовна – *аспирантка Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

mashalario@gmail.com

БАННИКОВ Егор Викторович – *студент магистратуры Института энергетики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

bannikov.ev.21@gmail.com

БЕРДНИКОВ Александр Ярославич – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

alexber@phmf.spbstu.ru

БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

berdnikov@spbstu.ru

ДУБОВ Александр Викторович – *аспирант Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

alexanderpolytech@mail.ru

КОТОВ Дмитрий Олегович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

dmitriy.kotov@gmail.com

МИТРАНКОВ Юрий Михайлович – *ассистент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

mitrankovy@gmail.com

REFERENCES

1. **Adcox K., Adler S.S., Afanasiev S., et al.,** Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC: experimental evaluation by the PHENIX Collaboration, Nucl. Phys. A. 757 (1–2) (2005) 184–283.

2. **Adcox K., Adler S.S., Aizama M., et al.** (PHENIX Collaboration), PHENIX detector overview, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., A. 499 (2–3) (2003) 469–479.

3. **Harrison M., Ludlam T., Ozaki S.,** RHIC project overview, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., A. 499 (2–3) (2003) 235–244.

4. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.,** Nuclear modification factors of φ mesons in *d* + Au, Cu + + Cu and Au + Au collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 GeV, Phys. Rev. C. 83 (2) (2011) 024909.

5. **Berdnikov A., Berdnikov Ya., Kotov D., et al.,** Phi meson measurements in Cu + Au collisions at 200 GeV and in U + U collisions at 192 GeV, J. Phys., Conf. Ser. 1135 (1) (2018) 012044.

6. **Aidala C., Akiba Y., Alfred M., et al.** (PHENIX Collaboration), Creation of quark-gluon plasma droplets with three distinct geometries, Nat. Phys. 15 (March) (2019) 214–220.

7. **Nagle J., Zajc W.,** Small system collectivity in relativistic hadronic and nuclear collisions, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 68 (2018) 211–235.

8. **Shor A.** Phi meson production as a probe of the quark-gluon plasma, Phys. Rev. Lett. 54 (11) (1985) 1122–1125.

9. **Armesto N.,** Small collision systems: theory overview on cold nuclear matter effects, EPJ Web of Conferences. 171 (2018) 11001.

10. **Koch P., Müller B., Rafelski J.,** Strangeness in relativistic heavy ion collisions, Phys. Rep. 142 (4) (1986) 167–262.

11. **d'Enterria D.** (CERN and MIT, LNS), 6.4. Jet quenching, Springer materials (Germany), Ed. by R. Stock, Landolt-Bornstein – Group I – Elementary Particles, Nuclei and Atoms. 23 (Relativistic Heavy Ion Physics) (2010) 471–520.

12. **Kopeliovich B.Z., Nemchik J., Schäfer A., Tarasov A.V.,** Cronin effect in hadron production of nuclei, Phys. Rev. Lett. 88 (23) (2002) 232303.

13. **Arneodo M.,** Nuclear effects in structure functions, Phys. Rep. 240 (5–6) (1994) 301–393.

14. **Nakamura K. et Particle Data Group.,** Review of particle physics, J. Phys. G. 37 (7A) (2010) 075021.

15. **Sjostrand T., Ask S., Christiansen J., et al.,** An introduction to PYTHIA 8.2, Comp. Phys. Comm. 191 (June) (2015) 159–177.

16. **Lin Z.-W., Ko C. M., Li B.-A., et al.,** Multiphase transport model for relativistic heavy ion collisions, Phys. Rev. C. 72 (6) (2005) 064901.

17. **Miller M., Reygers K., Sanders S., Steinberg P.,** Glauber modeling in high energy nuclear collisions, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 57 (2007) 205–243.

18. **Mitrankova M.M., Berdnikov Ya.A., Berdnikov A.Ya., et al.,** Production of light flavor hadrons in small systems measured by PHENIX at RHIC, Phys. Scr. 96 (8) (2021) 084010.

19. **Andersson B., Mohanty S., Soderberg F.,** Parton fragmentation and string dynamics, Phys. Rep. 97 (2–3) (1983) 31–145.

20. **Adam J., Adamova D., Aggarwal M., et. al.,** $K^*(892)^0$ and φ(1020) meson production at high transverse momentum in *p-p* and Pb-Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 2.76 TeV, Phys. Rev. C. 95 (6) (2017) 064606.

21. **Bierlich C., Gustafson G., Lönnblad L., Shah H.,** The Angantyr model for heavy-ion collisions in PYTHIA 8, J. High Energy Phys. 2018 (10) (2018) 134.

22. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.,** Measurement of neutral mesons in *p* + *p* collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 GeV and scaling properties of hadron production, Phys. Rev. D. 83 (5) (2011) 05200422.

Received 20.06.2021, accepted 05.07.2021.

THE AUTHORS

MITRANKOVA Mariia M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
mashalario@gmail.com

BANNIKOV Egor V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
bannikov.ev.21@gmail.com

BERDNIKOV Alexander Ya.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
alexber@phmf.spbstu.ru

BERDNIKOV Yaroslav A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
berdnikov@spbstu.ru

DUBOV Alexander V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
alexanderpolytech@mail.ru

KOTOV Dmitry O.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
dmitriy.kotov@gmail.com

MITRANKOV Iurii M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
mitrankovy@gmail.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

DOI: 10.18721/JPM.14313
UDC 514.13:531.51

THE RELATIVISTIC UNIFORM MODEL: THE METRIC OF THE COVARIANT THEORY OF GRAVITATION INSIDE A BODY

S.G. Fedosin

Perm, Perm Territory, Russian Federation
sergey.fedosin@gmail.com

In the paper, it has been established that the sum of stress-energy tensors of the electromagnetic and gravitational fields, the acceleration and the pressure ones inside a stationary uniform spherical body vanishes within the framework of relativistic uniform model. This fact significantly simplifies a solution of the equation for the metric in the covariant theory of gravitation (CTG). The metric tensor components inside the body were calculated, and then they were combined with those of external metric tensor on the body's surface. The latter procedure also allowed us to exactly determine one of two unknown coefficients in the metric outside the body. The comparison between the CTG metric and the Reissner – Nordström one in general theory of relativity clearly demonstrated their difference caused by discrepancy between equations for the metric and a difference in formulations of the cosmological constant.

Keywords: metric, covariant theory of gravitation, scalar curvature, cosmological constant

Citation: Fedosin S.G., The relativistic uniform model: the metric of the covariant theory of gravitation inside a body, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 168–184. DOI: 10.18721/JPM.14313

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

О МЕТРИКЕ КОВАРИАНТНОЙ ТЕОРИИ ГРАВИТАЦИИ ВНУТРИ ТЕЛА В РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ОДНОРОДНОЙ МОДЕЛИ

С.Г. Федосин

г. Пермь, Пермский край, Российская Федерация
sergey.fedosin@gmail.com

В работе доказывается, что сумма тензоров энергии-импульса электромагнитного и гравитационного полей, поля ускорений и поля давления внутри неподвижного однородного сферического тела обращается в нуль в рамках релятивистской однородной модели. Это обстоятельство существенно упрощает решение уравнения для метрики в ковариантной теории гравитации (КТГ). Вычисляются компоненты метрического тензора внутри рассматриваемого тела, а затем на его поверхности они «сшиваются» с компонентами внешнего метрического тензора. Последняя процедура позволяет точно определить один из двух неизвестных коэффициентов в метрике за пределами тела. Сравнение метрики КТГ с метрикой Рейсснера – Нордстрёма в общей теории относительности наглядно показывает их различие, которое обусловлено несовпадением уравнений для метрики, а также различием формулировок космологической постоянной.

Ключевые слова: метрика, ковариантная теория гравитации, скалярная кривизна, космологическая постоянная, релятивистская система

Ссылка при цитировании: Федосин С.Г. О метрике ковариантной теории гравитации внутри тела в релятивистской однородной модели // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 168–184. DOI: 10.18721/JPM.14313

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creative-commons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Introduction

In modern physics, the space-time metric of a certain physical system is completely defined by the corresponding metric tensor. The metric definition is of particular importance in the general theory of relativity, where the metric describes an action of gravity. In contrast, in the covariant theory of gravitation (CTG), gravity is an independent physical interaction. In this case, the metric of CTG is required mainly to describe the additional effects, associated with the interaction of electromagnetic waves with the gravitational field in the processes of space-time measurements by means of these waves. Accordingly, the metric form depends significantly on the theory of gravitation used.

Despite the success of the general theory of relativity in describing various gravitational phenomena, the theoretical foundation of this theory is still unsatisfactory. First of all, this is due to the absence of a generally recognized energy-momentum tensor of the gravitational field itself, the search for which has continued to this day [1 – 3]. Accordingly, the energy and momentum of a system becomes ambiguous or not conserved [4 – 6]. Other problems include emerging singularities, the need to interpret the cosmological constant, dark matter, dark energy, etc. In this regard, the search for alternatives to the general theory of relativity remains relevant, in particular, among vector-tensor theories [7 – 9].

The CTG refers to vector theories and has a well-defined energy-momentum tensor of the gravitational field. Outside a fixed spherical body, the metric tensor components within the framework of CTG were determined in Ref. [10]. Only the gravitational and electromagnetic fields exist outside the body, therefore only these fields exert their influence on the space-time metric here. Using this metric, it was possible to calculate the Pioneer effect, which has no explanation in the general theory of relativity [11]. CTG formulas describing the gravitational time dilation, the gravitational redshift of the wavelength, the signal delay in the gravitational field, lead to the same results as the general theory of relativity [12].

Next, we will calculate the metric of CTG inside a spherical body. In the presence of the matter, we should take into account the pressure field, which we consider in a covariant form as a vector field. Similarly, the concept of the vector acceleration field [13, 14] is used to calculate the energy and momentum of the matter, and its contribution into the equation for the metric. It is the representation of these fields in the form of vector fields that made it possible to find a covariant expression for the Navier – Stokes equation [15]. In contrast, in the general relativity, the pressure field and the acceleration one are almost always considered as simple scalar fields. Consequently, we can assume that CTG represents the contribution of the fields to the energy and momentum more accurately, as well as it does to the metric of the system.

In order to simplify the solution of the problem, we will assume that the matter of the body moves chaotically in the volume of the spherical shape, and it is kept from disruption by gravitation. The gravitational force in such macroscopic objects, as planets and stars, is so strong that it is sufficient to form the spherical shapes of them. This force is counteracted by the pressure force in the matter and the force from the acceleration field. One of the manifestations of the force from the acceleration field is the centrifugal force arising from that component of the particles' velocity, which is perpendicular to the radius-vector of the particles. We can also take into account the electromagnetic field and the corresponding force, which usually leads to repulsion of the charged matter in case of the excess charge of one sign. We will also assume that the physical system under consideration is a relativistic uniform system, in which the mass and charge distributions are similar to each other. This will allow us to use the expressions found earlier for the potentials and field strengths.

The need to determine the metric inside the matter arises as a consequence of the fact that the comparison of expressions for the components of the metric tensor inside and outside the matter makes it possible to unambiguously determine one of the unknown coefficients in the external metric. As a result, we obtain a more accurate expression for the CTG metric, suitable for solving more complex problems and considering small gravitational effects.

The equation for the metric

The use of the principle of least action leads to the following equation for the metric in CTG [14]:

$$R_\alpha^\beta - \frac{1}{4} R \delta_\alpha^\beta = -\frac{1}{2ck}\left(U_\alpha^\beta + W_\alpha^\beta + B_\alpha^\beta + P_\alpha^\beta\right), \tag{1}$$

where c is the speed of light; k is the constant, which is part of the Lagrangian in the terms with the scalar curvature R and with the cosmological constant Λ; R_α^β is the Ricci tensor with the mixed indices; δ_α^β is the unit tensor (the Kronecker symbol); U_α^β, W_α^β, B_α^β and P_α^β are the stress-energy tensors of the gravitational, electromagnetic, the acceleration and the pressure ones, respectively.

As was shown in Ref. [16] all the quantities in Eq. (1) should be averaged over the volume of the system's typical particles, if Eq. (1) is used to find the metric inside the body. We will further assume that such averaging has already been carried out in Eq. (1). Another conclusion in Ref. [16] is that, within the framework of the relativistic uniform model, the scalar curvature inside a stationary body with the constant relativistically invariant mass density and charge is a certain constant quantity $\overline{R}$. In this case, the relation $\overline{R} = 2\overline{\Lambda}$ holds in CTG, where $\overline{\Lambda}$ is the averaged cosmological constant for the matter inside the body.

Acting in the same way as we did in Ref. [10], we will use the spherical coordinates

$$x^0 = ct,\ x^1 = r,\ x^2 = \theta,\ x^3 = \varphi,$$

related to the Cartesian coordinates by the relations:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi,\ \ y = r\sin\theta\sin\varphi,\ \ z = r\cos\theta.$$

For the static metric, the standard form of the metric tensor of the spherical uniform body is as follows:

$$g_{\alpha k} = \begin{pmatrix} B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -K & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E\sin^2\theta \end{pmatrix}, \tag{2}$$

$$g^{k\beta} = \begin{pmatrix} \frac{1}{B} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{K} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{E} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{E\sin^2\theta} \end{pmatrix}, \tag{3}$$

where B, K, E are the functions of the radial coordinate r only and do not depend on the angular variables.

And there are four nonzero components of the metric tensor:

$$g_{00} = B,\ g_{11} = -K,\ g_{22} = -E,\ g_{33} = -E\sin^2\theta.$$

By definition, the Christoffel coefficients $\Gamma^{\beta}_{\mu\nu}$ are expressed in terms of the metric tensor and its derivatives:

$$\Gamma^{\beta}_{\mu\nu} = \frac{1}{2} g^{\beta\gamma}\left(\partial_\mu g_{\gamma\nu} + \partial_\nu g_{\gamma\mu} - \partial_\gamma g_{\mu\nu}\right). \tag{4}$$

If we denote the derivatives with respect to the radius r by primes, then the nonzero Christoffel coefficients, expressed in terms of the functions B, K, E in the metric tensors (2) and (3), are equal, according to Eq. (4), to the following:

$$\begin{gathered}\Gamma^{0}_{01} = \Gamma^{0}_{10} = \frac{B'}{2B},\ \Gamma^{1}_{00} = \frac{B'}{2K},\ \Gamma^{1}_{11} = \frac{K'}{2K},\ \Gamma^{1}_{22} = -\frac{E'}{2K},\ \Gamma^{1}_{33} = -\frac{E'\sin^2\theta}{2K},\\ \Gamma^{2}_{12} = \Gamma^{2}_{21} = \Gamma^{3}_{13} = \Gamma^{3}_{31} = \frac{E'}{2E},\ \Gamma^{2}_{33} = -\sin\theta\cos\theta,\ \Gamma^{3}_{23} = \Gamma^{3}_{32} = \operatorname{ctg}\theta.\end{gathered} \tag{5}$$

With the help of coefficients (5) we will calculate the components of the Ricci tensor with the covariant indices using the standard formula:

$$R_{\mu\nu} = \partial_\alpha \Gamma^{\alpha}_{\mu\nu} - \partial_\nu \Gamma^{\alpha}_{\mu\alpha} + \Gamma^{\alpha}_{\mu\nu}\Gamma^{\beta}_{\alpha\beta} - \Gamma^{\alpha}_{\mu\beta}\Gamma^{\beta}_{\alpha\nu}.$$

This will give four nonzero components:

$$\begin{gathered}R_{00} = \frac{B''}{2K} - \frac{B'^2}{4BK} - \frac{B'K'}{4K^2} + \frac{B'E'}{2KE},\ R_{11} = -\frac{B''}{2B} + \frac{B'^2}{4B^2} - \frac{E''}{E} + \frac{E'^2}{2E^2} + \frac{B'K'}{4BK} + \frac{K'E'}{2KE},\\ R_{22} = -\frac{E''}{2K} + \frac{E'K'}{4K^2} - \frac{E'B'}{4BK} + 1,\ R_{33} = \sin^2\theta\, R_{22}.\end{gathered} \tag{6}$$

Eq. (1) contains the components of the Ricci tensor with the mixed indices, which can be found by multiplying the components of this tensor with the covariant indices by the metric tensor using the $R^{\beta}_{\alpha} = R_{\alpha\mu} g^{\mu\beta}$ formula. By application of components (6) and metric tensor (3), we find:

$$\begin{gathered}R_0^{\ 0} = \frac{B''}{2BK} - \frac{B'^2}{4B^2K} - \frac{B'K'}{4BK^2} + \frac{B'E'}{2BKE},\\ R_1^{\ 1} = \frac{B''}{2BK} - \frac{B'^2}{4B^2K} - \frac{B'K'}{4BK^2} + \frac{E''}{KE} - \frac{E'^2}{2KE^2} - \frac{K'E'}{2K^2E},\\ R_2^{\ 2} = \frac{E''}{2KE} + \frac{B'E'}{4BKE} - \frac{K'E'}{4K^2E} - \frac{1}{E},\ R_3^{\ 3} = R_2^{\ 2}.\end{gathered} \tag{7}$$

Using formulas (6) and (3), we will calculate the scalar curvature as follows:

$$R = R_{\mu\nu} g^{\mu\nu} = \frac{B''}{BK} - \frac{B'^2}{2B^2K} - \frac{B'K'}{2BK^2} + \frac{B'E'}{BKE} + \frac{2E''}{KE} - \frac{E'^2}{2KE^2} - \frac{K'E'}{K^2E} - \frac{2}{E}. \tag{8}$$

The field tensors

The stress-energy tensors of the gravitational field [17, 18], the electromagnetic, the acceleration and the pressure ones [14], located on the right-hand side of the Eq. (1) for the metric, can be expressed as follows:

$$
\begin{aligned}
U_{\alpha}^{\ \beta} &= -\frac{c^2}{4\pi G} g^{\mu\kappa}\left(-\delta_{\alpha}^{\lambda} g^{\sigma\beta} + \frac{1}{4}\delta_{\alpha}^{\beta} g^{\sigma\lambda}\right)\Phi_{\mu\lambda}\Phi_{\kappa\sigma},\\
W_{\alpha}^{\ \beta} &= \varepsilon_0 c^2 g^{\mu\kappa}\left(-\delta_{\alpha}^{\lambda} g^{\sigma\beta} + \frac{1}{4}\delta_{\alpha}^{\beta} g^{\sigma\lambda}\right)F_{\mu\lambda}F_{\kappa\sigma},\\
B_{\alpha}^{\ \beta} &= \frac{c^2}{4\pi\eta} g^{\mu\kappa}\left(-\delta_{\alpha}^{\lambda} g^{\sigma\beta} + \frac{1}{4}\delta_{\alpha}^{\beta} g^{\sigma\lambda}\right)u_{\mu\lambda}u_{\kappa\sigma},\\
P_{\alpha}^{\ \beta} &= \frac{c^2}{4\pi\sigma} g^{\mu\kappa}\left(-\delta_{\alpha}^{\lambda} g^{\sigma\beta} + \frac{1}{4}\delta_{\alpha}^{\beta} g^{\sigma\lambda}\right)f_{\mu\lambda}f_{\kappa\sigma}.
\end{aligned}
\tag{9}
$$

Here $\Phi_{\mu\lambda}$, $F_{\mu\lambda}$, $u_{\mu\lambda}$ and $f_{\mu\lambda}$ are the tensors of the gravitational, the electromagnetic, the acceleration and the pressure fields, respectively; G, ε_0, η and σ are the gravitational, the electric, the acceleration and the pressure fields' constants, respectively.

The stress-energy tensors in Eqs. (9) were derived from the principle of the least action under the assumption that all the physical fields in the system under consideration were described as vector fields that had their own 4-potentials [13]. Due to the fact that the field tensors have the same form, it was possible to combine all the fields into a single general field [19, 20].

Let us express the 4-potentials of the fields in terms of the corresponding scalar and vector potentials of these fields:

$$D_{\lambda} = \left(\frac{\psi}{c}, -\mathbf{D}\right) \text{ for the gravitational field,}$$

$$A_{\lambda} = \left(\frac{\varphi}{c}, -\mathbf{A}\right) \text{ for the electromagnetic field,}$$

$$U_{\lambda} = \left(\frac{\vartheta}{c}, -\mathbf{U}\right) \text{ for the acceleration field,}$$

$$\pi_{\lambda} = \left(\frac{\wp}{c}, -\mathbf{\Pi}\right) \text{ for the pressure field.}$$

The gravitational tensor is defined as the 4-curl of the 4-potential [17]. Similarly, the electromagnetic tensor, the acceleration tensor and the pressure field tensor [14] are calculated and have the following form:

$$
\begin{aligned}
\Phi_{\mu\lambda} &= \nabla_{\mu}D_{\lambda} - \nabla_{\lambda}D_{\mu} = \partial_{\mu}D_{\lambda} - \partial_{\lambda}D_{\mu}, \quad F_{\mu\lambda} = \nabla_{\mu}A_{\lambda} - \nabla_{\lambda}A_{\mu} = \partial_{\mu}A_{\lambda} - \partial_{\lambda}A_{\mu},\\
u_{\mu\lambda} &= \nabla_{\mu}U_{\lambda} - \nabla_{\lambda}U_{\mu} = \partial_{\mu}U_{\lambda} - \partial_{\lambda}U_{\mu}, \quad f_{\mu\lambda} = \nabla_{\mu}\pi_{\lambda} - \nabla_{\lambda}\pi_{\mu} = \partial_{\mu}\pi_{\lambda} - \partial_{\lambda}\pi_{\mu}.
\end{aligned}
\tag{10}
$$

In the system under consideration, the vector potentials **D**, **A**, **U** and **Π** of all the fields are close to zero because of the random motion of the matter's particles. This is due to the fact that the vector potentials of individual particles are directed along the particles' velocities, and therefore they change each time as a result of interactions.

The global vector potential of each field inside the body is calculated as the vector sum of the corresponding vector potentials of the particles. At each time point, most of the particles in the system have oppositely directed velocities and vector potentials, so that the vector sum of these potentials tends to zero on the average. The more particles are present in the system, the more exactly the equality to zero holds for the global vector potentials of the fields. We will not also take into account the proper vector potentials of individual particles. As was shown in Ref. [21], the energy of the particles' motion arises due to all these potentials, which is approximately equal to their kinetic energy. Thus the inaccuracy, arising from equating the vector potentials **D**, **A**, **U** and **Π** to zero, does not exceed the inaccuracy in the case when only the rest energy is taken into account in the system's energy and the kinetic energy of the particles is neglected.

As for the scalar field potentials ψ, φ, ϑ and $\wp$, in the static case for a stationary spherical body, they must depend only on the current radius r and must not depend on either time or angular variables.

Assuming that $\mathbf{D} \approx 0$ and neglecting the contribution of the vector potential **D**, in the spherical coordinates

$$x^0 = ct,\ \ x^1 = r,\ \ x^2 = \theta,\ \ x^3 = \varphi$$

we find, from tensors (10) and (3), the nonzero components of the gravitational tensor:

$$\Phi_{01} = -\Phi_{10} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{1}{c}\frac{\partial D_r}{\partial t} \approx -\frac{1}{c}\frac{\partial\psi}{\partial r}. \tag{11}$$

In Eq. (11) the quantity D_r in the spherical coordinates is the projection of the vector potential on the radial component of the 4-dimensional coordinate system. In this case, the quantity

$$\Gamma_r = c\Phi_{01} = -\frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{\partial D_r}{\partial t}$$

is the projection of the gravitational field strength on the radial component of the coordinate system.

The nonzero components of the electromagnetic field tensor, the acceleration one, and the pressure field tensor are obtained similarly to Eq. (11):

$$\begin{gathered} F_{01} = -F_{10} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial r} - \frac{1}{c}\frac{\partial A_r}{\partial t} \approx -\frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial r},\ \ u_{01} = -u_{10} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vartheta}{\partial r} - \frac{1}{c}\frac{\partial U_r}{\partial t} \approx -\frac{1}{c}\frac{\partial\vartheta}{\partial r}, \\ f_{01} = -f_{10} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\wp}{\partial r} - \frac{1}{c}\frac{\partial\Pi_r}{\partial t} \approx -\frac{1}{c}\frac{\partial\wp}{\partial r}. \end{gathered} \tag{12}$$

In the Minkowski space-time, the special theory of relativity is valid, so that the potentials and the field strengths can be calculated exactly. For the case of the relativistic uniform model, the field strengths, which are part of the field tensors' components inside a spherical body, in the static case have the following form [22]:

$$
\begin{aligned}
c\Phi_{01} &= -\frac{Gc^2\gamma_c}{\eta r^2}\left[\frac{c}{\sqrt{4\pi\eta\rho_0}}\sin\left(\frac{r}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right)-r\cos\left(\frac{r}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right)\right]\approx-\frac{4\pi G\rho_0\gamma_c r}{3},\\
cF_{01} &= \frac{\rho_{0q}c^2\gamma_c}{4\pi\varepsilon_0\rho_0\eta r^2}\left[\frac{c}{\sqrt{4\pi\eta\rho_0}}\sin\left(\frac{r}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right)-r\cos\left(\frac{r}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right)\right]\approx\frac{\rho_{0q}\gamma_c r}{3\varepsilon_0},\\
cu_{01} &= \frac{c^2\gamma_c}{r^2}\left[\frac{c}{\sqrt{4\pi\eta\rho_0}}\sin\left(\frac{r}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right)-r\cos\left(\frac{r}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right)\right]\approx\frac{4\pi\eta\rho_0\gamma_c r}{3},\\
cf_{01} &= \frac{\sigma c^2\gamma_c}{\eta r^2}\left[\frac{c}{\sqrt{4\pi\eta\rho_0}}\sin\left(\frac{r}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right)-r\cos\left(\frac{r}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right)\right]\approx\frac{4\pi\sigma\rho_0\gamma_c r}{3}.
\end{aligned}
\tag{13}
$$

In Eqs. (13) γ_c is the Lorentz factor of the typical particles that are moving at the center of the body; ρ_0 and ρ_{0q} denote the invariant mass and charge densities of the typical particles, respectively.

These mass and charge densities are obtained in the reference frames, which are comoving with the particles. It follows from Eqs. (10) – (13) that the field tensors inside the body are proportional to each other:

$$
-\frac{\Phi_{\mu\lambda}}{G}=\frac{4\pi\varepsilon_0\rho_0 F_{\mu\lambda}}{\rho_{0q}}=\frac{u_{\mu\lambda}}{\eta}=\frac{f_{\mu\lambda}}{\sigma}. \tag{14}
$$

Let us sum up all the stress-energy tensors in formulas (9) and use Eq. (14):

$$
\begin{aligned}
&U_\alpha^\beta+W_\alpha^\beta+B_\alpha^\beta+P_\alpha^\beta=\\
&=\frac{c^2}{4\pi\eta^2}\left(-G+\frac{\rho_{0q}^2}{4\pi\varepsilon_0\rho_0^2}+\eta+\sigma\right)g^{\mu\kappa}\left(-\delta_\alpha^\lambda g^{\sigma\beta}+\frac{1}{4}\delta_\alpha^\beta g^{\sigma\lambda}\right)u_{\mu\lambda}u_{\kappa\sigma}.
\end{aligned}
\tag{15}
$$

As was found in Ref. [23] from the equation of the particles' motion and in Ref. [24] from the generalized Poynting theorem, the following condition holds for the sum of the field coefficients inside the body:

$$
-G+\frac{\rho_{0q}^2}{4\pi\varepsilon_0\rho_0^2}+\eta+\sigma=0. \tag{16}
$$

Substituting condition (16) into Eq. (15) we find out that the sum of the stress-energy tensors inside the body, which is in equilibrium, becomes equal to zero:

$$
U_\alpha^\beta+W_\alpha^\beta+B_\alpha^\beta+P_\alpha^\beta=0. \tag{17}
$$

Relation (17) was also derived in Ref. [24]. Will the result of Eq. (17) change if we consider the situation in the curved space-time? In the physical system in the form of a spherical body, the space-time metric is static and depends only on the radial coordinate. Since the vector field potentials are assumed to be zero, the tensor of each field contains only two nonzero components, which are equal in the absolute value. Taking into account the metric of the curved space-time leads to the fact that the tensors' components of each field in Eq. (13) must be multiplied by the same function Z that depends on the metric tensor components. Just as the metric tensor components, this function will depend

only on the radial coordinate. In the flat Minkowski space-time this function must be equal to unity, $Z = 1$, so that Eq. (13) is satisfied, which does not contain Z function.

Indeed, the equations for calculating the tensors of all the vector fields coincide with each other in their form, according to Refs. [13, 18, 25], and hence, the field tensors can differ from each other only by the constant coefficients at constant mass density ρ_0 and charge density ρ_{0q}. Therefore, if we multiply the tensor of each field, found in the Minkowski space-time, by the same function Z, in order to find this tensor in the curved space-time, relation (14) would not change, and an additional factor would appear on the right-hand side of Eq. (15). Since condition (16) always holds true, then, in the system under consideration, the sum of the stress-energy tensors in Eqs. (15) and (17) will also be zero in the curved space-time.

Calculation of the metric inside the body

Eq. (1) for the metric, in view of Eq. (17), is significantly simplified:

$$R_\alpha^\beta - \frac{1}{4} R \delta_\alpha^\beta = 0.$$

Substituting here (7) and (8), we get three equations:

$$\frac{B''}{2BK} - \frac{B'^2}{4B^2K} - \frac{B'K'}{4BK^2} + \frac{B'E'}{2BKE} - \frac{E''}{KE} + \frac{E'^2}{4KE^2} + \frac{K'E'}{2K^2E} + \frac{1}{E} = 0, \tag{18}$$

$$\frac{B''}{2BK} - \frac{B'^2}{4B^2K} - \frac{B'K'}{4BK^2} - \frac{B'E'}{2BKE} + \frac{E''}{KE} - \frac{3E'^2}{4KE^2} - \frac{K'E'}{2K^2E} + \frac{1}{E} = 0, \tag{19}$$

$$\frac{B''}{2BK} - \frac{B'^2}{4B^2K} - \frac{B'K'}{4BK^2} - \frac{E'^2}{4KE^2} + \frac{1}{E} = 0. \tag{20}$$

Substituting Eq. (20) in Eqs. (18) and (19) gives the same equation:

$$\frac{E''}{KE} - \frac{E'^2}{2KE^2} - \frac{B'E'}{2BKE} - \frac{K'E'}{2K^2E} = 0, \text{ or } \frac{E''}{E'} - \frac{E'}{2E} - \frac{B'}{2B} - \frac{K'}{2K} = 0. \tag{21}$$

If we subtract Eq. (18) from (19), we will get Eq. (21) again. The latter can be easily integrated, because each term represents the derivative of the natural logarithm of the corresponding function:

$$E' = C_1 \sqrt{BKE}, \tag{22}$$

where C_1 is a certain constant.

We will now use the condition obtained in Ref. [16], according to which the scalar curvature inside the body must be a constant value $\overline{R} = C_2$. With the help of the scalar curvature (8) we obtain an expression:

$$\frac{B''}{BK} - \frac{B'^2}{2B^2K} - \frac{B'K'}{2BK^2} + \frac{B'E'}{BKE} + \frac{2E''}{KE} - \frac{E'^2}{2KE^2} - \frac{K'E'}{K^2E} - \frac{2}{E} = C_2. \tag{23}$$

The sum of Eqs. (23) and (18) gives the following one:

$$\frac{B''}{BK}-\frac{B'^2}{2B^2K}-\frac{B'K'}{2BK^2}+\frac{B'E'}{BKE}=\frac{C_2}{2}.$$

Comparing this expression with Eq. (20), we obtain:

$$\frac{E'^2}{4KE^2}-\frac{1}{E}+\frac{B'E'}{2BKE}=\frac{C_2}{4}.$$

Next, we will substitute here the value of $K=\frac{E'^2}{C_1^2BE}$ according to Eq. (22):

$$\frac{E'}{E}=\frac{2C_1^2B'}{4+C_2E-C_1^2B}. \tag{24}$$

Now we need K from Eq. (22) and the relation $\frac{K'}{K}$ from Eq. (21):

$$K=\frac{E'^2}{C_1^2BE},\ \frac{K'}{K}=\frac{2E''}{E'}-\frac{B'}{B}-\frac{E'}{E}. \tag{25}$$

Let us substitute expressions (25) into Eq. (20):

$$B''-\frac{B'E''}{E'}+\frac{B'E'}{2E}-\frac{BE'^2}{2E^2}+\frac{2E'^2}{C_1^2E^2}=0. \tag{26}$$

Eqs. (24) and (26) together form a system of two differential equations in the functions B and E. Direct substitution shows us that the system of these equations has the following solution:

$$E=r^2,\ B=\frac{C_3}{r}+\frac{4}{C_1^2}+\frac{C_2r^2}{3C_1^2}.$$

Indeed, in the weak gravitational field, when the curved space-time turns into the Minkowski one, it should be $E=r^2$, $B=K\approx 1$ in the spherical coordinates.

In order to ensure that the function B is not infinitely large at the center at $r=0$, the constant C_3 must be equal to zero. From the condition $B\approx 1$ it follows that $C_1=2$, and from Eq. (22) we get the equality $BK=1$. In addition, the constant C_2 must be sufficiently small. As a result, for the metric tensor components we can write the following:

$$\begin{gathered}B=g_{00}=1+\frac{C_2r^2}{12},\ E=-g_{22}=r^2,\\ K=-g_{11}=\frac{1}{B}=\frac{1}{1+\frac{C_2r^2}{12}},\ g_{33}=-r^2\sin^2\theta.\end{gathered} \tag{27}$$

The constant C_2 in expressions (27) represents the value of the scalar curvature, averaged over the volume of a typical particle, which is constant inside the body, so that $\overline{R} = C_2$.

In Ref. [16] we found the relation for the value of the cosmological constant $\overline{\Lambda}$ averaged over the volume of a typical particle:

$$-ck\overline{\Lambda} = \frac{G\rho_0}{a}\left[\frac{c^3\gamma_c}{\eta\sqrt{4\pi\eta\rho_0}}\sin\left(\frac{a}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right) - m_g\right] -$$
$$-\frac{\rho_{0q}}{4\pi\varepsilon_0 a}\left[\frac{\rho_{0q}c^3\gamma_c}{\eta\rho_0\sqrt{4\pi\eta\rho_0}}\sin\left(\frac{a}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right) - q_b\right] + \rho_0\wp_c - \frac{\sigma\rho_0 c^2\gamma_c}{\eta}.$$

Expanding the sine by the rule

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{6},$$

in view of Eq. (16), we find:

$$-ck\overline{\Lambda} \approx -\frac{Gm_g\rho_0}{a} - \frac{Gm\rho_0\gamma_c}{2a} + \rho_0 c^2\gamma_c + \frac{q_b\rho_{0q}}{4\pi\varepsilon_0 a} + \frac{q\rho_{0q}\gamma_c}{8\pi\varepsilon_0 a} + \rho_0\wp_c,$$
$$C_2 = \overline{R} = 2\overline{\Lambda} \approx -\frac{2}{ck}\left(\rho_0\psi_a - \frac{Gm\rho_0\gamma_c}{2a} + \rho_0 c^2\gamma_c + \rho_{0q}\varphi_a + \frac{q\rho_{0q}\gamma_c}{8\pi\varepsilon_0 a} + \rho_0\wp_c\right), \tag{28}$$

where k is the factor,

$$k = -\frac{c^3}{16\pi G\beta} \tag{29}$$

(β is a certain constant of the order of unity);

$\psi_a = -\dfrac{Gm_g}{a}$ is the scalar potential of the gravitational field on the surface of the body at $r = a$;

$\varphi_a = \dfrac{q_b}{4\pi\varepsilon_0 a}$ is the scalar potential of the electric field (a is the radius of the body); m_g, q_b are the gravitational mass and the total charge of the body; γ_c is the Lorentz factor of the particles at the center of the body; $\wp_c$ is the potential of the pressure field at the center of the sphere; the mass $m = \dfrac{4\pi a^3\rho_0}{3}$ and the charge $q = \dfrac{4\pi a^3\rho_{0q}}{3}$ are auxiliary quantities.

In the brackets, on the right-hand side of Eq. (28), there is the sum of the volumetric energy densities of the particles in the scalar field potentials: the first and second terms are from the gravitational field, the third one is from the acceleration field, the fourth and fifth terms are from the electric field, and the sixth one is from the pressure field.

The third term is the greatest, it is proportional to the rest energy density of the body. If we take into account only this term, then, in the first approximation, the constant C_2 will be equal to

$$C_2 \approx \frac{32\pi G\rho_0\gamma_c\beta}{c^2}.$$

Comparison of the metric tensor components inside and outside the body

At $r = a$ the current radius reaches the surface of the spherical body, and here the internal metric becomes equal to the external one. It means that we can equate the components of the corresponding metric tensors at $r = a$. According to Ref. [10], the metric tensor components outside the body in the covariant theory of gravitation are equal to

$$g_{00} = 1 + \frac{A_3}{r} + \frac{1}{16\pi ckr^2}\left(Gm_g^2 - \frac{q_b^2}{4\pi\varepsilon_0}\right), \quad g_{22} = -r^2,$$
$$g_{11} = -\frac{1}{1 + \frac{A_3}{r} + \frac{1}{16\pi ckr^2}\left(Gm_g^2 - \frac{q_b^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)}, \quad g_{33} = -r^2\sin^2\theta. \tag{30}$$

Comparison of Eqs. (30) and (27) shows that the components g_{22} and g_{33} coincide both inside and outside the body.

Equating g_{00} in Eqs. (27) and (30) under condition that $r = a$, taking into account Eqs. (28) and (29), we find the constant A_3:

$$A_3 \approx \frac{2G\beta}{c^4}\left[mc^2\gamma_c + \left(m - \frac{1}{2}m_g\right)\psi_a - \frac{Gm^2\gamma_c}{2a} + \left(q - \frac{1}{2}q_b\right)\varphi_a + \frac{q^2\gamma_c}{8\pi\varepsilon_0 a} + m\wp_c\right]. \tag{31}$$

According to Ref. [22], the gravitational mass m_g of the body and the total electric charge q_b are determined as follows:

$$m_g = \int \rho_0\gamma' dV =$$
$$= \frac{c^2\gamma_c}{\eta}\left[\frac{c}{\sqrt{4\pi\eta\rho_0}}\sin\left(\frac{a}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right) - a\cos\left(\frac{a}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right)\right] \approx m\gamma_c\left(1 - \frac{3\eta m}{10ac^2}\right).$$
$$q_b = \int \rho_{0q}\gamma' dV =$$
$$= \frac{\rho_{0q}c^2\gamma_c}{\eta\rho_0}\left[\frac{c}{\sqrt{4\pi\eta\rho_0}}\sin\left(\frac{a}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right) - a\cos\left(\frac{a}{c}\sqrt{4\pi\eta\rho_0}\right)\right] \approx q\gamma_c\left(1 - \frac{3\eta m}{10ac^2}\right). \tag{32}$$

Since $\gamma_c > 0$, it turns out that $m_g > m$ and $q_b > q$.

Now we will substitute Eq. (31) into the expression for g_{00} (see Eq. (30)) and take into account Eq. (29):

$$g_{00} = -\frac{1}{g_{11}} \approx 1 + \frac{2Gm\gamma_c\beta}{c^2 r} +$$
$$+ \frac{2G\beta}{c^4 r}\left[m\psi_a + \frac{1}{2}m_g(\psi - \psi_a) - \frac{Gm^2\gamma_c}{2a} + q\varphi_a + \frac{1}{2}q_b(\varphi - \varphi_a) + \frac{q^2\gamma_c}{8\pi\varepsilon_0 a} + m\wp_c\right]. \tag{33}$$

In this expression $\psi = -\frac{Gm_g}{r}$ and $\varphi = \frac{q_b}{4\pi\varepsilon_0 r}$ denote the scalar potentials of the gravitational and electric fields outside the body, respectively.

We can also determine the quantities γ_c and $\wp_c$ more exactly. In Ref. [21] we found the expression for the square of the particles' velocities v_c^2 at the center of the spherical body; using it we can estimate the value of the Lorentz factor in Eq. (33):

$$\gamma_c = \frac{1}{\sqrt{1-v_c^2/c^2}} \approx 1+\frac{v_c^2}{2c^2}+\frac{3v_c^4}{8c^4} \approx 1+\frac{3\eta m}{10ac^2}\left(1+\frac{9}{2\sqrt{14}}\right)+\frac{27\eta^2 m^2}{200a^2c^4}\left(1+\frac{9}{2\sqrt{14}}\right)^2.$$

According to Ref. [26], the scalar potential of the pressure field at the center of the body is approximately equal to

$$\wp_c \approx \frac{3\sigma m}{10a}\left(1+\frac{9}{2\sqrt{14}}\right),$$

while the acceleration field constant η and the pressure field constant σ are given by the formulas

$$\eta = \frac{3}{5}\left(G-\frac{\rho_{0q}^2}{4\pi\varepsilon_0\rho_0^2}\right),\ \sigma = \frac{2}{5}\left(G-\frac{\rho_{0q}^2}{4\pi\varepsilon_0\rho_0^2}\right).$$

In Eq. (33) we see the complex structure of the metric tensor components, in which additional terms appear as compared to the Minkowski spacetime metric, where in the spherical coordinates

$$g_{00} = -\frac{1}{g_{11}} = 1.$$

The main addition in Eq. (33) is the term

$$\frac{2Gm\gamma_c\beta}{c^2 r},$$

and if we take into account Eq. (32), then this addition will become approximately equal to $-\frac{2\psi\beta}{c^2}$.

The second important addition includes square brackets in Eq. (33), which, by the order of magnitude, determines the energy of the gravitational and electric fields, as well as the pressure one. In these brackets, we can also use the approximate relation of the masses in expression (32). For the metric tensor components outside the body all this leads to the following expression:

$$g_{00} = -\frac{1}{g_{11}} \approx 1-\frac{2\psi\beta}{c^2}+\frac{2G\beta}{c^4 r}\left(m\psi_a+\frac{1}{2}m_g\psi+\frac{3\eta m^2\gamma_c}{10a}+q\varphi_a+\frac{1}{2}q_b\varphi+m\wp_c\right). \quad (34)$$

On the right-hand side of Eq. (34), in the round brackets, there are quantities with the dimension of energy. For large cosmic bodies, the main quantity here is the negative energy associated with gravitation. In this case we can see that the third term, containing c^4 in the denominator, is distinguished by a sign from the second term, containing c^2 in the denominator.

Comparison with the metric of the general theory of relativity

In order to compare with the metric tensor components (30) and (34), we will consider the Reissner – Nordström metric in the spherical coordinates, which describes the static gravitational field around a charged spherical body in the general theory of relativity. We will use our notation for the field potentials:

$$g_{00} = 1 + \frac{2\psi}{c^2} + \frac{Gq_b\varphi}{c^4 r},\ g_{11} = -\frac{1}{1 + \frac{2\psi}{c^2} + \frac{Gq_b\varphi}{c^4 r}},\ g_{22} = -r^2,\ g_{33} = -r^2 \sin^2\theta. \tag{35}$$

As we can see, the second and third terms in the component g_{00} in the Reissner – Nordström metric (35) differ significantly from the corresponding terms in the component g_{00} in the CTG metric (34) outside the body. For example, we can see that the metric in Eq. (35) does not reflect the energy of the pressure field inside the body in any way, whereas in Eq. (34) the energy $m\wp_c$ is associated with the pressure field and makes its contribution to the metric. Taking into account Eq. (28), the energy $m\wp_c$ also defines the metric (27) inside the body.

This difference in the form of the metric is due to the difference in the equations for determining the metric in both theories. While Eq. (1) is used in CTG, the equation for the metric with the cosmological constant Λ in the general theory of relativity has the following form in the matter with the stress-energy tensor T_α^β :

$$R_\alpha^\beta - \frac{1}{2} R\,\delta_\alpha^\beta + \Lambda\,\delta_\alpha^\beta = \frac{8\pi G}{c^4} T_\alpha^\beta. \tag{36}$$

According to the approach of the general theory of relativity, the action of gravitation must be described by the metric tensor, and therefore T_α^β does not include the stress-energy tensor of the gravitational field. There is no matter and no pressure field outside the charged body; only the electromagnetic field is left on the right-hand side of Eq. (36), so that we have $T_\alpha^\beta = W_\alpha^\beta$. As a rule, the term with the cosmological constant Λ in Eq. (36) is neglected due to its smallness, and then the solution for the metric (35) is obtained.

Since the cosmological constant is taken into account in CTG fully, it turns out that the solution of Eq. (27) in view of (28) for the CTG metric inside the body and the solution of Eq. (33) outside the body are more precise and informative than the solution of Eq. (35) in the Reissner – Nordström metric. Moreover, in CTG, the cosmological constant $\overline{\Lambda}$ is not equal to zero and is proportional to the potentials of all the fields acting inside the body. If in Eq. (28) only the main term with rest energy density is taken into account, then with the relation (29) we can estimate the value $\overline{\Lambda}$:

$$\overline{\Lambda} \approx -\frac{\rho_0 c\gamma_c}{k} \approx \frac{16\pi G\rho_0\beta\gamma_c}{c^2}. \tag{37}$$

If we substitute here the average mass density of the cosmic space matter of the observable universe, we shall obtain the value $\overline{\Lambda} \approx 10^{-52}$ m^{-2}. The smallness of the cosmological constant $\overline{\Lambda}$ inside cosmic bodies is associated with the large factor (29) in Eq. (37). To this end we recall that the issue of the cosmological constant in the general theory of relativity has not yet been resolved unambiguously [27], especially with respect to correlation with vacuum energy. Here it is implied that a very large vacuum energy makes little contribution to the metric for some reason and to the small cosmological constant.

In CTG, the greater is the mass density in Eq. (37), the larger is Λ inside the body. However if we distribute the matter of all cosmic bodies over the space, then the mass density will be very low, which leads to insignificantly small value $\overline{\Lambda} \approx 10^{-52}$ m^{-2}. We should also pay attention to the fact that the cosmological constant outside the body is assumed to be zero due to its gauging in CTG [16]. Inside the bodies, as well as inside the observable universe as some global body, $\overline{\Lambda}$ has a certain value. In the approximation of the relativistic uniform body model, $\overline{\Lambda}$ is determined in Eq. (28).

In contrast, in the general theory of relativity, in Eq. (36), the nonzero value of the cosmological constant outside the body is admitted. The latter follows from the possibility of influence of the zero vacuum's energy on the metric through the cosmological constant.

Summary

In Section 3 we have shown that the sum of the stress-energy tensors of all the four fields inside the body is zero. With this in mind, the metric tensor components were calculated as functions of the current radius in Eq. (27). As a result, on the surface of the body at $r = a$ it became possible to compare the metric inside and outside the body and to determine the unknown coefficient A_3 in the external metric (30).

The metric tensor components g_{00} and g_{11} outside the fixed spherical body in the covariant theory of gravitation (CTG), that were presented in Eq. (30), were specified by us in Eqs. (33) and (34). It turns out that these components are the functions of the scalar potentials of all the fields, so that, for example, the pressure field inside the body also influences the metric outside the body. However, the main contribution to the metric is made by the scalar potential of the gravitational field $\psi = -\frac{Gm_g}{r}$. Apparently this is due to the fact that the expression for the scalar potential ψ includes the gravitational mass m_g that characterizes the source of the field and the gravitation force. At the same time the relativistic energy is proportional to the inertial mass M, while for an external observer the mass M is the rest mass and characterizes the system with respect to the forces acting on it. Both of these masses differ from each other by the mass-energy of the particles' binding by means of the fields [26]. As for the electromagnetic field, its contribution is secondary. The body's charge is only indirectly included in the rest mass of the body and is not directly included in the gravitational mass. The electric field potentials vanish in neutral bodies in Eq. (34). Thus, the gravitational field is the main factor that distinguishes the curved space-time metric from the Minkowski flat one.

Our calculations allowed us to calculate the metric CTG inside the body and to refine the metric outside the body, but there was one more unknown adjustable coefficient β in the metric tensor components. Its appearance can be due to the assumption that the coefficient (29) has an exact value, so that the coefficient β is intended to ensure the correct value of the metric. The value of the coefficient β can be determined in the gravitational experiments, in which the space-time metric should be taken into account.

REFERENCES

1. **Sharif M., Fatima T.,** Energy-momentum distribution: a crucial problem in general relativity, Intern. J. Mod. Phys. A. 20 (18) (2005) 4309.

2. **Cooperstock F.I., Sarracino R.S.,** The localization of energy in general relativity, J. Phys. A. 11 (5) (1975) 877.

3. **Rüster S.B.,** The fundamental conservation law in the theory of general relativity: an unconventional approach is feasible and correct? Parana J. Sci. Educ. 6 (9) (2020) 1–11.

4. **Denisov V.I., Logunov A.A.,** The inertial mass defined in the general theory of relativity has no physical meaning, Theor. Math. Phys. 51 (2) (1982) 421–426.

5. **Khrapko R.I.,** The truth about the energy-momentum tensor and pseudotensor, Gravit. Cosmol. 20 (4) (2014) 264–273.

6. **Dirac P.A.M.,** General theory of relativity, A Wiley-Interscience Publication, O.H.N. Wiley & Sons, New York, London, Sydney, 1975.

7. **Dale R., Sáez D.,** Testing vector-tensor gravity with current cosmological observations, J. Phys. Conf. Ser. 600 (1) (2015) 012044.

8. **Momeni D., Faizal M., Myrzakulov K., Myrzakulov R.,** Compact stars in vector–tensor-Horndeski theory of gravity, Eur. Phys. J. C. 77 (1) (2017) 77.

9. **Heisenberg L., Bartelmann M.,** Kinetic field theory applied to vector-tensor gravity, Phys. Lett. B. 796 (10 Sept.) (2019) 59–64.

10. **Fedosin S.G.,** The metric outside a fixed charged body in the covariant theory of gravitation, Int. Front. Sci. Lett. 1 (1) (2014) 41–46.

11. **Fedosin S.G.,** The pioneer anomaly in covariant theory of gravitation, Canad. J. Phys. 93 (11) (2015) 1335–1342.

12. **Fedosin S.G.,** The physical theories and infinite hierarchical nesting of matter, Vol. 2, LAP LAMBERT Academic Publishing, Republic of Moldova, 2015.

13. **Fedosin S.G.,** The procedure of finding the stress-energy tensor and vector field equations of any form, Adv. Studies Theor. Phys. 8 (18) (2014) 771–779.

14. **Fedosin S.G.,** About the cosmological constant, acceleration field, pressure field and energy, Jordan J. Physics. 9 (1) (2016) 1–30.

15. **Fedosin S.G.,** Four-dimensional equation of motion for viscous compressible and charged fluid with regard to the acceleration field, pressure field and dissipation field, Int. J. Thermodynamics. 18 (1) (2015) 13–24.

16. **Fedosin S.G.,** Energy and metric gauging in the covariant theory of gravitation, Aksaray Univ. J. Sci. Eng. 2 (2) (2018) 127–143.

17. **Fedosin S.G.,** Fizika i filosofiia podobiia ot preonov do metagalaktik [Similarity physics and philosophy from prequarks up to metagalaxies], Stil-MG Publishing, Perm, 1999 (in Russian).

18. **Fedosin S.G.,** The principle of least action in covariant theory of gravitation, Hadronic J. 35 (1) (2012) 35–70.

19. **Fedosin S.G.,** The concept of the general force vector field, OALib J. 3 (3) (2016) e2459, 1–15.

20. **Fedosin S.G.,** Two components of the macroscopic general field, Rep. Adv. Phys. Sci. 1 (2) (2017) 1750002.

21. **Fedosin S.G.,** The virial theorem and the kinetic energy of particles of a macroscopic system in the general field concept, Continuum Mech. Thermodyn. 29 (2) (2016) 361–371.

22. **Fedosin S.G.,** Relativistic energy and mass in the weak field limit, Jordan J. Phys. 8 (1) (2015) 1–16.

23. **Fedosin S.G.,** Estimation of the physical parameters of planets and stars in the gravitational equilibrium model, Canad. J. Phys. 94 (4) (2016) 370–379.

24. **Fedosin S.G.,** The generalized Poynting theorem for the general field and solution of the 4/3 problem, Int. Front. Sci. Lett. 14 (2019) 19–40.

25. **Fedosin S.G.,** Fizicheskie teorii i beskonechnaia vlozhennost' materii [Physical theories and infinite matter nesting], Sergey Fedosin Publishing, Perm, 2009 (in Russian).

26. **Fedosin S.G.,** The binding energy and the total energy of a macroscopic body in the relativistic uniform model, Middle East J. Sci. 5 (1) (2019) 46–62.

27. **Martin J.,** Everything you always wanted to know about the cosmological constant problem (but were afraid to ask), Comptes Rendus Physique. 13 (6–7) (2012) 566–665.

Received 06.03.2021, accepted 22.06.2021.

THE AUTHOR

FEDOSIN Sergey G.
22–27, Architect Sviyazev St., Perm, Perm Territory, 614088, Russian Federation
sergey.fedosin@gmail.com

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Sharif M., Fatima T.** Energy-momentum distribution: a crucial problem in general relativity // International Journal of Modern Physics. A. 2005. Vol. 20. No. 18. P. 4309.

2. **Cooperstock F.I., Sarracino R.S.** The localization of energy in general relativity // Journal of Physics. A. 1978. Vol. 11. No. 5. P. 877.

3. **Rüster S.B.** The fundamental conservation law in the theory of general relativity: an unconventional approach is feasible and correct? // Parana Journal of Science and Education. 2020. Vol. 6. No. 9. Pp. 1–11.

4. **Денисов В.И., Логунов В.А.** Инертная масса, определенная в общей теории относительности, не имеет физического смысла // Теоретическая и математическая физика. 1982. Т. 51. № 2. С. 163–170.

5. **Khrapko R.I.** The truth about the energy-momentum tensor and pseudotensor // Gravitation and Cosmology. 2014. Vol. 20. No. 4. Pp. 264–273.

6. **Дирак П.А.М.** Общая теория относительности. Пер. с англ. Под ред. чл.-кор. АН СССР Д.И. Блохинцева. М.: Атомиздат, 1978. 64 с.

7. **Dale R., Sáez D.** Testing vector-tensor gravity with current cosmological observations // Journal of Physics: Conference Series. 2015. Vol. 600. No. 1. P. 012044.

8. **Momeni D., Faizal M., Myrzakulov K., Myrzakulov R.** Compact stars in vector–tensor-Horndeski theory of gravity // The European Physical Journal. C. 2017. Vol. 77. No. 1. P. 37.

9. **Heisenberg L., Bartelmann M.** Kinetic field theory applied to vector-tensor gravity // Physical Letters B. 2019. Vol. 796. 10 September. Pp. 59–64.

10. **Fedosin S.G.** The metric outside a fixed charged body in the covariant theory of gravitation // International Frontier Science Letters. 2014. Vol. 1. Pp. 41–46.

11. **Fedosin S.G.** The pioneer anomaly in covariant theory of gravitation // Canadian Journal of Physics. 2015. Vol. 93. No. 11. Pp. 1335–1342.

12. **Fedosin S.** The physical theories and infinite hierarchical nesting of matter. Vol. 2. Republic of Moldova: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2015. 420 p.

13. **Fedosin S.G.** The procedure of finding the stress-energy tensor and vector field equations of any form // Advanced Studies in Theoretical Physics. 2014. Vol. 8. No. 18. Pp. 771–779.

14. **Fedosin S.G.** About the cosmological constant, acceleration field, pressure field and energy // Jordan Journal of Physics. 2016. Vol. 9. No. 1. Pp. 1–30.

15. **Fedosin S.G.** Four-dimensional equation of motion for viscous compressible and charged fluid with regard to the acceleration field. Pressure field and dissipation field // International Journal of Thermodynamics. 2015. Vol. 18. No. 1. Pp. 13–24.

16. **Fedosin S.G.** Energy and metric gauging in the covariant theory of gravitation // Aksaray University Journal of Science and Engineering. 2018. Vol. 2. No. 2. Pp. 127–143.

17. **Федосин С.Г.** Физика и философия подобия от преонов до метагалактик. Пермь: Стиль-МГ, 1999. 544 с.

18. **Fedosin S.G.** The principle of least action in covariant theory of gravitation // Hadronic Journal. 2012. Vol. 35. No. 1. Pp. 35–70.

19. **Fedosin S.G.** The concept of the general force vector field // Open Access Library Journal. 2016. Vol. 3. No. 3. P. e2459. Pp. 1–15.

20. **Fedosin S.G.** Two components of the macroscopic general field // Reports in Advances of Physical Sciences. 2017. Vol. 1. No. 2. P. 1750002.

21. **Fedosin S.G.** The virial theorem and the kinetic energy of particles of a macroscopic system in the general field concept // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2016. Vol. 29. No. 2. Pp. 361–371.

22. **Fedosin S.G.** Relativistic energy and mass in the weak field limit // Jordan Journal of Physics. 2015. Vol. 8. No. 1. Pp. 1–16.

23. **Fedosin S.G.** Estimation of the physical parameters of planets and stars in the gravitational equilibrium model // Canadian Journal of Physics. 2016. Vol. 94. No. 4. Pp. 370–379.

24. **Fedosin S.G.** The generalized Poynting theorem for the general field and solution of the 4/3 problem // International Frontier Science Letters. 2019. Vol. 14. Pp. 19–40.

25. **Федосин С.Г.** Физические теории и бесконечная вложенность материи. Пермь: Изд. Сергей Федосин, 2009–2013. 635 с.

26. **Fedosin S.G.** The binding energy and the total energy of a macroscopic body in the relativistic uniform model // Middle East Journal of Science. 2019. Vol. 5. No. 1. Pp. 46–62.

27. **Martin J.** Everything you always wanted to know about the cosmological constant problem (but were afraid to ask) // Comptes Rendus Physique. 2012. Vol. 13. No. 6–7. Pp. 566–665.

Статья поступила в редакцию 06.03.2021, принята к публикации 22.06.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ФЕДОСИН Сергей Григорьевич – *физик-исследователь, г. Пермь, Пермский край, Российская Федерация*.

614088, Российская Федерация, г. Пермь, Пермский край, ул. Архитектора Свиязева, 22, кв. 79.

sergey.fedosin@gmail.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2021

Научное издание

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS»
ТОМ 14, № 3, 2021

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В.К. Иванов* – председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А.Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии
канд. физ.-мат. наук, доцент *В.М. Капралова*
канд. физ.-мат. наук *О.А. Ящуржинская* – научный редактор, корректор
А.С. Колгатина – переводчик
Н.А. Бушманова – ответственный секретарь

Телефон редакции 294-22-85

Сайт http://ntv.spbstu.ru

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *А.А. Кононовой*

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Адрес университета: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
Физико-математические науки»

1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 года журнал издавался в составе сериального издания "Научно-технические ведомости СПбГПУ". **Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», журнал издавали под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354 (сериальный) 2304-9782.** В 2012 году он зарегистрирован как самостоятельное периодическое издание **ISSN 2304-9782** (Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.). С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика**, включая следующие шифры научных специальностей: 01.02.04, 01.02.05, 01.04.01, 01.04.02, 01.04.03, 01.04.04, 01.04.05, 01.04.06, 01.04.07, 01.04.10, 01.04.15, 01.04.21.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базах данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), Web of Science (Emerging Sources Citation Index).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

В списки литературы **рекомендуется** включать ссылки на научные статьи, монографии, сборники статей, сборники конференций, электронные ресурсы с указанием даты обращения, патенты.

Как правило, **нежелательны** ссылки на диссертации и авторефераты диссертаций (такие ссылки допускаются, если результаты исследований еще не опубликованы, или не представлены достаточно подробно).

В списки литературы **не рекомендуется** включать ссылки на учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, ГОСТы и др. нормативные документы, на законы и постановления, а также на архивные документы (если все же необходимо указать такие источники, то они оформляются в виде сносок).

Рекомендуемый объем списка литературы для обзорных статей – не менее 50 источников, для остальных статей – не менее 10.

Доля источников давностью менее 5 лет должна составлять не менее половины. Допустимый процент самоцитирования – не выше 10 – 20. Объем ссылок на зарубежные источники должен быть не менее 20%.

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор **текста** осуществляется в редакторе **MS Word**.

6. **Формулы** набираются в редакторе MathType (не во встроенном редакторе Word) (мелкие формулы, символы и обозначения набираются без использования редактора формул). **Таблицы** набираются в том же формате, что и основной текст. В тексте буква «ё» заменяется на букву «е» и оставляется только в фамилиях.

7. **Рисунки** (в формате .tiff, .bmp, .jpeg) и **таблицы** оформляются в виде отдельных файлов. Рисунки представляются только в черно-белом варианте. Шрифт – **Times New Roman**, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (http://journals.spbstu.ru). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться ДОСРОЧНО.

Более подробную информацию можно получить по телефону редакции:
(812) 294-22-85 с 10.00 до 18.00 – Бушманова Наталья Александровна
или по e-mail: physics@spbstu.ru