МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

ТОМ 10, № 3

2017

Издательство Политехнического университета
Санкт-Петербург
2017

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

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Алферов Ж.И., академик РАН – председатель;
Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;
Варшалович Д.А., академик РАН;
Глухих В.А., академик РАН;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
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;
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;
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.

Журнал с 1995 года издается под научно-методическим руководством Российской академии наук.

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 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, 2017

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE RUSSIAN FEDERATION

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

Physics and Mathematics

VOLUME 10, No. 3
2017

Polytechnical University Publishing House
Saint Petersburg
2017

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

Zh.I. Alferov – full member of RAS, head of the editorial council;
A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;
V.A. Glukhikh – full member of RAS;
D.A. Indeitsev – corresponding member of RAS;
V.K. Ivanov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.;
A.I. Rudskoy – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
R.A. Suris – full member of RAS;
D.A. Varshalovich – full member of RAS;
A.E. Zhukov – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – editor-in-chief;
A.E. Fotiadi – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – deputy editor-in-chief;
V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sc., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;
V.I. Antonov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
I.B. Bezprozvanny – Dr. Sc. (Biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;
A.V. Blinov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
D.V. Donetski – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;
D.A. Firsov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.S. Kheifets – Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia.
J.B. Malherbe – Dr. Sc. (Physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;
V.M. Ostryakov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
V.E. Privalov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.V. Solov'yov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;
A.K. Tagantsev – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;
I.N. Toptygin – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
E.A. Tropp – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

The journal is published under the scientific and methodical guidance of RAS since 1995.

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 Russian Science Citation Index (RSCI) database.

© 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, 2017

Содержание

Физика конденсированного состояния

Ильинский А.В., Пашкевич М.Э., Шадрин Е.Б. *Поэтапное моделирование механизма фазового перехода полупроводник – металл в диоксиде ванадия* 9

Алексеева О.А., Набережнов А.А., Стукова Е.В., Симкин В.Г. *Стабилизация сегнетоэлектрической фазы нитрата калия в его сегнетоэлектрических композитах с титанатом бария* 18

Математическое моделирование физических процессов

Ряховский А.И., Антонов В.И., Калинин Н.В. *Влияние выбора уравнений состояния на результаты численного моделирования подводного электрического взрыва проводников* 26

Кислицына И.А., Малыхина Г.Ф. *Моделирование системы измерения параметров движения спускаемого аппарата в условиях неопределенности состава лунной поверхности* 38

Пожилов А.А., Зайцев Д.К., Смирнов Е.М., Смирновский А.А. *Численное моделирование тепломассопереноса в трехмерной модели испарителя контурной тепловой трубы* 52

Физическое материаловедение

Джайсвал С.Р., Савала Н.С., Копаркар К.А., Нагуре П.А., Бхаткар В.Б., Оманвар С.К. *Эффект даун-конверсии в люминофорах зеленого свечения $BaF_2 : Gd^{3+}, Tb^{3+}$ – перспектива использования в безртутных флуоресцентных лампах (статья на английском языке)*..... 64

Теоретическая физика

Ларионов Н.В. *Формирование угловой зависимости интенсивности света, рассеянного на оптически плотном атомном ансамбле* 75

Математика

Аниконов Д.С., Киприянов Я.А., Коновалова Д.С. *Обратная задача для уравнения колебаний мембраны* 84

Смирнов П.О., Широков И.С., Шевляков Г.Л. *Высокоэффективные робастные M-оценки параметра масштаба на базе Q-оценки* 95

Паранд К., Делхош М. *Операционные матрицы для решения нелинейных дифференциальных уравнений Риккати произвольного порядка (статья на английском языке)* 100

Механика

Серёгин С.В. *Особенности расщепления частотного спектра волнового твердотельного гироскопа на примере изолированного несовершенного кольца* 116

Колесник Е.В., Смирнов Е.М. *Тестирование различных схем с квазиодномерной реконструкцией газодинамических переменных при расчетах на неструктурированных сетках* 123

Астрофизика

Овчинникова Е.П., Чариков Ю.Е., Шабалин А.Н., Васильев Г.И. *Вклад альбедо фотонов в интенсивность жесткого рентгеновского излучения солнечных вспышек* 140

Савченко М.И., Ватагин П.В., Лазутков В.П., Скородумов Д.В., Кудрявцев И.В., Чариков Ю.Е. *Диагностика плазмы двух солнечных вспышек на основе результатов регистрации мягкого рентгеновского излучения* 152

Авторский указатель 161

Contents

Condensed matter physics

Il'inskiy A.V., Pashkevich M.E., Shadrin E.B. *Stage-by-stage modeling of the mechanism of semiconductor – metal phase transition in vanadium dioxide* 9

Alekseeva O.A., Naberezhnov A.A., Stukova E.V., Simkin V.G. *Stabilization of the NOP ferroelectric phase in the potasium nitrate – barium titanate ferroelectric composites* 18

Simulation of physical processes

Ryakhovskiy A.I., Antonov V.I., Kalinin N.V. *The EOS choice effect on the simulated results obtained for an underwater electrical explosion of conductors* 26

Kislitsyna I.A., Malykhina G.F. *Simulation of on-the-fly measuring system of a descent module under uncertainty of the lunar-surface composition*..... 38

Pozhilov A.A., Zaitsev D.K., Smirnov E.M., Smirnovsky A.A. *Numerical simulation of heat and mass transfer in a 3D model of a loop heat pipe evaporator* 52

Physical materials technology

Jaiswal S.R., **Sawala N.S.**, **Koparkar K.A.**, **Nagpure P.A.**, **Bhatkar V.B.**, **Omanwar S.K.** *Visible quantum cutting in green emitting BaF_2: Gd^{3+}, Tb^{3+} phosphors: an approach towards mercury-free lamps* 64

Theoretical physics

Larionov N.V. *Formation of the angular dependence of intensity of the light scattered on the optically dense atomic ensemble* 75

Mathematics

Anikonov D.S., Kipriyanov Ya.A., Konovalova D.S. *An inverse problem for the equation of membrane's vibration* 84

Smirnov P.O., Shirokov I.S., Shevlyakov G.L. *Highly-efficient and robust M-estimates of the scale parameter on the Q-estimate basis* 95

Parand K., Delkhosh M. *Operational matrices to solve nonlinear Riccati differential equations of an arbitrary order* 100

Mechanics

Seregin S.V. *The splitting features of a frequency spectrum of a gyroscope based on elastic waves in solids: an isolated imperfect ring as an example* 116

Kolesnik E.V., Smirnov E.M. *Testing of various schemes with quasi-one-dimensional reconstruction of gasdynamic variables in the case of unstructured-grid calculations*..... 123

Astrophysics

Ovchinnikova E.P., Charikov Yu.E., Shabalin A.N., Vasilyev G.I. The contri*bution of the albedo for photons to the intensity of the hard X-ray emission of solar flares* 140

Savchenko M.I., Vatagin P.V., Lazutkov V.P., Skorodumov D.V., Kudryavtsev I.V., Charikov Yu.E. *The two solar flares diagnostics based on the soft X-ray emission recording* 152

Author index..... 161

DOI: 10.18721 /JPM.10301
УДК 537.226.33

ПОЭТАПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПОЛУПРОВОДНИК – МЕТАЛЛ В ДИОКСИДЕ ВАНАДИЯ

А.В. Ильинский[1], М.Э. Пашкевич[2], Е.Б. Шадрин[1]

[1] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;
[2] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Предложен алгоритм поэтапного качественного моделирования механизма фазового перехода полупроводник – металл в диоксиде ванадия. В основе модели лежит утверждение о комплексном характере перехода, состоящего из безгистерезисного, чисто электронного перехода Мотта, происходящего в широком температурном интервале, и скачкообразного по температуре структурного перехода Пайерлса, обладающего термическим гистерезисом. Начальный этап модели базируется на решении квантовомеханической задачи об электронном спектре линейной цепочки ионов ванадия. Модель завершается введением в рассмотрение корреляционных эффектов и мартенситного характера структурного перехода. Поэтапное усложнение модели осуществляется путем учета последовательного вводимых в рассмотрение экспериментальных фактов, полученных рентгеновскими, спектроскопическими, импедансметрическими и магниторезонансными методами.

Ключевые слова: фазовый переход; корреляционная энергия; распределение Мигдала; переход Мотта; переход Пайерлса

Ссылка при цитировании: Ильинский А.В., Пашкевич М.Э., Шадрин Е.Б. Поэтапное моделирование механизма фазового перехода полупроводник – металл в диоксиде ванадия // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 9–17. DOI: 10.18721/JPM.10301

STAGE-BY-STAGE MODELING OF THE MECHANISM OF SEMICONDUCTOR – METAL PHASE TRANSITION IN VANADIUM DIOXIDE

A.V. Il'inskiy[1], M.E. Pashkevich[2], E.B. Shadrin[1]

[1]The Ioffe Institute of the Russian Academy of Science, St. Petersburg, Russian Federation;
[2]Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

The algorithm of stage-by-stage qualitative modeling of the mechanism of a semiconductor – metal phase transition in vanadium dioxide has been proposed. The basis for the model is a statement that the transition is complex in character and consists of the anhysteretic, purely electronic Mott transition occurring over a wide

temperature range, and the temperature-abrupt structural Peierls transition having a thermal hysteresis. The initial stage of the model is based on the solution of a quantum-mechanical problem of an electronic spectrum of a linear vanadium-ion's chain. The model is completed by consideration of correlation effects and a martensitic character of the structural transition through taking consecutively account of results obtained by X-ray, spectroscopic, impedansmetric and magnetoresonance metods.

Key words: phase transition; correlation energy; Migdal distribution; Mott transition; Peierls transition

Citation: A.V. Il'inskiy, M.E. Pashkevich, E.B. Shadrin, Stage-by-stage modeling of the mechanism of semiconductor – metal phase transition in vanadium dioxide, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 9–17. DOI: 10.18721/JPM.10301

Введение

Одной из проблем процесса моделирования является обеспечение поэтапного усложнения создаваемой модели в случае комплексного характера моделируемого физического процесса. В качестве иллюстрации к одному из вариантов решения данной проблемы в настоящей статье предлагается процедура установления соотношения между физическими свойствами нанокристаллических пленок диоксида ванадия и деталями квантовомеханической модели одномерной цепочки водородоподобных атомов, описывающей такие свойства. При этом главная роль в процессе моделирования отводится фазовому переходу (ФП) полупроводник – металл, совершающемуся при значении температуры, равном температуре равновесия полупроводниковой и металлической фаз $T_C = 68$ °C, который происходит в нанокристаллических зернах пленок диоксида ванадия VO_2 [1, 2]. При описании ФП учитывается то обстоятельство, что нанокристаллические зерна пленки VO_2 имеют разные поперечные размеры, причем их численные значения распределены в широком интервале по закону Гаусса. Вследствие этого, зерна отличаются друг от друга и соотношениями вкладов поверхностной и объемной энергии в процесс ФП.

Вышеизложенное убеждает в том, что механизм ФП полупроводник – металл весьма нетривиален для моделирования. Сложность связана с тем, что вблизи температуры T_C совершается не один, а два типа фазовых переходов (ФП): структурный переход Пайерлса и электронный переход Мотта [3, 4]. Это приводит к необходимости усложнить изначальную квантовомеханическую модель посредством учета многочастичного взаимодействия, без которого невозможно корректно объяснить экспериментальные данные. Но, несмотря на это, диоксид ванадия, благодаря простоте его элементарной ячейки, выступает удобным объектом при отработке алгоритма моделирования процесса фазового перехода. Подчеркнем, что в диоксиде ванадия описание механизма ФП основано на квантовомеханических свойствах одномерной цепочки водородоподобных атомов.

Поэтапное моделирование механизма ФП

Первый этап. Элементарная ячейка кристаллической решетки диоксида ванадия в тетрагональной фазе содержит в себе два катиона ванадия V^{4+} и четыре аниона кислорода O^{2-} [1]. Начальная стадия алгоритма моделирования сводится к фиксации свойств элементарной ячейки VO_2 на базе теории валентных связей [5], согласно которой в элементарной ячейке этого соединения каждый атом ванадия в результате $3d^2 4s^1 4p^3$-гибридизации своих орбиталей образует шесть сигма-связей с шестью атомами кислорода, фиксированными в вершинах кислородного октаэдра. Атом ванадия расположен, согласно рентгеновским данным [1], в центре октаэдра. Каждый атом кислорода имеет три sp^2-гибридные орбитали и создает три сигма-связи с атомами ванадия, расположенными в трех элементарных ячейках, соседних с каждым октаэдром.

Остальные три $3d$-орбитали (d_{xz}, d_{yz} и d_{x2-y2}) иона ванадия с одним электроном на них (рис. 1, *а*) не участвуют в процессе образования каркаса σ-связей октаэдра. При этом две орбитали, а именно d_{xz} и d_{yz}, образуют насыщенные π-связи с $2p_z$-орбиталями

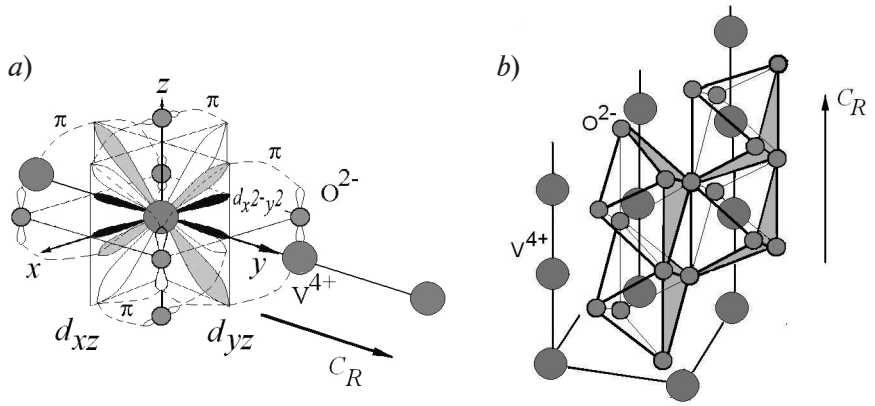


Рис. 1. Геометрия атомов элементарной ячейки (*a*) и структура кристаллической решетки VO_2 (*b*). Показаны ориентации *d*-орбиталей иона V^{4+} в кислородном октаэдре (*a*); C_R – тетрагональная ось

ионов кислорода (лигандов), которые расположены в вершинах октаэдра,. Эти связи формируют, согласно теории молекулярных орбиталей, π и π*-зоны с малым (1 – 2 эВ) энергетическим зазором между ними. Третья, d_{x2-y2}-орбиталь, имеет нулевое перекрытие со всеми орбиталями лигандов и аннексирует последний электрон, оставшийся на *d*-орбиталях.

Расположение кислородных октаэдров в кристаллической решетке VO_2 таково, что тетрагональная фаза формирует одномерные цепочки ионов ванадия, параллельные тетрагональной оси C_R (как уже указывалось, ионы фиксированы в центрах кислородных октаэдров). Наличие линейных цепочек ионов ванадия далее послужит основой предлагаемого процесса моделирования. На рис. 1, *b* представлена кристаллическая решетка диоксида ванадия.

Из приведенного описания элементарной ячейки следует, что содержащая один электрон d_{x2-y2}-орбиталь каждого иона ванадия, имея ветви, расположенные в плоскости *xy* октаэдра вдоль осей O*x* и O*y* (см. рис. 1, *a*), способна перекрываться лишь с аналогичной орбиталью ионов V^{4+}, соседних по цепочке октаэдров; в принципе эта орбиталь могла бы образовывать вдоль оси C_R одномерные цепочки прочных сигма-связей. Но этому препятствует взаимное расположение атомов ванадия: каждый из них находится в центре октаэдра и равноудален от своих соседей по цепочке. Поэтому, не имея предпочтения в образовании сигма-связи с каким-либо из соседей, атом ванадия должен был бы образовывать две сигма-связи с двумя ближайшими соседями по цепочке. Однако такая ситуация запрещена общими правилами квантовой механики. Поэтому в полностью стационарном случае, т. е. при температуре абсолютного нуля (0 **K), каждый атом ванадия неподвижно** фиксирован (без учета нулевых колебаний) в начале координат плоскости *xy* кислородного октаэдра без образования орбиталью d_{x2-y2} сигма-связей с ближайшими соседями.

Таким образом, для диоксида ванадия имеет место тот уникальный случай, при котором одномерная цепочка водородоподобных атомов, содержащих каждый по одному электрону на внешней орбитали, стабилизирована в пространстве за счет других орбиталей того же атома.

Второй этап. Данный этап процесса моделирования механизма ФП полупроводник – металл в диоксиде ванадия базируется на утверждении, согласно которому единственный электрон расположен в рассматриваемой структуре не на сферически симметричной *s*-орбитали, подобно атому водорода, а на d_{x2-y2}-орбитали, имеющей крестообразные ветви. Вследствие этого в одномерной цепочке атомов ванадия с единственным электроном на указанной орбитали возникает связь металлического типа вдоль оси C_R.

Таким образом, на втором этапе моделирования каждый нанокристаллит пленки VO_2 при низких температурах представляет собой металлическое зерно. Напомним, что зерна имеют размеры, численные значения которых распределены по закону Гаусса. Они остаются металлическими при любой температуре и не могут совершать фазовые переходы. Из этого следует, что на начальных этапах моделирования кристаллическую структуру диоксида ванадия можно представить описанным выше образом.

Третий этап. Одномерная цепочка катионов ванадия не может совершать каких-либо ФП, но способна совершать фононные колебания. В такой модели свойства нанокристаллитов диоксида ванадия вблизи уровня Ферми можно описать с позиций квантовой механики с помощью модели жесткой квазиодномерной цепочки атомов, имеющих по одному электрону на внешней электронной оболочке.

Уравнение Шредингера для такой цепочки с гамильтонианом, учитывающим взаимодействие лишь с ближайшими соседями, допускает точное решение [4] и имеет следующий вид:

$$[d^2\Psi(x) / dx^2] + (2m / \hbar^2)[E - V(x)]\Psi(x) = 0,$$

где $V(x)$ – потенциальная энергия, равная сумме потенциальных энергий электронов отдельных ионов.

Если отыскивать $\Psi(x)$ в виде разложения по системе волновых функций основного состояния изолированного атома, то теория приведет к системе уравнений для коэффициентов этого разложения. Квадраты модулей этих коэффициентов, согласно общему правилу квантовой механики, равны вероятностям нахождения электрона в соответствующих состояниях. Найденная волновая функция электрона в цепочке имеет вид плоской волны, амплитуда которой модулирована с периодом цепочки:

$$\Psi(x) = U(x)\exp(ikx),$$

где k – волновое число, а функция $U(x)$ периодична с периодом цепочки, т. е.

$$U(x) = U(x + nd)$$

(d – период цепочки, а значение n меняется от 1 до N (N – число атомов цепочки)).

Выражение для энергии электрона, получаемое из этих выкладок, имеет вид

$$E = E_0 - \alpha + 2 \mid \beta_i \mid \cos(kd),$$

где E_0 – энергия основного состояния орбитали d_{x2-y2}; α – интеграл перекрытия, равный энергии взаимодействия электрона данного атома с электронами соседей; β_i – интеграл переноса, также имеющий размерность энергии и пропорциональный вероятности перехода электрона к соседнему узлу.

При образовании связанной цепочки атомов трансформация в энергетическую зону одиночного уровня энергии основного состояния изолированного атома ванадия происходит следующим образом: энергия E_0 сначала понижается на величину α, а затем размывается в зону шириной $4\beta_i$. Электроны d-орбиталей занимают низшие состояния и, согласно принципу Паули, заселяют половину из N уровней энергетической зоны. Вторая половина зоны остается свободной подобно тому, как это имеет место в типичном металле, т. е. d_{x2-y2}-орбитали ионов ванадия образуют связи металлического типа, взаимодействуя с соседями по цепочке, аналогично тому, как это происходит в металлах, где каждый атом имеет на внешней орбитали один электрон. Ясно, что в такой схеме металлическая проводимость вдоль одномерной цепочки должна сохраняться при любых температурах.

Однако, как показывает опыт, при температурах меньших, чем $T_C = 68$ °C, диоксид ванадия является полупроводником, а не металлом. Это заставляет усложнить описанную простую модель, отказавшись от идеи жесткой цепочки. Этот отказ соответствует переходу к следующему этапу моделирования процесса фазового перехода в диоксиде ванадия.

Четвертый этап. На данном этапе нами в рассмотрение включаются колебания атомов одномерной цепочки, и тем самым мы отступаем от модели неподвижных атомов. Среди различных типов фононных колебаний важную роль играют полносимметричные, при которых две подсистемы

атомов ванадия, фиксированных попарно через один атом, колеблются как целое навстречу друг другу, оставляя неподвижным центр масс всей системы. Другими словами, в каждом полупериоде колебаний атомы ванадия попарно сближаются друг с другом, создавая образования в виде димеров. Предполагается, что ближайшие соседи одномерной цепочки сближаются так, что внутри димера возможно образование обычной сигма-связи, а между димерами d_{x2-y2}-орбитали настолько отдаляются друг от друга, что их перекрытие стремится к нулю. Тогда модель одномерной цепочки дополняется идеей образования «динамических» сигма-связей, образующихся и разрывающихся в течение одного полупериода фононных колебаний. Для периодического разрыва указанных связей необходимо, чтобы величина энергии фононов была бы больше или равна численному значению энергии сигма-связей. Это возможно лишь при некоторой отличной от нуля температуре T_C, при которой энергия фононов оказывается достаточной для разрыва упомянутых связей. Таким образом, данная идея несет в себе возможность совершения фазового перехода при достижении критической температуры T_C.

Действительно, если при $T < T_C$ энергия фононов недостаточна для разрыва сигма-связей, то соседние атомы ванадия попарно сближаются и фиксируются в таком состоянии, объединяя в сигма-связи свои единственные свободные электроны на *d*-орбиталях и образуя устойчивые пары ионов – димеры. Этим они искажают кристаллическую решетку, понижая ее симметрию от тетрагональной до моноклинной. При этом расстояние между ионами ванадия внутри димера меньше, чем расстояние между парами, поэтому период решетки вдоль цепочки удваивается по сравнению с первоначальным. Вследствие такого структурного перехода, позиционируемого в литературе как переход Пайерлса, в электронном спектре образуется щель. При этом $3d_{\|}$-зона распадается на две подзоны, каждая из которых содержит половину количества уровней исходной $d_{\|}$-зоны. Нижняя подзона оказывается практически заполненной электронами, верхняя – практически пустой (с точностью до термического заброса через щель). По этой причине кристалл VO_2 и становится полупроводником (рис. 2, *b*). Следует отметить, что пайерлсовское искажение решетки устойчиво, так как энергия кристалла при таком искажении понижается.

Эксперимент показывает, что минимальный энергетический зазор между наивысшей по энергии зоной, заполненной электронами (нижняя $d_{\|}$-подзона) и ближайшей к ней пустой зоной, готовой к принятию электронов (π^*-зона), составляет 0,7 эВ. Энергии фононов, близкой к $k_B T$ (k_B – постоянная Больцмана), недостаточно (при температурах вплоть до 500 K) для переброса через такой зазор необходимого количества электронов и разрушения тем самым нужного количества сигма-связей димеров для совершения ФП полупроводник – металл. Поэтому в усложненной (через рассмотрение взаимного положения энергетических зон VO_2) вышеописанной модели этот материал при любых температурах должен оставаться полупроводником. Однако эксперимент показывает, что диоксид ванадия при температурах свыше 68 °C становится металлом. Многочисленные экспериментальные данные (по рентгеноструктурному анализу, ЭПР- и ЯМР-исследованиям, спектроскопии ком-

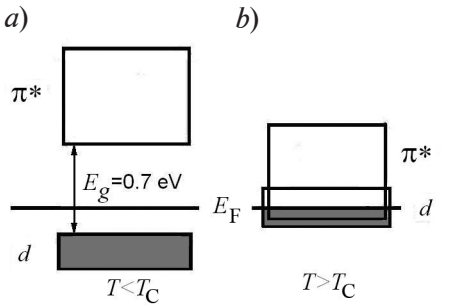


Рис. 2. Схемы энергетических зон (d, π^*) диоксида ванадия, находящегося в различных структурных фазах: низкотемпературной моноклинной полупроводниковой (*a*) и тетрагональной металлической (*b*); фазы определяются температурами ниже (*a*) и выше (*b*) точки равновесия фаз T_C

бинационного рассеяния и др.), подтверждают факт образования димеров. Подтверждается также понижение симметрии решетки от тетрагональной до моноклинной при $T < T_C$ и возврат к металлу тетрагональной симметрии при $T > T_C$. Таким образом, на данном этапе модель нежесткой одномерной цепочки также не может объяснить факт наличия температурного ФП полупроводник – металл при достижении материалом температуры термодинамического равновесия полупроводниковой и металлической фаз $T_C = 68$ °C.

Подчеркнем еще раз, что повышение температуры до критического значения точки равновесия фаз при зазоре 0,7 эВ между заполненной электронами нижней 3*d*-подзоной и пустой π*-зоной не может привести к разрушению того числа сигма-связей димеров, которое необходимо для совершения структурного фазового перехода Пайерлса. Поэтому модель, принятая на четвертом этапе моделирования процесса ФП, требует дальнейшего усложнения.

Пятый этап. На этом этапе моделирования разумно воспользоваться известной идеей Мотта [3], согласно которой для адекватного описания процесса фазового перехода недостаточно рассматривать задачу о поведении электрона в поле одномерной цепочки в рамках одночастичного приближения. Следует учитывать многочастичное взаимодействие, т. е. взаимодействие между самими электронами, находящимися в периодическом поле решетки. Эффекты, обусловленные таким взаимодействием, относят к корреляционным, а вызванную ими поправку к энергии зон – к корреляционной энергии [4].

Строгое аналитическое решение многочастичной задачи, поставленной на этом этапе моделирования, в данное время невозможно. Но численное решение задачи уже было получено, и компьютерные расчеты в рамках (G_0W_0 + COHSEX)-приближения [6] показали, что вблизи уровня Ферми в энергетическом спектре 3*d*-электронов диоксида ванадия образуется энергетическая щель. Принципиально важно то, что, согласно расчетам, ширина щели при учете корреляционных эффектов зависит от степени заполнения разрешенных зон электронами. Конкретно для диоксида ванадия расчеты *ab initio* («из первопринципов») показали, что корреляционные эффекты приводят к опусканию π*-зоны при нагреве образца по мере ее заполнения электронами [6], причем ширина энергетической щели становится равной нулю при $T_C = 68$ °C (341 K). Очевидно, что при этом имеет место положительная обратная связь между шириной щели и заселенностью зон: сужающаяся щель способствует росту темпа термической генерации электронов в π*-зону, которая в свою очередь уменьшает ширину щели за счет корреляционных эффектов. Уменьшение зазора между π*-зоной и нижней 3*d*-подзоной резко облегчает разрушение сигма-связей димеров, эффективно «выкачивая» из них электроны нижней $3d_{\|}$-подзоны. Таким образом, в данной модели электронный переход Мотта инициирует структурный ФП.

Следует обратить внимание на то обстоятельство, что наличие положительной обратной связи, если она велика, как это имеет место в случае VO_2, должно приводить к генерационным эффектам, при которых даже небольшая флуктуация заселенности зон сопровождается схлопыванием щели за счет корреляционных эффектов. Но в реальности этого не происходит ввиду трансформации в таком сильно коррелированном материале, как VO_2, распределения Ферми в распределение Мигдала, что, во-первых, обеспечивает эффективный переход электронов через щель, а во-вторых, исключает лавинообразное схлопывание. Подробнее, распределение Ферми при температуре 341 K давало бы чрезвычайно слабый переход электронов через сравнительно широкую щель шириной 0,7 эВ, тогда как «хвосты» распределения Мигдала как минимум на порядок шире «хвостов» распределения Ферми. В результате обеспечивается эффективный переход электронов через щель.

Причина же указанного расширения «хвостов» состоит в том, что в аналитическом выражении распределения Мигдала в показатель экспоненты входит, помимо энергии Ферми, также и корреляционная

энергия, которая в диоксиде ванадия весьма велика. Таким образом, существование в диоксиде ванадия мигдаловского (вместо фермиевского) распределения электронов по энергиям обеспечивает эффективный переброс электронов через энергетическую щель. При этом такое известное свойство распределения Мигдала, как резкое сужение его «хвостов» при заполнении свободной зоны электронами, играет роль динамической отрицательной обратной связи, блокирующей генерационные эффекты.

Шестой этап. Последний этап процесса моделирования носит оценочный характер в плане перспектив теоретического описания фазового перехода полупроводник – металл в нанокристаллитах диоксида ванадия. Он связан с учетом мартенситного характера указанного ФП. Предполагается введение в многочастичный гамильтониан слагаемого, относящегося к энергии поверхностного натяжения наружных границ нанокристаллитов с учетом их Гауссового распределения по размерам. Гауссов разброс приводит к различию температур структурных ФП в нанокристаллитах из-за влияния внешнего поверхностного давления на число разрушенных димеров. В данном случае, согласно общим принципам квантовой механики, требуется переход к идеологии матрицы плотности при квантомеханическом описании механизма ФП, поскольку отсутствует полный набор данных, необходимых для построения волновой функции. Таким образом, введение в модель ФП полупроводник – металл информации о мартенситном характере структурного ФП в диоксиде ванадия является делом будущего.

Заключение

Следует отметить, что, сделав первый шаг моделирования механизма ФП полупроводник – металл, основанный на использовании простой модели одномерной цепочки атомов, мы заканчиваем это рассмотрение введением понятия корреляционной энергии и идеи зависимости положения энергетических зон от их заселенности. В связи со столь радикальным усложнением модели приведем ряд дополнительных экспериментальных фактов, которые оправдывают необходимость введения корреляционных эффектов в модель исследуемого механизма фазового перехода.

Так например, оказалось, что при гидрировании диоксида ванадия [7] или при создании в его нанокристаллитах кислородных вакансий донорного типа путем облучения пленок VO_2 пучком электронов низкой энергии [8], а также при всестороннем сжатии монокристаллов VO_2 [9], в π^*-зоне создается высокая концентрация электронов. Как следствие роста концентрации, π^*-зона опускается по энергии вплоть до касания ее дном вершины нижней $3d$-подзоны; это обстоятельство служит причиной явления металлизации низкотемпературной моноклинной фазы диоксида ванадия при ее насыщении донорами или под сверхвысоким давлением без перехода в тетрагональную фазу. Другими словами, материал испытывает в этих условиях чисто электронный ФП, не сопровождающийся структурным переходом. Такой ФП проявляется в «металлизации» характеристик материала, однако без повышения симметрии решетки до тетрагональной [10]. Кроме того, эксперимент показал, что чисто электронный переход определяет сверхбыстрый (100 фс) отклик диоксида ванадия на импульсное фотовозбуждение в опытах по пассивной синхронизации мод [7] и в кинетических экспериментах фемтосекундной спектроскопии, обнаруживших фемтосекундное безгистерезисное схлопывание энергетической щели [10 – 12]. Укажем, что структурный ФП протекает в сотни раз медленнее, а именно, за время порядка нескольких пикосекунд [10]. Разница в скорости отклика различных типов переходов (Мотта и Пайерлса) позволяет выделить в чистом виде электронную (моттовскую) составляющую перехода и убеждает в необходимости учета корреляционных эффектов при моделировании.

Таким образом, проведенное поэтапное моделирование механизма фазового перехода полупроводник – металл в диоксиде ванадия указывает на возможность успешного описания комплексных физических процессов, происходящих в этом модельном соединении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Bruckner W., Opperman H., Reichelt W., Terukov E.I., Tschudnovskii F.A.** Vanadiumdioxide. Berlin: Akademie-Verlag, 1983. 252 s.

2. **Бугаев А.А., Захарченя Б.П., Чудновский Ф.А.** Фазовый переход металл – полупроводник и его применение. Ленинград: Наука, 1979. 183 с.

3. **Мотт Н.Ф.** Переходы металл – изолятор. М.: Наука, 1979. 342 с.

4. **Вонсовский С.В., Кацнельсон М.И.** Квантовая физика твердого тела. М.: Наука, 1983. 336 с.

5. **Марел Дж., Кеттл С., Тендер Дж.** Теория валентности. М.: Мир, 1968. 520 с.

6. **Hong Jiang, Gomez-Abal R.I., Rinke P., Scheffler M.** First principles modeling of located *d* states with the GW@LDA+U approach // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82. No. 4. P. 045108.

7. **Ильинский А.В., Ханин С.Д., Шадрин Е.Б.** Электронные процессы при фазовом переходе диэлектрик – металл в гидрированных пленках диоксида ванадия // Известия РГПУ им. А.И. Герцена. 2009. № 11 (79). С. 61 – 76.

8. **Шадрин Е.Б., Ильинский А.В.** О природе фазового перехода металл – полупроводник в диоксиде ванадия // Физика твердого тела. 2000. Т. 42. Вып. 6. С. 1092–1099.

9. **Arcangeletti E., Baldassarre L., Di Castro D., et al.** Evidence of a pressure induced metallization process in monoclinic VO_2 // Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 98. No. 19. P. 196406.

10. **Cavalleri A., Dekorsy Th., Chong H.H., et. al.** Evidence for a structurally-driven insulator-to-metal transition in VO_2: A view from the ultrafast timescale // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70. No. 16. P. 161102(R).

11. **Kübler C., Ehrke H., Huber R., et. al.** Coherent structural dynamics and electronic correlations during an ultrafast insulator-to-metal phase transition in VO_2 // Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 99. No.11. P. 116401.

12. **Mazurenko D.A., Kerst R., Akimov A.V., et. al.** Subpicosecond shifting of the photonic band gap in a three-dimensional photonic crystal // Appl. Phys. Lett. 2005. Vol. 86. No. 4. P. 041114.

Статья поступила в редакцию 13.04.2017, принята к публикации 12.05.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ИЛЬИНСКИЙ Александр Валентинович – *доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
ilinskiy@mail.ioffe.ru

ПАШКЕВИЧ Марина Эрнстовна – *старший преподаватель Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
marpash@yandex.ru

ШАДРИН Евгений Борисович – *доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
jenjasha@yandex.ru

REFERENCES

[1] **W. Bruckner, H. Opperman, W. Reichelt, E.I. Terukov,** Vanadiumdioxide, A-V, Berlin (1983).

[2] **A.A. Bugayev, B.P. Zakharchenya, F.A. Chudnovskiy,** Metal-semiconductor phase transition and its application, Nauka, Leningrad (1979).

[3] **N.F. Mott,** Metal–insolator phase transition, Nauka, Moscow (1979).

[4] **S.V. Vonsovskiy, M.I. Katsnelson,** Quantum physics of solid state, Nauka, Moscow (1983).

[5] **J. Marel, S. Kettl, D. Tender,** Valence theory, Mir, Moscow (1968).

[6] **Hong Jiang, I.R. Gomez-Abal, P. Rinke, M. Scheffler,** First principles modeling of located *d* states with the GW@LDA+U approach, Phys. Rev. B. 82 (4) (2010) 045108.

[7] **A. Ilinskiy, S. Khanin, E. Shadrin,** Electronic processes at metal – insulator phase transition in hydrogenated vanadium dioxide films, Izvestiya RGPU im. A.I. Gertsena. No. 11 (79) (2009) 61–76.

[8] **E.B. Shadrin, A.V. Ilinskiy,** On the nature of metal – semiconductor phase transition in vanadium dioxide, Physics of the Solid State. 42 (6) (2000) 1126–1133.

[9] **E. Arcangeletti, L. Baldassarre, D. Di Castro, et al.,** Evidence of a pressure induced metallization process in monoclinic VO_2, Phys. Rev. Lett. 98 (19) (2007) 196406.

[10] **A. Cavalleri, Th. Dekorsy, H.H. Chong, et. al.,** Evidence for a structurally-driven insulator-to-metal transition in VO_2: A view from the ultrafast timescale, Phys. Rev. B. 70 (16) (2004) P. 161102(R).

[11] **C. Kübler, H. Ehrke, R. Huber, et al.,** Coherent structural dynamics and electronic correlations during an ultrafast insulator-to-metal phase transition in VO_2 // Phys. Rev. Lett. 99 (11) (2007) 116401.

[12] **D.A. Mazurenko, R. Kerst, A.V. Akimov, et.al.,** Subpicosecond shifting of the photonic band gap in a three-dimensional photonic crystal, Appl. Phys. Lett. 2005. 86 (4) (2005) 041114.

Received 13.04.2016, accepted 12.05.2017.

THE AUTHORS

IL'INSKIY Aleksander V.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
ilinskiy@mail.ioffe.ru

PASHKEVICH Marina E.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
marpash@yandex.ru

SHADRIN Eugeniy B.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
jenjasha@yandex.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

DOI: 10.18721/JPM.10302
УДК 538.9

СТАБИЛИЗАЦИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ФАЗЫ НИТРАТА КАЛИЯ В ЕГО СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КОМПОЗИТАХ С ТИТАНАТОМ БАРИЯ

О.А. Алексеева[1], А.А. Набережнов[1, 2], Е.В. Стукова[3], В.Г. Симкин[4]

[1]Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;
[2]Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;
[3]Амурский государственный университет,
г. Благовещенск, Российская Федерация;
[4]Объединенный институт ядерных исследований,
г. Дубна, Российская Федерация

Методом нейтронной дифракции проведено исследование температурной эволюции структуры нитрата калия KNO_3 в сегнетоэлектрических композитах $(1-x)KNO_3 + (x)BaTiO_3$ при концентрации $BaTiO_3$ $x = 0{,}25$, 0,50 и 0,53 в режиме охлаждения. Выявлено расширение температурного интервала существования сегнетоэлектрической фазы нитрата калия в композитах при $x = 0{,}25$, 0,50 и ее подавление в композите, в котором $x = 0{,}53$. Температура фазового перехода из высокотемпературной параэлектрической фазы в сегнетоэлектрическую не зависит от концентрации $BaTiO_3$ и практически совпадает с температурой для чистого KNO_3. В композитах состава $x = 0{,}25$, 0,50 температура фазового перехода из сегнетоэлектрической фазы в низкотемпературную параэлектрическую фазу заметно снижается по сравнению с чистым KNO_3.

Ключевые слова: сегнетоэлектрик; композит; сегнетоэлектрический фазовый переход; дифракция нейтронов

Ссылка при цитировании: Алексеева О.А., Набережнов А.А., Стукова Е.В., Симкин В.Г. Стабилизация сегнетоэлектрической фазы нитрата калия в его сегнетоэлектрических композитах с титанатом бария // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 18–25. DOI: 10.18721/JPM.10302

STABILIZATION OF THE NOP FERROELECTRIC PHASE IN THE POTASIUM NITRATE – BARIUM TITANATE FERROELECTRIC COMPOSITES

O.A. Alekseeva[1], A.A. Naberezhnov[1, 2], E.V. Stukova[3], V.G. Simkin[4]

[1]Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;
[2]The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russian Federation;
[3]Amur State University, Blagoveshchensk, Russian Federation;
[4]Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russian Federation

The study of temperature evolution of KNO_3 (NOP) structure in ferroelectric $(1-x)KNO_3 + (x)BaTiO_3$ composites with $BaTiO_3$ concentrations $x = 0.25$, 0.50 and 0.53 has been carried out on cooling with the use of neutron diffraction technique. It was shown that, on cooling, the phase transition temperature (T_c) from the high-temperature paraelectric phase into the ferroelectric one did not depend on barium titanate concentration and coincided practically with T_c for the pure NOP. Moreover,

it was found that the admixture of $BaTiO_3$ enlarged essentially the temperature range of NOP ferroelectric phase stability in the composites with $BaTiO_3$ concentrations $x = 0.25$ and 0.50. The suppression of the ferroelectric phase was observed for the composite with $x = 0.53$.

Key words: ferroelectric; composite; ferroelectric phase transition; neutron diffraction

Citation: O.A. Alekseeva, A.A. Naberezhnov, E.V. Stukova, V.G. Simkin, Stabilization of the NOP ferroelectric phase in the potasium nitrate – barium titanate ferroelectric composites, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 18–25. DOI: 10.18721/JPM.10302

Введение

Нитрат калия KNO_3 известен как материал, перспективный для создания устройств энергонезависимой сегнетоэлектрической памяти (FRAM – Ferromagnetic Random Access non-volative Memory) [1]. В сегнетоэлектрическом состоянии соединение обладает такими ценными свойствами, как квадратные петли гистерезиса, низкое значение потенциала переключения (5 В) и малое время переключения (20 нс) [2]. Но эта фаза в чистом объемном нитрате калия существует только при охлаждении в температурном интервале 398 – 378 K. Таким образом, поиск условий, при которых она остается стабильной вплоть до комнатной температуры и ниже, является актуальной задачей.

В работе [3] показано, что в тонких пленках нитрата калия сегнетоэлектрическое состояние может быть стабильным при охлаждении в широком диапазоне температур от 403 до 273 K и даже при более низкой температуре. В объемных образцах стабильность и температурный диапазон существования сегнетоэлектрической фазы может зависеть от способа приготовления [4], размера частиц [5], температурной предыстории [6], присутствия примесей [7]. В работе [8] продемонстрирована возможность заметного расширения температурного интервала существования сегнетофазы (примерно на 20 K) при допировании нитрата калия ионами натрия. Значительное влияние на температуру фазовых переходов в нитрате калия оказывают условия ограниченной геометрии; это было обнаружено, например, для KNO_3, внедренного в матрицы MCM-41 [9, 10] и в нанопористые стекла [11, 12]. Для пористых стекол удалось добиться стабилизации сегнетофазы вплоть до температуры 5 K, и было показано, что существенную роль в стабилизации сегнетоэлектрической фазы при низких температурах играет не только размерный эффект (или ограниченная геометрия), но и предыстория приготовления образцов [12].

В данной работе исследуются композиты на основе смесей нитрата калия KNO_3 и титаната бария $BaTiO_3$. Ранее были проведены исследования диэлектрических свойств этих композитов $(1 - x)KNO_3 + (x)BaTiO_3$ в широком диапазоне концентраций $BaTiO_3$, при $x = 0{,}05 - 0{,}50$ [13, 14]. На кривой температурной зависимости диэлектрической проницаемости $\varepsilon(T)$ при охлаждении наблюдалось два максимума. Положение одного из них, наблюдаемого примерно при 400 K для всех композитов, соответствует переходу из высокотемпературной параэлектрической β-фазы в сегнетоэлектрическую γ-фазу. Что касается второго максимума на зависимости $\varepsilon(T)$ при более низких температурах, то его положение заметно менялось при изменении концентрации титаната бария. В статьях [13, 14] он был соотнесен с фазовым переходом (ФП) $\gamma \rightarrow \alpha$, т. е. с переходом из сегнетофазы в низкотемпературную параэлектрическую α-фазу. По результатам исследований была построена зависимость температурного интервала существования γ-фазы ΔT от содержания титаната бария. Оказалось, что при увеличении доли x $BaTiO_3$ от 0 до 0,4 происходит монотонный рост величины ΔT от 20 до 65 K, а далее интервал ΔT плавно уменьшается, и при $x = 0{,}5$ становится равным нулю. При этом отсутствовал температурный максимум на кривой зависимости диэлектрической проницаемости $\varepsilon'(T)$ при более низкой температуре, откуда было вы-

двинуто предположение, что сегнетоэлектрическая фаза KNO_3 подавляется в композите указанного состава [13, 14].

Основная цель данной работы – однозначное подтверждение сформулированной выше гипотезы, для чего необходимы исследования температурной эволюции структуры таких композитов и уточнение фазового состояния нитрата калия в указанных соединениях.

Образцы и методика эксперимента

Нитрат калия при комнатной температуре и атмосферном давлении имеет орторомбическую структуру (пространственная группа (SG) *Pmcn*) [15]. Эту фазу называют фазой II, или α-фазой. При нагреве до температуры примерно 401 K происходит реконструктивный (который не подчиняется соотношению группа/подгруппа) ФП первого рода в параэлектрическую разупорядоченную кальцитиподобную фазу с симметрией $R\bar{3}m$ (фаза I, или β-фаза). При охлаждении, в зависимости от температурной предыстории, при температуре 397 K может реализоваться переход из высокотемпературной фазы I в промежуточную фазу III, или γ-фазу, с симметрией $R3m$, и только при дальнейшем охлаждении, при $T \approx 378$ K, происходит возврат в низкотемпературную фазу II (α-фазу) [16, 17]. Необходимое условие появления γ-фазы при атмосферном давлении – это нагрев нитрата калия до температуры не ниже 453 K [18]. Переход из γ- в α-фазу также является реконструктивным.

Титанат бария $BaTiO_3$ относится к сегнетоэлектрикам типа смещения. При температурах свыше 393 K он имеет кубическую кристаллическую структуру типа перовскита (пространственная группа (SG) $Pm3m$). Ниже 393 K (температура Кюри) происходит ФП, и до температуры 278 K титанат бария является сегнетоэлектриком, имеющим тетрагональную симметрию (SG $P4mm$). При температурах ниже 278 K происходит второй ФП в сегнетоэлектрическую фазу с ромбической симметрией, а при температуре около 183 K титанат бария испытывает третий фазовый переход и ниже этой температуры является сегнетоэлектриком с ромбоэдрической структурой.

Образцы представляли собой тщательно перемешанную смесь порошков KNO_3 и $BaTiO_3$, взятых в необходимых объемных процентах. Размер частиц титаната бария составлял 5 – 30 мкм, нитрата калия – 200 мкм. Всего было исследовано три состава, в которых содержание титаната бария $x = 0{,}25$, 0,50 и 0,53.

Исследования структуры композитов проводились на нейтронном времяпролетном Фурье-дифрактометре высокого разрешения (ФДВР) в лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка Объединенного института ядерных исследований (г. Дубна Московской области). Измерения выполнены в режимах охлаждения, в температурном диапазоне, включающем области фазовых переходов в нитрате калия. Образцы предварительно нагревались до температуры $T = 453$ K с тем, чтобы создать условия для возникновения сегнетоэлектрической фазы при последующем охлаждении. Стабильность поддержания температуры во время измерений была не хуже 2 °C.

Результаты и обсуждение

Температурная эволюция дифракционных спектров по времени пролета (*англ.* TOF – time-of-flight) при охлаждении для разных составов представлена на рис. 1. Пунктирами проведены линии, по которым проводилась идентификация α-, β- и γ-фаз нитрата калия.

Анализ дифракционных спектров показал, что изменений фазовых состояний частиц $BaTiO_3$ в диапазоне температур от комнатной (RT) до 390 K не происходит.

На основе анализа полученных дифракционных данных можно утверждать, что температуры ФП при охлаждении из β- в γ-фазу для всех образцов лежат в интервале 395 – 405 K, что хорошо соответствует известному значению $T_{RT} = 397$ K для чистого нитрата калия.

В композите с составом $x = 0{,}25$ нитрат калия находился в сегнетоэлектрическом состоянии вплоть до температуры 350 K, ниже которой измерений мы не проводили.

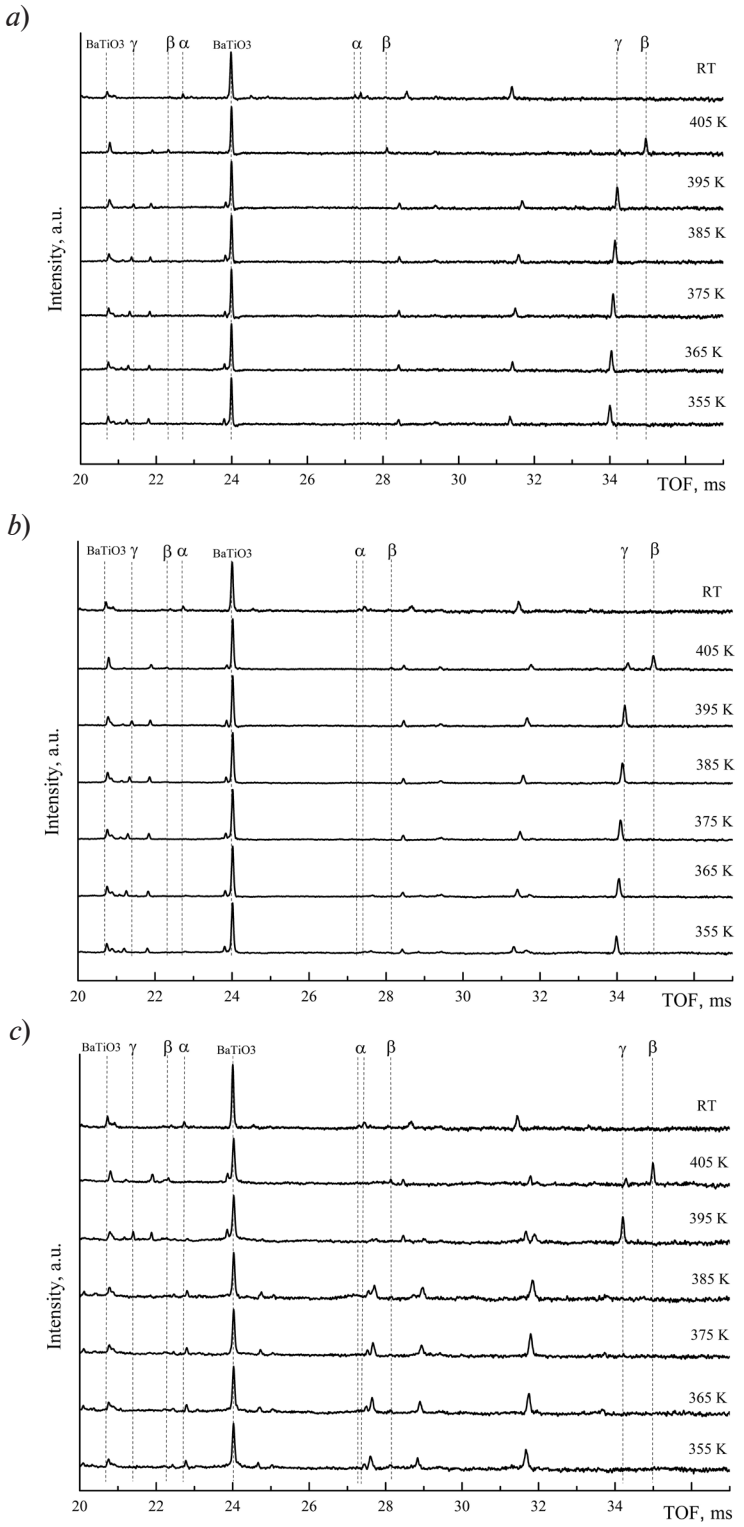


Рис. 1. Температурная эволюция дифракционных спектров композитов $(1 - x)KNO_3 + (x)BaTiO_3$ при охлаждении от 405 до 355 K для составов с $x = 0{,}25$ (*a*), 0,50 (*b*), 0,53(*c*); приведены исходные спектры при комнатной температуре (RT).

Вертикальными пунктирами отмечены моменты времени пролета (TOF), по которым проводилась идентификация α-, β- и γ-фаз нитрата калия

Таким образом, несмотря на то, что точное значение температуры ФП из γ-фазы в параэлектрическую низкотемпературную α-фазу мы не можем определить на основе наших измерений, тем не менее легко видеть, что температурный интервал существования сегнетоэлектрической фазы в образце состава $x = 0{,}25$ значительно шире, по сравнению с таковым для чистого нитрата калия.

Для состава, у которого $x = 0{,}50$, наблюдается аналогичная картина, однако обнаружено, что ниже температуры 375 K в композите появляется некоторое незначительное, по сравнению с γ-фазой, содержание α-фазы. Как и в случае состава с $x = 0{,}25$, при температуре $T = 350$ K нитрат калия в образце находится главным образом в сегнетоэлектрическом состоянии.

Для композита состава с $x = 0{,}53$ наблюдается принципиально отличная картина: γ-фаза обнаружена лишь при температуре 395 K; при температурах 385 K и ниже присутствует только α-фаза.

Таким образом, предположение о подавлении сегнетоэлектрической фазы нитрата калия в композитах $(1 - x)KNO_3 + (x)BaTiO_3$ при больших концентрациях $BaTiO_3$ ($x > 0{,}50$), сделанное на основе диэлектрических измерений, в целом подтверждается структурными исследованиями.

Тем не менее следует отметить, что данные измерений, полученные нами методом нейтронной дифракции, в отличие от данных диэлектрической спектроскопии, и для концентрации титаната бария $x = 0{,}53$ указывают на существование γ-фазы в нитрате калия, но только в области температур, лежащих выше температуры фазового перехода титаната бария в сегнетоэлектрическое состояние.

Таким образом, можно утверждать, что критическая концентрация титаната бария, при которой подавляется возникновение сегнетоэлектрической фазы в нитрате калия при охлаждении, находится в диапазоне $x = 0{,}50 - 0{,}53$, а фазовое состояние $BaTiO_3$ действительно играет принципиальную роль в этом процессе.

Все вышеизложенное сведено в таблицу, где приводится температурная эволюция фазовых состояний нитрата калия в композитах различных составов.

Эффекты, обнаруженные в области концентраций $0 < x < 0{,}40$, можно объяснить в рамках подхода, предложенного в работах [13, 14], т. е. взаимодействием частиц KNO_3 с системой поляризованных частиц $BaTiO_3$. Последние, как отмечалось выше, находятся в сегнетоэлектрической фазе в интересующей нас области температур вблизи 378 K, где в чистом KNO_3 происходит ФП в низкотемпературную параэлектрическую фазу. Можно полагать, что эффективное поле дипольных моментов частиц $BaTiO_3$ создает энергетический барьер, препятствующий переориентации диполей KNO_3, и повышает устойчивость сегнетофазы в этой области концентраций. Вопрос о природе процесса, который подавляет возникновение сегнетоэлектрического перехода в нитрате калия при концентрациях $x > 0{,}5$, пока остается открытым и требует дальнейшего исследования.

Таблица

Фазовые состояния KNO_3 в композитах $(1 - x)KNO_3 + (x)BaTiO_3$ при различных температурах

<table>
<tr><th rowspan="2">T, K</th><th colspan="4">Структурная фаза KNO_3</th><th rowspan="2">T, K</th></tr>
<tr><th>$x = 0$</th><th>$x = 0{,}25$</th><th>$x = 0{,}50$</th><th>$x = 0{,}53$</th></tr>
<tr><td>405</td><td>β</td><td>β</td><td>β</td><td>β</td><td>405</td></tr>
<tr><td>395</td><td rowspan="2">γ</td><td rowspan="4">γ</td><td rowspan="3">γ</td><td>γ</td><td>395</td></tr>
<tr><td>385</td><td rowspan="3">α</td><td rowspan="3">α</td><td>385</td></tr>
<tr><td>375</td><td rowspan="2">γ + α</td><td>375</td></tr>
<tr><td>365</td><td>365</td></tr>
<tr><td>350</td><td>350</td></tr>
</table>

Заключение

Проведенные структурные исследования показали, что в композитах $(1 - x)KNO_3 + (x)BaTiO_3$ составов $x = 0{,}25$ и $0{,}50$ температурный интервал существования сегнетоэлектрической γ-фазы существенно шире, по сравнению с чистым KNO_3. Увеличение концентрации до $x = 0{,}50$ приводит сначала к появлению вклада низкотемпературной параэлектрической α-фазы, а затем и к полному подавлению γ-фазы при значениях x в диапазоне $0{,}50 - 0{,}53$. Для состава с $x = 0{,}53$ сегнетоэлектрическая фаза KNO_3 при охлаждении наблюдается только при температурах выше 393 K, т. е. в области, где титанат бария находится в параэлектрической фазе. Микроскопический механизм, приводящий к этому эффекту, в настоящее время неясен и требует проведения дополнительных исследований.

А.А. Набережнов благодарит РФФИ (грант № 17-02-00774) за частичную финансовую поддержку при проведении исследований. О.А. Алексеева получила часть экспериментальных результатов в рамках выполнения государственного задания Министерства образования и науки РФ в СПбПУ (проект 3.1150.2017/4.6).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Scott J.F., Araujo C.A.** Ferroelectric memories // Science. 1989. Vol. 246. No. 4936. Pp. 1400–1405.

2. **Araujo C.A., Scott J.F., Godfrey R.B., McMillan L.** Analysis of switching transients in KNO_3 ferroelectric memories // Appl. Phys. Lett. 1986. Vol. 48. No. 21. Pp. 1439–1440.

3. **Scott J.F., Zhang M.-S.** Raman spectroscopy of submicron KNO_3 films // Phys. Rev. B. 1987. Vol. 35. No. 8. P. 4044.

4. **Kennedy S.W.** Metastable KNO_3 III from solution // J. Cryst. Growth. 1972. Vol. 16. No. 3. Pp. 274–276.

5. **Westphal M.J.** Particle size and cooperative behavior effects on KNO_3 phase transitions // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 74. No. 10. P. 6107.

6. **Deshpande V., Karkhanavala M.D., Rao U.R.K.** Phase transitions in potassium nitrate // J. Thermal Anal. 1974. Vol. 6. No. 6. Pp. 613–621.

7. **Westphal M.J., Wood J.W., Redin R.D., Ashworth T.** Calorimetric and photoacoustic investigation of KNO_3 phase transitions // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 73. No. 11. P. 7302.

8. **Shimada S., Aoki T.** Stabilization of the ferroelectric γ-phase of KNO_3 by doping with Na+, determined by the acoustic emission method // Chemistry Letters. 1996. Vol. 25. No. 5. Pp. 393–394.

9. **Baryshnikov S.V., Charnaya E.V., Milinskiy A.Yu., et al.** Stabilization of ferroelectricity in KNO_3 embedded into MCM-41 molecular sieves // Physica B. 2010. Vol. 405. No. 16. Pp. 3299–3302.

10. **Baryshnikov S.V., Charnaya E.V., Milinskiy A.Yu., et al**. Dielectric and calorimetric investigations of KNO_3 in pores of nanoporous silica matrices MCM-41 // Physics of the Solid State. 2012. Vol. 54. No. 3. Pp. 594–599.

11. **Серегин М.С., Набережнов А.А., Шаганов А.П., Сысоева А.А.** Температурная стабильность сегнетоэлектрической фазы в наночастицах нитрата калия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2014. № 2 (194). С. 9–14.

12. **Naberezhnov A., Koroleva E., Rysiakiewicz-Pasek E., et al.** Phase transitions in nanostructured potassium nitrate // Phase Transitions. 2014. Vol. 87. Pp. 1158–1156.

13. **Стукова Е.В., Маслова В.В., Барышников С.В.** Диэлектрические свойства сегнетоэлектрических композитов на основе KNO_3-$BaTiO_3$ и KNO_3-$LiNbO_3$ // Известия РГПУ им. А.И. Герцена. 2011. № 138. С. 58–65.

14. **Стукова Е.В., Лукьянченко А.Д.** Изменение температурного интервала существования сегнетоэлектрической фазы в композитах на основе нитрата калия // Вестник Амурского государственного университета. Сер. Естественные и экономические науки. 2014. № 65. С. 37–44.

15. **Bridgman P.W.** Polymorphic changes under pressure of the univalent nitrates // Proc. Am. Acad. Arts Sci. 1916. Vol. 51. No. 12. Pp. 581–625.

16. **Aydinoll M.K., Mantese J.V., Alpay S.P.** A comparative *ab initio* study of the ferroelectric behaviour in KNO_3 and $CaCO_3$ // J. Phys.: Condens. Matter. 2007. Vol. 19. No. 49. P. 496210.

17. **Chen A., Chernow F.** Nature of ferroelectricity in KNO_3 // Phys. Rev. 1967. Vol. 154. No. 2. P. 493.

18. **Xu K., Chen Y**. Temperature-dependent Raman spectra of mixed crystals of evidence for limited $NaNO_3$-KNO_3: Solid Solutions // J. Raman Spectrosc. 1999. Vol. 30. No. 3. Pp. 173–179.

Статья поступила в редакцию 02.04.2017, принята к публикации 17.05.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АЛЕКСЕЕВА Ольга Александровна — *аспирантка кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
blackhole2010@yandex.ru

НАБЕРЕЖНОВ Александр Алексеевич — *доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, старший научный сотрудник кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

СТУКОВА Елена Владимировна — *доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Российская Федерация.*

675027, Российская Федерация, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21
lenast@bk.ru

СИМКИН Валерий Гиршевич — *ведущий инженер лаборатории нейтронной физики Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна Московской области, Российская Федерация.*

141980, Российская Федерация, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6
simkin@nf.jinr.ru

REFERENCES

[1] **J.F. Scott, C.A. Araujo,** Ferroelectric memories, Science. 246 (4936) (1989) 1400–1405.

[2] **C.A. Araujo, J.F. Scott, R.B. Godfrey, L. McMillan,** Analysis of switching transients in KNO_3 ferroelectric memories, Appl. Phys. Lett. 48 (21) (1986) 1439–1440.

[3] **J.F. Scott, M.-S. Zhang,** Raman spectroscopy of submicron KNO_3 films, Phys. Rev. B. 35 (8) (1987) 4044.

[4] **S.W. Kennedy,** Metastable KNO_3 III from solution, J. Cryst. Growth. 16 (3) (1972) 274–276.

[5] **M.J. Westphal,** Particle size and cooperative behavior effects on KNO_3 phase transitions, J. Appl. Phys. 74 (10) (1993) 6107.

[6] **V. Deshpande, M.D. Karkhanavala, U.R.K. Rao,** Phase transitions in potassium nitrate, J. Thermal Anal. 6 (6) (1974) 613–621.

[7] **M.J. Westphal, J.W. Wood, R.D. Redin, T. Ashworth,** Calorimetric and photoacoustic investigation of KNO_3 phase transitions, J. Appl. Phys. 73 (11) (1993) 7302.

[8] **S. Shimada, T. Aoki,** Stabilization of the ferroelectric γ-phase of KNO_3 by doping with Na^+, determined by the acoustic emission method, Chemistry Letters. 25 (5) (1996) 393–394.

[9] **S.V. Baryshnikov, E.V. Charnaya, A.Yu. Milinskiy, et al.,** Stabilization of ferroelectricity in KNO_3 embedded into MCM-41 molecular sieves, Physica B. 405 (16) (2010) 3299–3302.

[10] **S.V. Baryshnikov, E.V. Charnaya, A.Yu. Milinskiy, et al.,** Dielectric and calorimetric investigations of KNO_3 in pores of nanoporous silica matrices MCM-41, Physics of the Solid State. 54 (3) (2012) 594–599.

[11] **M.S. Seregin, A.A. Naberezhnov, A.P. Shaganov, A.A. Sysoyeva,** Temperature stability of ferroelectric phase in potassium nitrate particles, St. Petersburg Polytechnical Journal. Physics and Mathematics. No. 2 (194) (2014) 9–14.

[12] **A. Naberezhnov, E. Koroleva, E. Rysiakiewicz-Pasek, et al.,** Phase transitions in nanostructured potassium nitrate, Phase Transitions. 87 (2014) 1158–1156.

[13] **E.V. Stukova, V.V. Maslova, S.V. Baryshnikov,** Dielectric properties of ferroelectric composites based on KNO_3-$BaTiO_3$ and KNO_3-$LiNbO_3$, Izvestia: Herzen University Journal of Humanities and Sciences. 2011. No. 138 (2011) 58–65.

[14] **E.V. Stukova, A.D. Lukyanchenko,** Izmeneniye temperaturnogo intervala sushchestvovaniya segnetoelektricheskoy fazy v kompozitakh na osnove nitrata kaliya [The change of a temperature range of ferroelectric-phase existence in composites based on KNO_3], Vestnik Amurskogo Gosudarstvennogo Universiteta. Ser. Yestestvennyye i Ekonomicheskiye nauki. (65) (2014) 37–44.

[15] **P.W. Bridgman,** Polymorphic changes

under pressure of the univalent nitrates, Proc. Am. Acad. Arts Sci. 51 (12) (1916) 581–625.

[16] **M.K. Aydinoll, J.V. Mantese, S.P. Alpay,** A comparative *ab initio* study of the ferroelectric behaviour in KNO_3 and $CaCO_3$, J. Phys.: Condens. Matter. 19 (49) (2007) 496210.

[17] **A. Chen, F. Chernow,** Nature of ferroelectricity in KNO_3, Phys. Rev. 154 (2) (1967) 493.

[18] **K. Xu, Y. Chen,** Temperature-dependent Raman spectra of mixed crystals of evidence for limited $NaNO_3$-KNO_3: Solid Solutions, J. Raman Spectrosc. 30 (3) (1999) 173–179.

Received 02.04.2017, accepted 17.05.2017

THE AUTHORS

ALEKSEEVA Olga A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
blackhole2010@yandex.ru

NABEREZHNOV Aleksandr A.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Scienes, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

STUKOVA Elena V.
Amur State University
21 Ignatievskoe Hwy, Blagoveshchensk, 675027, Russian Federation
lenast@bk.ru

SIMKIN Valeriy G.
Joint Institute for Nuclear Research
6 Joliot-Curie St., Dubna, 141980, Russian Federation
simkin@nf.jinr.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

DOI: 10.18721/JPM.10303
УДК 004.942

ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ НА РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОДВОДНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ВЗРЫВА ПРОВОДНИКОВ

А.И. Ряховский, В.И. Антонов, Н.В. Калинин

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

В работе исследовано влияние выбора уравнений состояния (УРС) плазмы металлов и воды на результаты численного моделирования электрического взрыва проводников в воде. Для сравнения различных УРС используется одномерная, цилиндрически симметричная магнитогидродинамическая модель взрыва проволочки. Результаты численного моделирования сравниваются с экспериментальными данными по микро- и наносекундному взрывам. Использование рассмотренных уравнений состояния и моделей транспортных коэффициентов позволяет получить результаты, более близкие к экспериментальным, и более точно воспроизвести термодинамическую эволюцию системы. Проведенное сравнение выявило среди ряда УРС наиболее подходящие для использования в моделировании электрического взрыва.

Ключевые слова: магнитная гидродинамика; электрический взрыв проводников; уравнение состояния; плазма металла

Ссылка при цитировании: Ряховский А.И., Антонов В.И., Калинин Н.В. Влияние выбора уравнений состояния на результаты численного моделирования подводного электрического взрыва проводников // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 26–37. DOI: 10.18721/JPM.10303

THE EOS CHOICE EFFECT ON THE SIMULATED RESULTS OBTAINED FOR AN UNDERWATER ELECTRICAL EXPLOSION OF CONDUCTORS

A.I. Ryakhovskiy, V.I Antonov, N.V. Kalinin

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

In the paper, the effect of the choice of equations of state (EOSs) depicting the states of metal plasma and water on the simulated results obtained for an underwater electrical explosion of conductors has been analyzed. In order to compare various EOSs, a one-dimensional, cylindrically symmetrical, magnetohydrodynamic model of an underwater wire explosion was employed. The simulated results were compared with the experimental data on both micro- and nanosecond explosions of aluminum and copper wires. The right choice of EOSs and the model of transportation coefficients allowed us to improve the agreement between the experimental and simulated data and to replicate the thermodynamic evolution of the system more closely. The made comparison revealed the most appropriate EOSs for application to simulation of an electrical explosion.

Key words: magnetohydrodynamics; electrical explosion of conductors; metal plasma; equation of state

Citation: A.I. Ryakhovskiy, V.I. Antonov, N.V. Kalinin, The EOS choice effect on the simulated results obtained for an underwater electrical explosion of conductors, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 26–37. DOI: 10.18721/JPM.10303

Введение

Электрическим взрывом проводников (ЭВП) называют процесс резкого расширения вещества в ходе интенсивного джоулева нагрева объема металла импульсом электрического тока. Данное явление представляет интерес как с практической, так и с теоретической точек зрения. Практический интерес к ЭВП обусловлен широким спектром его применений, включающим методы создания источников мягкого излучения, генерации ударных волн и синтеза энергонасыщенных наночастиц. Теоретический интерес направлен на изучение сложного многофазного явления, связанного с поведением вещества в экстремальных термодинамических условиях [1]; явление относится к области физики высоких плотностей энергии. Электрический взрыв в воде, рассматриваемый в данной работе, является инструментом создания ударных волн, применяемых в штамповке, и объектом анализа химических реакций на границе расплавленного металла и воды.

Ключевую роль в изучении электрического взрыва играет математическое моделирование. Существующие на сегодняшний день модели способны дать качественно полную картину разряда во взрываемом проводнике и последующей эволюции системы. Количественно точные оценки распределений термодинамических параметров, однако, представляют собой более сложную задачу, ввиду ограниченности диапазонов применимости моделей.

На данный момент не создано единой теории, способной обеспечить точную оценку термодинамических свойств вещества в достаточно широкой области фазового пространства. Свойства вещества в большинстве математических моделей описываются уравнениями состояния и формулами для транспортных коэффициентов. Правильный выбор уравнений, таким образом, является одним из ключевых условий при разработке математической модели ЭВП.

В данной работе, наряду с уже опробованными в моделировании уравнениями состояний (УРС), рассмотрены их более современные аналоги и проанализирована их применимость к описанию процессов, протекающих в веществе на протяжении электрического взрыва.

Обзор уравнений состояния

Уравнением состояния называется соотношение, связывающее между собой термодинамические параметры системы. Эти соотношения могут быть представлены как в виде явных формул, определяющих зависимости давления и внутренней энергии от плотности и температуры, так и в форме выражений для свободной энергии системы. Из таких выражений соответствующие явные формулы можно получить посредством дифференцирования.

Электрический взрыв проводников представляет собой комплексный многофазный процесс, что накладывает определенные требования на используемое уравнение состояния. Перед исследователем стоит задача сделать выбор: использовать только одно широкодиапазонное уравнение или переключаться между различными уравнениями, учитывая зависимости от термофизических параметров. Как уже отмечено выше, на данный момент отсутствует единая теория, с помощью которой можно было бы точно описать поведение системы на протяжении всего взрыва. Однако для большинства известных стадий и аспектов явления имеются модели, работающие в ограниченном диапазоне.

Уравнения состояния в физике высоких плотностей энергии можно условно подразделить по признаку их построения на два типа: основанные на опыте (эмпирические) и на фундаментальных принципах.

УРС первого типа строятся путем поис-

ка генеральных соотношений между термодинамическими величинами и подбором необходимых коэффициентов.

УРС второго типа выводятся из известных теоретических законов, описывающих поведение вещества на атомном и молекулярном уровнях.

Кроме этих, имеются также гибридные уравнения, которые совмещают два указанных типа построения. Наиболее адекватные описания рассматриваемого явления, которые применяются на сегодняшний день, содержат в качестве УРС и моделей транспортных коэффициентов экспериментально полученные табличные значения. Такой подход, однако, накладывает существенные ограничения на применимость модели и увеличивает вычислительную сложность задачи. Более подробная классификация подходов к построению УРС в физике высоких плотностей энергии приведена на диаграмме (рис. 1). По горизонтальной оси отложена плотность, нормализованная на плотность в критической точке, по вертикальной оси – температура kT в электронвольтах (k – постоянная Больцмана).

В задачах данного типа чаще всего используются такие УРС, как приближение среднего иона Баско [2] и уравнение Мура [3]. Однако к одному из главных недостатков этих уравнений следует отнести их неспособность адекватно описать область метастабильных состояний. В последние годы были предложены УРС, у которых этот недостаток отсутствует. Два таких уравнения будут рассмотрены в данной работе.

Первое из них, разработанное А. Рэем [4], дополняет принципы, использованные при построении уравнения Мура, более точным учетом ионной составляющей давления и моделью мягких сфер Леннарда – Джонса в области насыщенного пара.

Второе уравнение, предложенное А.Л. Хомкиным и А.С. Шумихиным [5], помимо этой модели, дополнительно учитывает межчастичные взаимодействия между конкретными типами молекул и ионов. Кроме самого УРС, в вышеупомянутой статье также предложена модель транспортных коэффициентов, основанная на тех же принципах.

С.Н. Колгатин [6] предложил использовать в качестве УРС интерполяционное уравнение. Это полуэмпирическое соотношение, где отдельно учитываются тепловая, упругая ионизационная и диссоциацион-

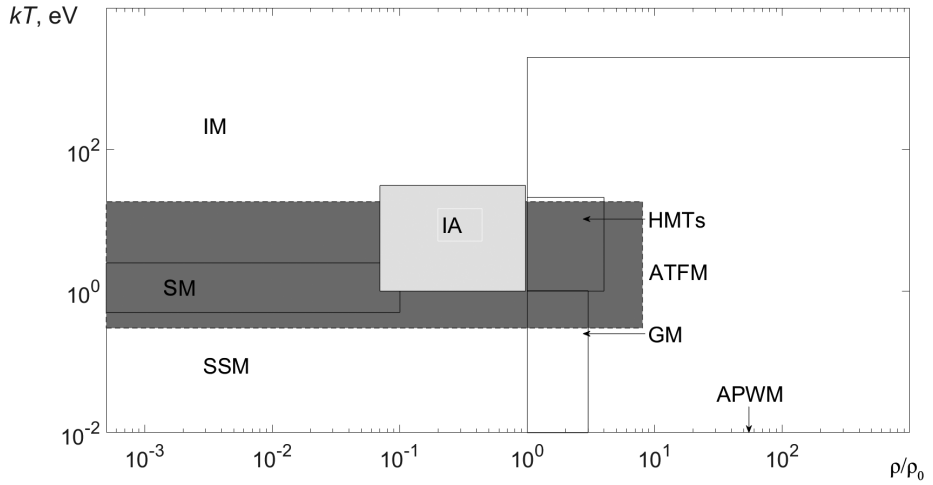


Рис. 1. Диаграмма применимости различных подходов к построению уравнений состояния (УРС). Темно-серым фоном выделена область, представляющая интерес для описания электрического взрыва проводников:
SM, GM, ATFM – модели Саха, Грюнайзена, скорректированная модель Томаса – Ферми, соответственно; SSM, IM – модели мягких сфер и ионизационная; IA – интерполяционная область, HMTs – теории жидкого металла, APWM – метод расширенной плоской волны

ная составляющие давления и внутренней энергии. Коэффициенты в выражениях для этих составляющих подобраны для различных металлов на основе экспериментальных данных.

Помимо модели состояния и транспортных коэффициентов плазмы металла, для расчета подводного ЭВП необходима аналогичная модель для воды. Для этой цели удобно использовать другое уравнение Колгатина [7]. Оно позволяет сэкономить вычислительное время по сравнению с таковым для табличных моделей.

Использованная математическая модель

При моделировании физических процессов в плазме возможны различные подходы. Для математического описания ЭВП главным образом применяются методы молекулярной динамики [8] и магнитогидродинамический (МГД) [9]. В данной работе использован метод МГД. В его пользу говорят широкая применимость, способность описать различные стадии процесса и наименьшие вычислительные требования, необходимые для получения приемлемой точности.

МГД-модель ЭВП включает уравнения неразрывности, движения и энергии, а также уравнения электромагнитного поля. УРС замыкают систему уравнений. Кроме того, систему следует дополнить выражениями для вычисления транспортных коэффициентов. В подобных задачах таким дополнением зачастую служат модели Мура – Ли [10] и Беспалова – Полищука [11]. Последняя использовалась нами вместе со всеми УРС, кроме уравнений Хомкина – Шумихина [5] (для них имеется отдельная модель).

Мы решали задачу в Лагранжевых массовых переменных. Такой подход позволил упростить расчет положения границы раздела сред между металлом и внешней средой. В Лагранжевых массовых переменных одномерная осесимметричная система уравнений МГД для нашей задачи выглядит следующим образом [12]:

$$\frac{d}{dt}\frac{1}{\rho} = \frac{d}{ds}(rv), \quad \frac{\partial v}{\partial t} = -r\frac{\partial p}{\partial s} + \frac{f}{\rho},$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -p\frac{\partial (rv)}{\partial s} - \frac{\partial W}{\partial s} + Q_j - S_{rad},$$

$$W = -\kappa\rho r\frac{\partial T}{\partial s},$$

$$f = -\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial s}\frac{(rH_\varphi)^2}{8\pi}, \quad Q_j = \frac{J\cdot E_z}{\rho},$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\frac{H_\varphi}{\rho r} = \frac{\partial E_z}{\partial s}, \quad E_z = \frac{\rho}{4\pi\sigma}\frac{\partial}{\partial s}(rH_\varphi),$$

$$p = p(\rho, T), \quad \varepsilon = \varepsilon(\rho, T),$$

$$\kappa = \kappa(\rho, T), \quad \sigma = \sigma(\rho, T).$$

Здесь W – плотность теплового потока, ε – внутренняя энергия, s – пространственная Лагранжева переменная; r – длина радиус-вектора; v – скорость; ρ, T, p – плотность, температура и давление, соответственно; κ, σ – тепло- и электропроводность; H_φ – азимутальная составляющая напряженности магнитного поля; E_z – осевая составляющая напряженности электрического поля; J – полный ток; f – сила Ампера; Q_j – мощность джоулева тепловыделения; S_{rad} – мощность излучения.

Величина S_{rad} вычисляется в приближении оптически тонкого слоя или в приближении лучистой теплопроводности, в зависимости от локальной средней длины пробега фотонов:

$$S_{rad} = \begin{cases} \dfrac{\partial W_r}{\partial s}, l_p \ll L, \\ \dfrac{\partial W_p}{\partial s}, l_p \gg L; \end{cases}$$

$$W_r = \frac{16\sigma l_r T^3}{3}\frac{\partial T}{\partial s}, \quad \frac{\partial W_p}{\partial s} = 4\kappa_p\sigma T^4.$$

Здесь W_r, W_p – плотности потоков излучения по Росселанду и по Планку, соответственно; L – характерный размер задачи; κ_p – коэффициент поглощения, усредненный по Планку; l_r – длина среднего пробега фотонов, усредненная по Росселанду.

Оценки этих величин проведены аналогично представленным в работе [13].

Граничные условия на левой границе расчетной области (оси) выбирались из соображений симметрии. Для получения условия для напряженности магнитного

поля на правой границе требовалось решение электротехнического уравнения цепи:

$$L_0 \frac{dJ}{dt} + R_0 J - V(t) + E_z(M,t) =$$

$$= -2\frac{d}{dt}\left(J(t) \ln \frac{R_*}{R(t)} \right),$$

$$\frac{dV}{dt} = -\frac{J}{C_0},\ V(0) = V_0,\ J(0) = J_0,$$

$$H_\varphi(t) = \frac{2J(t)}{R(t)}.$$

Детальное пояснение обозначений параметров цепи L_0, R_0, V, V_0, C_0 и R_* можно найти в работе [12].

В начальный момент времени задавалась нулевая скорость во всей расчетной области. Кроме того, для температуры и давления внешней среды задавались начальные значения, а для термодинамических параметров металла – параболический профиль. Параметры начального профиля температуры и давления варьировались с целью достижения лучшего соответствия экспериментальным данным.

Для решения поставленной задачи использовался метод, построенный на принципе локального расщепления по физическим процессам; его прототип был описан А.А. Самарским и Ю.П. Поповым [12]. Система линеаризировалась с помощью метода Ньютона, каждая итерация которого разрешается методом раздельных прогонок. Использованная разностная схема полностью консервативна, что означает автоматическое выполнение законов сохранения для полной энергии и для различных типов энергии, а также неявна по времени, что позволило избежать проблем со сходимостью.

Отличительной чертой программного кода, созданного в рамках данного исследования, является возможность использования различных УРС. Разработанная нами программа пригодна для расчета гидродинамического поведения продуктов электрического взрыва при прохождении через них сильноточного разряда [1].

Сравнение расчетных результатов с экспериментальными данными

Ввиду технической невозможности измерения распределений термодинамических величин по всему объему вещества, для проверки численных результатов были использованы экспериментальные временные зависимости положений как границы плазмы с внешней средой, так и ударной волны. Другими известными экспериментальными данными были зависимости значений температуры границы плазмы с внешней средой от времени, полученные в результате радиационного анализа.

Результаты численного эксперимента сравнивались с экспериментальными данными, полученными в работах А. Гриненко [14] и Т. Сасаки [15]. В обеих статьях представлены и результаты численного моделирования. При расчетах мы использовали приведенные там сведения о параметрах импульса, истории энерговклада и др. Схема цепи разрядных установок, использованных в экспериментах, приведена на рис. 2.

Первый смоделированный эксперимент (Э1) представлял собой микросекундный разряд конденсатора под напряжением 10 кВ через алюминиевую проволочку *1* радиусом $r_0 = 0{,}10$ мм, погруженную в воду [15]. В математической модели из указанной работы использовались уравнения состояния Коула

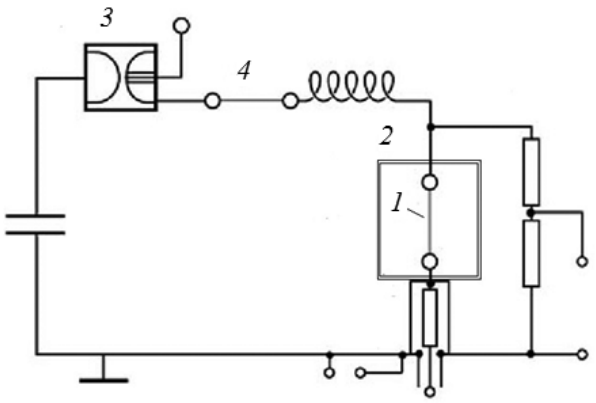


Рис. 2 [15]. Электрическая схема экспериментальной установки:
1 – взрываемая проволочка, *2* – разрядная камера, *3* – выключатель, *4* – прерыватель. Имеются также резисторы, конденсатор и индуктивность

[16], а также УРС Мура и модель транспортных коэффициентов Мура – Ли для плазмы металла и IAPWS95 [17] для воды.

Вторым смоделированным экспериментом (Э2) являлся наносекундный взрыв медной проволочки в воде с энергией около 0,7 кДж. Максимальная мощность энерговклада составляла примерно 60 Вт, а пиковый энерговклад был 60 эВ/атом. Математическая модель в оригинальной работе была также дополнена УРС Мура для металла. Состояние воды описывалось уравнением, основанным на экспериментальных данных Бриджмана [18]. В работе А. Гриненко [14] также была использована модель транспортных коэффициентов Беспалова – Полищука.

Известные параметры цепи в Э1 подставлялись в электротехническое уравнение для получения граничного условия напряженности магнитного поля. В Э2 данные об энерговкладе применялись при составлении уравнения энергии, а также при подборе граничного условия для уравнений магнитного поля в ходе расчета удельной электромагнитной силы.

Наш подбор начальных распределений термодинамических параметров позволил улучшить согласие численных результатов с экспериментальной картиной, по сравнению с оригинальной работой [14]; при этом не потребовалось усложнять математическую модель. Наилучшее соответствие экспериментальным данным (для всех рассмотренных УРС) было получено при использовании профилей температуры, приведенных на рис. 3.

Далее представлены численные расчетные данные для временных зависимостей радиуса плазменного шнура, положения ударной волны и температуры на границе плазмы и внешней среды и проведено их сравнение с соответствующими экспериментальными данными. На графиках представлены результаты вычислений с помощью уравнения состояния и модели транспортных коэффициентов Хомкина и Шумихина, как дающие наилучшее совпадение с результатами экспериментов. В качестве метрики использовалось среднее квадратичное отклонение от экспериментальных данных, рассчитанное по двадцати контрольным точкам, равномерно распределенным по временной оси. Полученные нами значения отклонений при использовании каждого из УРС приведены в табли-

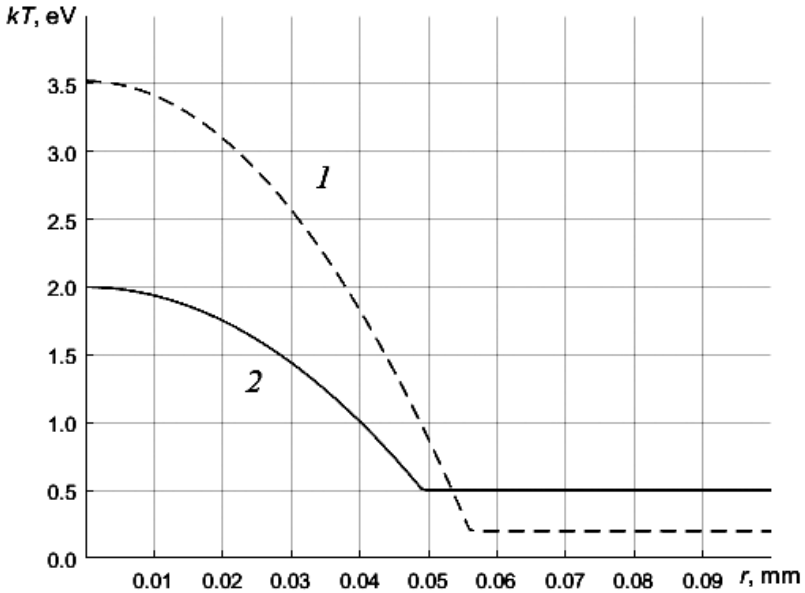


Рис. 3. Радиальные профили температуры для медной (*1*) и алюминиевой (*2*) проволочек, выбранные нами в качестве начальных условий (профили взяты из работ [14] и [15] соответственно)

Таблица

Сравнение средних отклонений от экспериментальных данных, полученных разными авторами, при использовании различных уравнений состояния

Кем проведено сравнение	Источник, откуда взято уравнение состояния	Среднее отклонение расчета от эксперимента [источник экспериментального результата]			
		Δr_1, мм	Δr_2, мм		$\Delta(kT)$, эВ
		Для радиуса ударной волны r_1	Для положения плазменного шнура r_2		Для температуры kT на границе плазма – внешняя среда
		[15]	[15]	[14]	[14]
Настоящая статья	Баско [2]	0,110	0,026	0,006	0,209
	More, et al. [3]	0,133	0,026	0,007	0,213
	Ray, Srivastava [4]	0,053	0,024	0,004	0,131
	Khomkin, Shumikhin [5]	0,047	0,023	0,003	0,106
	Колгатин, Хачатурьянц [7]	0,091	0,022	0,005	0,170
Grinenko, et al.[14]	Grinenko, et al. [14]	–	–	0,017	0,565
Sasaki, et al. [15]	Sasaki, et al. [15]	0,390	0,037	–	–

Примечание. Сравнение расчетных и экспериментальных данных проведено по 20 контрольным точкам.

це наряду с аналогичными результатами из статей-источников [14, 15].

Использование уравнения состояния, предложенного С.Н. Колгатиным для воды, позволило добиться лучшего согласия с экспериментом Э2, по сравнению с полученным в работе [14], без затрат вычислительной мощности на обращение к табличным данным.

В результате численного решения задачи расчета микросекундного взрыва с использованием УРС, литературные источники для которых приведены в таблице, нам удалось добиться лучшего согласия между смоделированным и экспериментально полученным поведением ударной волны. Динамика же движения границы между плазмой и металлом, которая, по нашему мнению, рассчитана достаточно хорошо и в оригинальной работе [15], была численно точнее передана нами при меньших затратах на вычисления.

На рис. 4, *a* представлены временные зависимости расстояния от начальной точки до границы металл – вода по радиальной координате при микросекундном взрыве алюминиевой проволочки (эксперимент Э1), полученные Т. Сасаки в работе [15]. График отражает движение границы между плазмой металла и водой в процессе взрыва. На рис. 4, *b* приведены экспериментальные данные Э1 и их моделирование, выполненное тем же автором, но представлены временные зависимости расстояния от начального положения границы плазменного шнура (динамика фронта ударной волны).

Основным недостатком численного решения, полученного в работе [15], по нашему мнению, является различие графиков движения ударных волн, полученных расчетным и экспериментальным путями (рис. 4), и, главным образом, непостоянство расчетной скорости. Это может означать избыток искусственной вязкости в численном решении. Необходимость в высокой численной вязкости может быть вы-

звана использованием недостаточно устойчивой разностной схемы. В наших расчетах данная особенность была устранена при помощи перехода к неявной схеме. Альтернативным объяснением того результата, что расчетная динамика положения фронта ударной волны оказалась нелинейной, может быть неверное предположение о характере энергетического вклада в развитие процесса.

Рис. 4 наглядно демонстрирует улучшение соответствия численно и экспериментально полученных временных зависимостей радиуса ударной волны и положения границы металл – плазма в эксперименте Э1.

Численные результаты по второму из рассмотренных экспериментов (Э2), приведенные в работе [14], удалось улучшить, благодаря подбору начальных условий, учету излучения и изменению модели транспортных коэффициентов. Модель Беспалова – Полищука, использованная авторами работы [14], однако, по-прежнему хорошо работает для описания качественно адек-

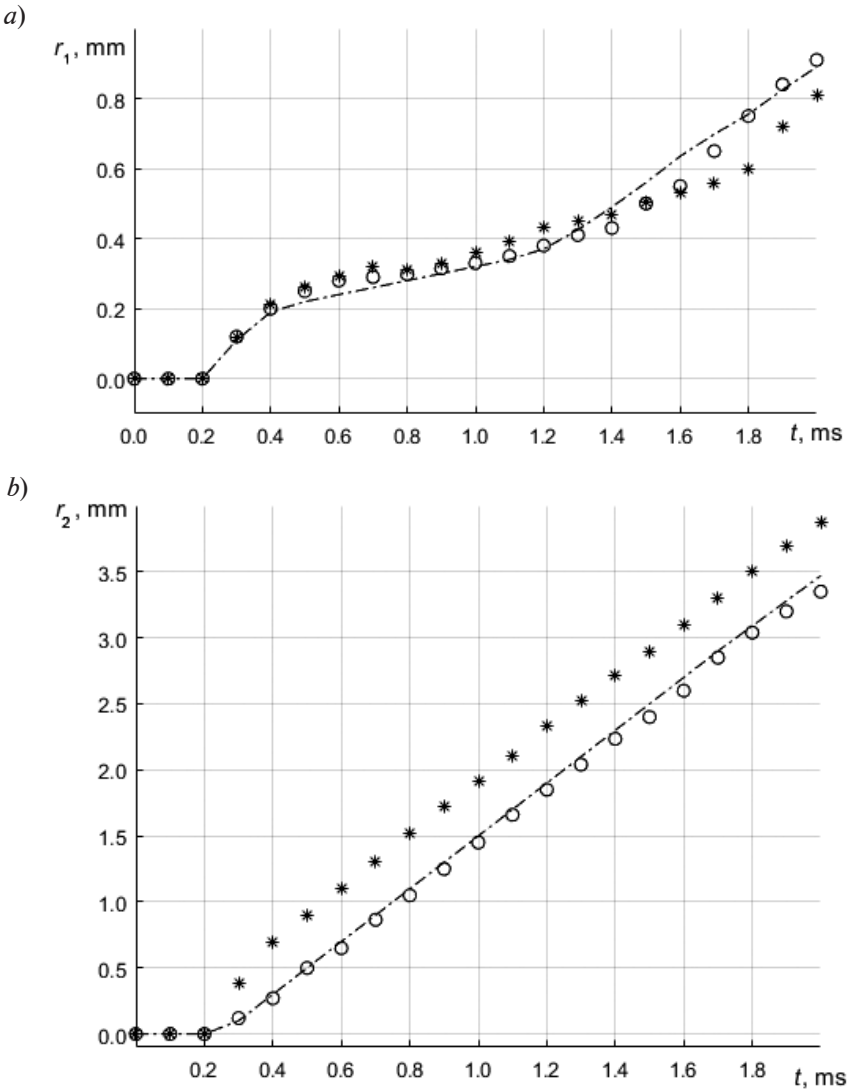


Рис. 4. Сравнение расчетных результатов (звездочки [15] и линия) на соответствие экспериментальным данным (кружки) работы [15] по микросекундному взрыву алюминиевой проволочки в воде (Э1): динамика движения границы между плазмой металла и водой (*a*) и движения фронта ударной волны (*b*); линия показывает зависимость, рассчитанную нами при помощи созданной программы

ватной картины процесса. Так же, как и для случая микросекундного взрыва, нами была получена более близкая к экспериментальной картина гидродинамического поведения системы.

На рис. 5, *a* представлены графики движения границы между металлом и плазмой, полученные экспериментально и численно в эксперименте Э2. На рис. 5, *b* приведены графики изменения температуры на этой границе для того же самого эксперимента.

Данные, представленные на рис. 5, демонстрируют лучшее соответствие динамики границы раздела сред и более верное отражение изменения температуры этой границы со временем.

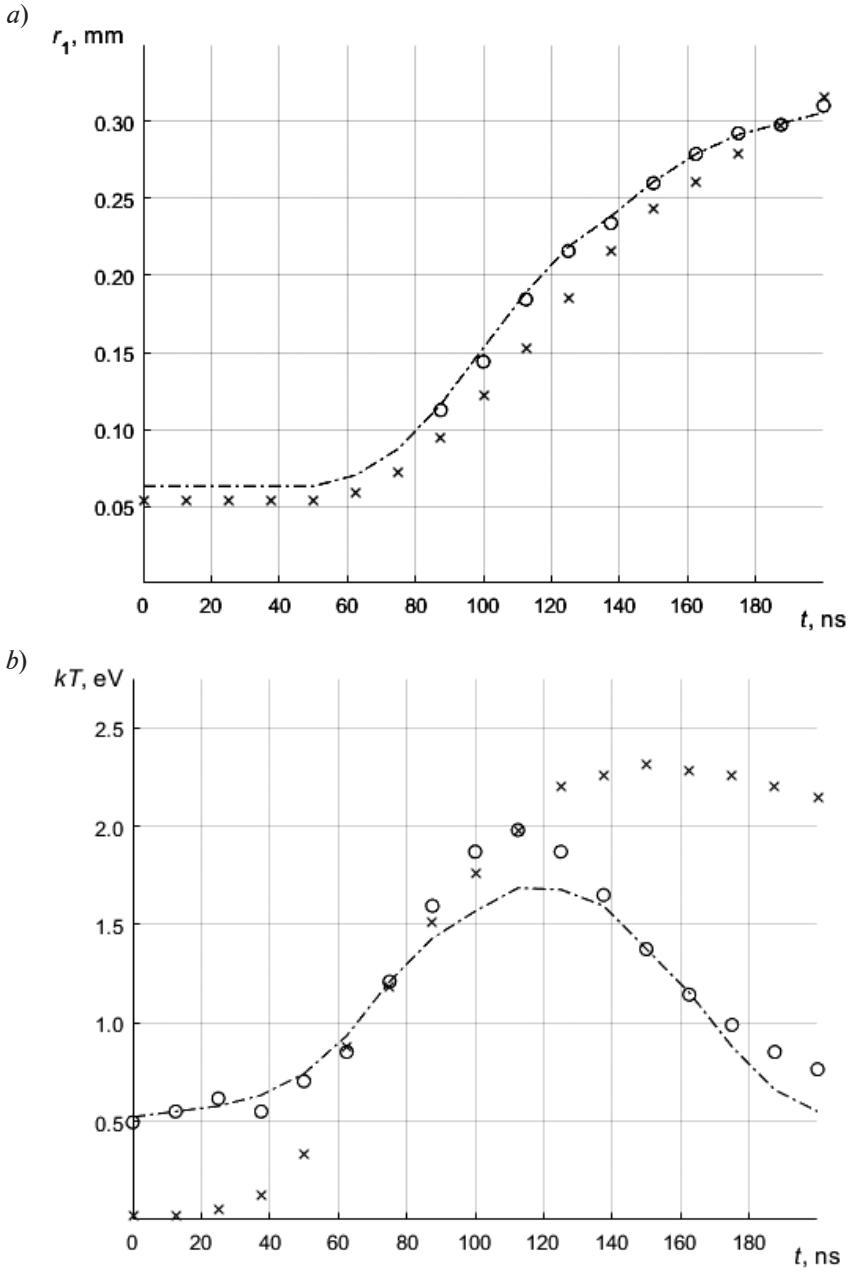


Рис. 5. Сравнение расчетных результатов (крестики [14] и линия) на соответствие экспериментальным данным (кружки) работы [14] по наносекундному взрыву медной проволочки в воде (Э2): динамика движения границы между плазмой металла и водой (*a*) и температуры на этой границе (*b*); линия показывает зависимость, рассчитанную нами при помощи созданной программы

Из рис. 5, *b* следует, что наибольшее расхождение с экспериментом проявляется в момент пикового нагрева границы плазмы металла и воды. Важно отметить, что максимум расхождения для указанного момента наблюдался при расчетах с использованием всех рассмотренных уравнений состояния. Отсюда логично предположить, что источник полученного расхождения стоит искать в других аспектах модели. Причиной может являться завышенная оценка энергетических потерь на излучение в математической модели, в силу неточности использованных нами приближений. Необходимо глубже исследовать влияния различных моделей излучения на результаты моделирования. Важную роль также может играть точность учета вклада лучистой теплопроводности в теплообмен.

Заключение

Сравнение численных результатов с экспериментальными данными показало, что все рассмотренные уравнения состояния (УРС) практически пригодны для моделирования гидродинамического поведения системы. При использовании каждого из рассмотренных УРС нам удавалось получить картину, близкую к экспериментальной. Различий в применимости УРС к моделированию стадии разлета продуктов микро- и наносекундных электрических взрывов проводников разной природы выявлено не было. Наиболее близкое совпадение с имеющимися экспериментальными данными давало использование УРС и модели транспортных коэффициентов, предложенных А.Л. Хомкиным и А.С. Шумихиным. Эти же уравнения являются и самыми сложными как с точки зрения вычислительной нагрузки, так и программирования. В моделях, где не требуется высокой точности, целесообразно использовать более простые уравнения состояния.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Бурцев В.Л., Калинин Н.В., Лучинский А.В.** Электрический взрыв проводников и его применение в электрофизических установках. М.: Энергоатомиздат, 1990. 288 с.

2. **Баско М.М.** Уравнение состояния металлов в приближении среднего иона // Теплофизика высоких температур. 1985. Т. 23. № 3. С. 483–491.

3. **More R.M., Warren K.H., Young D.A., Zimmerman G.B.** A new quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter // Physics of Fluids. 1988. Vol. 31. No. 10. Pp. 3059–3078.

4. **Ray A., Srivastava M.K., Kondayya G., Menon S.V.G.** Improved equation of state of metals in the liquid-vapor region // Laser and Particle Beams. 2006. Vol. 24. No. 3. Pp. 437–445.

5. **Хомкин А.Л., Шумихин А.С.** Уравнение состояния, состав и проводимость плотной плазмы паров металлов // Теплофизика высоких температур. 2014. Т. 52. № 3. С. 335–344.

6. **Колгатин С.Н.** Простые интерполяционные уравнения состояния азота и воды // Журнал технической физики. 1995. Т. 65. № 7. С. 1–9.

7. **Колгатин С.Н., Хачатурьянц А.В.** Интерполяционные уравнения состояния металлов // Теплофизика высоких температур. 1982. Т. 20. № 3. С. 447–451.

8. **Alder B.J., Wainwright T.E.** Molecular dynamics by electronic computers // Transport Processes in Statistical Mechanics. Proceedings of Symposium, 1958. Pp. 97 –131.

9. **De Hoffmann F., Teller E.** Magneto-hydrodynamic shocks // Physical Review. 1950. Vol. 80. No. 4. P. 692.

10. **Lee Y.T., More R.M.** An electron conductivity model for dense plasmas // Physics of Fluids. 1984. Vol. 27. No. 5. Pp. 1273–1286.

11. **Беспалов И.М., Полищук А.Я.** Методика расчета транспортных коэффициентов плазмы в широком диапазоне параметров. М.: ИВТАН, 1988. 36 с.

12. **Самарский А.А., Попов Ю.П.** Разностные методы решения задач газовой динамики. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1992. 424 с.

13. **Четверушкин Б.Н.** Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. М.: Наука, 1985. 304 с.

14. **Grinenko A., Krasik Y.E., Efimov S., Fedotov A., Gurovich V.T., Oreshkin V.I.** Nanosecond time scale, high power electrical wire explosion in water // Physics of Plasmas. 2006. Vol. 13. No. 4. P. 042701.

15. **Sasaki T, Yano Y., Nakajima M., Kawamura T., Horioka K.** A comparative study of equation of state and conductivity for warm dense matter using pulsed-power wire discharges in water // Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing. 2008.

Vol. 112. No. 4. P. 042026.

16. **Cole R.H., Weller R.** Underwater explosions // Physics Today. 1948. Vol. 1. No. 6. P. 35.

17. **Wagner W., Pruß A.** The IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use // Journal of Physical and Chemical Reference Data. 2002. Vol. 31. No. 2. Pp. 387–535.

18. **Баум Ф.А., Орленко Л.П. Станюкович К.П.** Физика взрыва. М.: Наука, 1975. 744 с.

Статья поступила в редакцию 29.09.2016, принята к публикации 08.06.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

РЯХОВСКИЙ Алексей Игоревич – *аспирант кафедры высшей математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alexey.i.ryakhovskiy@mail.ioffe.ru

АНТОНОВ Валерий Иванович – *доктор технических наук, заведующий кафедрой высшей математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
antonovvi@mail.ru

КАЛИНИН Николай Валентинович – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры высшей математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
nvkalinin@rambler.ru

REFERENCES

[1] **V.L. Burtsev, N.V. Kalinin, A.V. Luchinskiy,** Elektricheskiy vzryv provodnikov i yego primeneniye v elektrofizicheskikh ustanovkakh [An electrical explosion of conductors and its application in electrophysical installations], Moscow, Energoatomizdat, 1990.

[2] **M.M. Basko,** Uravneniye sostoyaniya metallov v priblizhenii srednego iona [An equation of a metal state in the mean ion approximation], Teplofizika vysokikh temperatur. 23 (3) (1985) 483–491.

[3] **R.M. More, K.H. Warren, D.A. Young, et al.,** A new quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter, Physics of Fluids. 31 (10) (1988) 3059–3078.

[4] **A. Ray, M. Srivastava, G. Kondayya, et al.,** Improved equation of state of metals in the liquid-vapor region, Laser and Particle Beams. 24 (3) (2006) 437–445.

[5] **A.L. Khomkin, A.S. Shumikhin,** Uravneniye sostoyaniya, sostav i provodimost plotnoy plazmy parov metallov [An equation of state, composition and conductivity of a dense metal-vapor plasma], Teplofizika vysokikh temperatur. 52 (3) (2014) 335–344.

[6] **S.N. Kolgatin,** Prostyye interpolyatsionnyye uravneniya sostoyaniya azota i vody [Simple interpolation equations of state of nitrogen and water], Zhurnal Tekhnicheskoy Fiziki. 65 (7) (1995) 1–9.

[7] **S.N. Kolgatin, A.V. Khachaturyants,** Interpolyatsionnyye uravneniya sostoyaniya metallov [Interpolation equations of state of metals], Teplofizika vysokikh temperatur. 20 (3) (1982) 447–451.

[8] **B.J. Alder, T.E. Wainwright,** Molecular dynamics by electronic computers, Transport processes in statistical mechanics, Proceedings of Symposium (1958) 97–131.

[9] **F. de Hoffmann, E. Teller,** Magneto-hydrodynamic shocks, Physical Review. 80 (4) (1950) 692.

[10] **Y.T. Lee, R.M. More,** An electron conductivity model for dense plasmas, Physics of Fluids. 27 (5) (1984) 1273–1286.

[11] **I.M. Bespalov, A.Ya. Polishchuk,** Metodika rascheta transportnykh koeffitsiyentov plazmy v shirokom diapazone parametrov [Calculation procedure for plasma's transportation coefficients in the wide range of parameters], Moscow, IVTAN, 1988.

[12] **A.A. Samarskiy, Yu.P. Popov,** Raznostnyye metody resheniya zadach gazovoy dinamiki [Finite difference methods of solutions of the problems of gas dynamics], 3d ed., Moscow, Nauka, Gl. red. fiz.-mat. lit., 1992.

[13] **B.N. Chetverushkin,** Matematicheskoye modelirovaniye zadach dinamiki izluchayushchego gaza [Simulation of the problems of the radiating gas dynamics], Moscow, Nauka, 1985.

[14] **A. Grinenko, Y.E. Krasik, S. Efimov, et al.,** Nanosecond time scale, high power electrical wire explosion in water, Physics of Plasmas. 13 (4) (2006) 042701.

[15] **Sasaki T, Yano Y., Nakajima M., et al.,** A comparative study of equation of state and conductivity for warm dense matter using pulsed-power wire discharges in water, Journal of Physics: Conference Series, IOP Publishing. 112 (4) (2008) 042026.

[16] **R.H. Cole, R. Weller,** Underwater explosions, Physics Today. 1 (6) (1948) 35.

[17] **W. Wagner, A. Pruß,** The IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use, Journal of Physical and Chemical Reference Data. 31 (2) (2002) 387 −535.

[18] **F.A. Baum, L.P. Orlenko, K.P. Stanyukovich, et al.,** Fizika vzryva [Physics of explosions], Moscow, Nauka, 1975.

Received 29.09.2016, accepted 08.06.2017.

THE AUTHORS

RYAKHOVSKIY Aleksey I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
alexey.i.ryakhovskiy@mail.ioffe.ru

ANTONOV Valeriy I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
antonovvi@mail.ru

KALININ Nikolay V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
nvkalinin@rambler.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

DOI: 10.18721/JPM.10304
УДК 681.51:621:391

МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ ИЗМЕРЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ДВИЖЕНИЯ СПУСКАЕМОГО АППАРАТА В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ СОСТАВА ЛУННОЙ ПОВЕРХНОСТИ

И.А. Кислицына[1], Г.Ф. Малыхина[2]

[1]Центральный научно-исследовательский и опытно-конструкторский институт робототехники и технической кибернетики, Санкт-Петербург, Российская Федерация

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

Предложен метод измерения параметров движения аппарата, спускаемого на поверхность Луны. С помощью четырех приемников детектируются рассеянные на поверхности гамма-кванты, излучаемые радиоактивным источником, в условиях неопределенности элементного состава подстилающей лунной поверхности. Наличие радиолокационной системы на спускаемом аппарате позволяет выполнять адаптацию гамма-лучевого высотомера к составу лунного грунта. Предложена математическая модель измерительной системы, и получены зависимости интенсивности потоков регистрируемых гамма-квантов от высоты и углов наклона спускаемого аппарата. Модель позволяет выполнять анализ взаимного положения источника и детекторов излучения, анализировать влияние состава подстилающей поверхности. Алгоритм измерения использует рекурсивную нейронную сеть, которую предложено обучать заранее и адаптировать в процессе посадки спускаемого аппарата.

Ключевые слова: спускаемый аппарат; рассеянное гамма-излучение, адаптация; состав лунного грунта

Ссылка при цитировании: Кислицына И.А., Малыхина Г.Ф. Моделирование системы измерения параметров движения спускаемого аппарата в условиях неопределенности состава лунной поверхности // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 38–51. DOI: 10.18721/JPM.10304

SIMULATION OF ON-THE-FLY MEASURING SYSTEM OF A DESCENT MODULE UNDER UNCERTAINTY OF THE LUNAR-SURFACE COMPOSITION

I.A. Kislitsyna[1], G.F. Malykhina[2]

[1]State Scientific Center for Robotics and Technical Cybernetics, St. Petersburg, Russian Federation

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

The measurement method for determination of the motion parameters of the module de-orbiting upon the lunar surface has been suggested. The surface-scattered gammas emitted by a radioactive source are detected using four receptors under uncertainty of the lunar-soil's elemental composition. The radar-tracking system's exist in the module allows adaptation of the gamma-ray altimeter to the lunar-soil composition. A mathematical model of the measuring system has been put forward, and dependences of the gammas' flux level on the module altitude and the angle of the slanted surface were obtained. The model makes possible analyzing the relative position of the radioactive source and the receptors and the composition effect of

the substrate. The measurement algorithm uses a recursive neural network, which is proposed to train in advance and adapt during the module landing.

Key words: descent module; scattered gamma radiation; adaptation; lunar-soil composition

Citation: I.A. Kislitsyna, G.F. Malykhina, Simulation of on-the-fly measuring system of a descent module under uncertainty of the lunar-surface composition, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 38–51. DOI: 10.18721/JPM.10304

Введение

Для успешной посадки спускаемого аппарата на поверхность Луны требуются достаточно точные управляющие воздействия на двигатели мягкой посадки. Для этого необходимо обеспечить максимальную точность измерения параметров движения спускаемого аппарата: его скорости, высоты над поверхностью и угла наклона подстилающей поверхности.

Для измерения высоты над поверхностью применяются электромагнитные излучения разного вида и частоты: лазерное, радиоволновое, инфракрасное, гамма-лучевое, рентгеновское; используются фото- и видеокамеры [1, 2].

Лазерные системы использованы, например, в совместной программе «Bepi-Colombo» Европейского космического агентства (ЕКА), в программе космической автоматической миссии к Меркурию Японского агентства аэрокосмических исследований (JAXA – Japan Aerospace Exploration Agency), в программе NASA по картографированию поверхностей Луны и Меркурия, при заборе и доставке на Землю образцов грунта с поверхности Фобоса (спутник Марса).

С помощью радиолокационной системы была осуществлена посадка марсохода «Opportunity», разработанного NASA для исследования поверхности Марса. Указанная система выполняла измерения высоты до полутора метров, после чего подавался сигнал на фотокамеру «DIMES» (Descent Image Motion Estimation Subsystem) для определения горизонтальной скорости.

Измерение высот межпланетных автоматических станций «Фобос-1» и «Фобос-2» планировалось осуществить с помощью рентгеновского высотомера-вертиканта, который работал в наносекундном диапазоне длин волн. Угловые координаты измерялись время-импульсным способом по разнице времени приема сигналов двумя парами разнесенных детекторов. Однако обе миссии по исследованию спутника Марса закончились неудачно.

Несмотря на то, что все перечисленные приборы, разные использованные физические принципы активно применялись и применяются в авиакосмической технике, существуют некоторые факторы, препятствующие точному измерению параметров спуска.

Во-первых, в связи с острой фокусировкой лазерного излучения, неровности поверхности могут привести к значительным погрешностям измерения.

Во-вторых, ограничивающими факторами применения радиовысотомеров выступают как невозможность распространения электромагнитных волн через плазму работающих двигателей мягкой посадки, так и увеличение погрешностей измерения по мере уменьшения высоты.

В-третьих, при работе реактивных двигателей посадки над лунной поверхностью поднимается пыль, а это ограничивает применение систем, чувствительных к прозрачности среды.

В-четвертых, применение высотомеров на основе рентгеновского излучения ограничено необходимостью охлаждения анода рентгеновской трубки, так как большая часть кинетической энергии электронов превращается в тепло и требуются значительные затраты энергии на охлаждение.

В отечественной и зарубежной литературе имеются сведения о целесообразности использования интегрированных систем измерения параметров движения космических аппаратов. Создание системы, состоящей из группы приборов, каждый из которых измеряет определенные параметры движения спускаемого аппарата, рассмотрено в статье [3]. Измерение углов

наклона спускаемого аппарата, его высоты над подстилающей поверхностью и обнаружение препятствий выполняются с помощью звездных датчиков, гироскопов, акселерометров, высотомеров, датчиков солнечного излучения и лунных датчиков [4]. Примером объединения системы оптической навигации и инерциальной системы может служить система прилунения, описанная в статье [5]. Соединение нескольких приборов, в которых используются разные физические принципы, в одну систему позволяет снизить погрешности измерений, сделать возможным применение системы в различных условиях среды, расширить диапазон измеряемых параметров.

В настоящем исследовании для измерения параметров движения спускаемого аппарата предлагается объединить радиолокационную и гамма-лучевую системы (работа последней основана на регистрации интенсивности рассеянного гамма-излучения).

При этом измерения на высотах от 500 до 10 м можно выполнять с помощью радиолокационной системы, а на высотах от 15 до 0 м – с помощью гамма-лучевой. Последняя позволяет выполнять измерения через обшивку спускаемого аппарата в условиях плазмы двигателей мягкой посадки. Эта система практически не чувствительна к слою пыли на поверхности планеты и к случайным препятствиям; она обеспечивает достаточно высокую точность измерений на малых высотах, так как зависит лишь от активности источника излучения.

Задача исследования

Гамма-лучевая система для обеспечения мягкой посадки спускаемого аппарата, разработанная в Центральном научно-исследовательском институте робототехники и технической кибернетики (ЦНИИ РТК) [6], успешно применяется в современных системах посадки на Землю. Для разработки системы посадки на поверхность Луны требуется выполнить доработку существующей системы, ввиду других условий такой посадки.

Например, в условиях посадки на Луну отсутствие атмосферы не позволяет использовать парашюты, и, следовательно, движение становится менее равномерным, чем на Земле. Кроме того, солнечный ветер обуславливает высокий радиационный фон. Далее, места посадки на Землю, в отличие от таковых на Луну, достаточно хорошо изучены, получены характеристики грунтов, определяющие свойства рассеяния гамма-квантов [7]. Неопределенность же состава грунта в месте посадки приводит к уменьшению точности определения положения спускаемого аппарата относительно поверхности, поэтому требуется дополнительная адаптация гамма-лучевой системы к типу грунта. На высотах от 15 до 10 м радиолокационная и гамма-лучевая системы могут работать одновременно, что создает возможность адаптации последней к составу лунного грунта в месте посадки.

Задачей настоящего исследования является разработка метода и алгоритма измерения параметров движения спускаемого аппарата, использующих принцип мягкого перехода от измерений с помощью радиолокационной системы к измерениям с помощью гамма-лучевой системы на основе адаптации последней к составу грунта в районе посадки.

Моделирование системы измерения малых высот

Фактор состава грунта подстилающей поверхности. Физические величины, характеризующие рассеяние гамма-квантов, зависят от структурного и химического состава подстилающей поверхности. Частицы грунта, расположенные на поверхности Луны, представляют собой крупные обломки и редкие выходы пород скального основания, которые постепенно покрываются микрократерами размером от долей микрометров до нескольких сантиметров [8, 9]. В результате метеоритной бомбардировки, ультрафиолетовых лучей, солнечного ветра и температурного выветривания, на поверхности Луны образовался покров из рыхлого материала, называемого реголитом, который состоит из обломков коренных пород и вторичных частиц, сформированных при ударно-взрывной переработке вещества (так называемая брекчия и частицы стекла) [10]. Средняя толщина слоя реголита, ко-

торый покрывает всю лунную поверхность, колеблется от 4 – 5 м в лунных морях до 10 – 15 м на материках.

Химический состав реголита отражает состав нижезалегающих пород, но в нем присутствуют другие вещества и минералы [11]. Основные минералы лунных пород – это плагиоклаз (твердый раствор альбита $NaAlSi_3O_8$ и анортита $CaAl_2Si_2O_8$), ортопироксен $(Mg, Fe)SiO_3$, клинопироксен $(Ca,Mg,Fe)SiO_3$, оливин $(Mg, Fe)_2SiO_4$, ильменит $FeTiO_3$ и минералы группы шпинели ($FeCr_2O_4$-Fe_2TiO_4-$FeAl_2O_4$).

Среди пород материковой породы Луны выделяют серию железистых анортозитов, магнезиальную интрузивную серию (содержит 7 – 45% MgO_2, 2 – 29% Al_2O_3, 0,5% TiO_2), щелочную интрузивную серию (0,5 – 5% TiO_2, 0,4 – 17% FeO, 0,3 – 0,5% K_2O, 65 – 75% SiO_2) и серию редкоземельных неморских базальтов (15 – 24% Al_2O_3, 9 – 15% FeO) [12].

Лунные моря представляют собой вулканические (лавовые) равнины, заполняющие понижения в рельефе материков, причем понижения обычно являются днищами крупнейших ударных кратеров и бассейнов. Среди морских пород Луны преобладают морские базальты; их исследователи делят на несколько групп по признаку содержания титана, алюминия и калия.

Таким образом, состав грунта подстилающей поверхности, определяющий интенсивность рассеяния гамма-квантов, может быть самым разным в местах посадки. С целью выявления зависимости данных регистрации рассеянного гамма-излучения от высоты над подстилающей поверхностью, от углов наклона спускаемого аппарата к этой поверхности и от состава грунта, нами было выполнено моделирование процессов взаимодействия потока гамма-квантов с лунной поверхностью и его регистрации.

Моделирование процесса регистрации рассеянного гамма-излучения. При моделировании процесса взаимодействия потока гамма-квантов с лунной поверхностью использован примерный состав грунта, приведенный в таблице.

Дифференциальное сечение $d\sigma_\Theta$ компто-

Таблица

Характеристики основных лунных пород

Наименование грунта	Химический состав	Эффективный атомный номер	Концентрация электронов	Плотность	Комптоновское сечение
		Z_{eff}	n_e, 10^{23}	ρ, г/см^3	σ_0, 10^{-4} см^2
Альбит	$NaAlSi_3O_8$	11,170	2,985	2,610	2,217
Ильменит	$FeTiO_3$	22,149	2,858	4,720	4,209
Оливин	Fe_2SiO_4	23,103	2,896	3,270	4,390
	Mg_2SiO_4	14,411	1,668	9,097	1,599
Анортит	$CaAl_2Si_2O_8$	13,385	2,987	3,270	2,659
Пироксен	$Na_2Si_2O_6$	11,027	3,525	8,846	2,585
	$Ca_2Si_2O_6$	15,587	3,007	10,372	3,116
Ортопироксен	$MgSi_2O_3$	6,990	2,435	6,990	2,742
	$FeSi_2O_3$	8,397	2,497	8,397	3,282
Клинопироксен	$CaSiO_3$	15,587	3,007	5,186	3,116
	$MgSiO_3$	14,485	2,889	4,482	2,889
	$FeSiO_3$	5,890	2,282	20,783	3,154
Шпинель	$FeCr_2O_4$	22,814	2,905	9,993	4,408
	Fe_2TiO_4	22,995	2,852	7,487	4,326
	$FeAl_2O_4$	19,891	2,663	7,759	4,326

новского рассеяния гамма-квантов на один электрон, отнесенное к единице телесного угла $d\Omega$, выражается формулой Клейна – Нишины – Тамма:

$$\frac{d\sigma_\Theta}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2}\left[\frac{1}{1+\alpha(1-\cos\Theta)}\right]^2 \times \times\left[1+\cos^2\Theta+\frac{\alpha^2(1-\cos\Theta)^2}{1+\alpha(1-\cos\Theta)}\right], \quad (1)$$

где Θ – угол рассеяния гамма-квантов, r_e – классический радиус электрона, α – отношение энергии гамма-кванта E_γ к энергии покоящегося электрона $m_e c^2$.

Классический радиус электрона

$$r_e = ar_c \approx 2{,}8179 \text{ (фм)},$$

где a = 1/137,04 (константа), r_c – длина волны красной границы фотоэффекта; $r_c = \hbar/m_e c$ (m_e – масса электрона, c – скорость света).

Величина $\alpha \approx 1{,}129$ при значении E_γ = 660 кэВ (энергия первичного гамма-излучения).

При разработке системы измерения параметров движения спускаемого аппарата представляют интерес углы рассеяния в диапазоне от 90 до 180 град. При уменьшении энергии излучения источника вероятность рассеяния в рассматриваемом диапазоне углов возрастает. Однако при уменьшении энергии увеличивается коэффициент массового поглощения гамма-квантов, а следовательно, уменьшается глубина рассеивающего слоя. Поэтому целесообразно в качестве источника использовать изотоп Cs^{137} с энергией 660 кэВ. При такой величине энергии вероятность рассеяния меньше зависит от угла рассеяния в диапазоне углов от 90 до 180 град.

Для смеси веществ на лунной поверхности можно вычислить эффективный атомный номер грунта подстилающей поверхности по формуле:

$$Z_{eff} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{6}(\eta_i Z_i)^4}{\sum_{i=1}^{6}(\eta_i Z_i)}}, \quad (2)$$

где η_i – доля i-го элемента в смеси веществ грунта, Z_i – атомный номер i-го элемента грунта.

Концентрация электронов подстилающей поверхности следует выражению

$$n_e = \sum_{i=1}^{6}\eta_i \frac{N_A}{M_{Ai}} Z_i, \quad (3)$$

где N_A – число Авогадро, M_{Ai} – атомная масса элемента грунта.

Комптоновское сечение выражается как

$$\sigma_0 = 8{,}46 \cdot 10^{-25} n_e Z_{eff}, \quad (4)$$

где n_e – количество электронов, Z_{eff} – эффективный атомный номер рассеивающего вещества.

Интенсивность рассеянного гамма-излучения I_Θ в зависимости от интенсивности первичного излучения I_0, угла рассеяния Θ на расстоянии r от рассеивающего электрона рассчитывается по следующей формуле:

$$I_\Theta = I_0 \frac{3\sigma_0}{16\pi r^2}\frac{(1+\cos^2\Theta)}{[1+\alpha(1-\cos^2\Theta)]^3} \times \times\left\{1+\frac{\alpha(1-\cos\Theta)^2}{[1+\alpha(1-\cos\Theta)]\cdot(1-\cos\Theta)}\right\}. \quad (5)$$

На рис. 1 представлен график угловой зависимости нормализованного уровня гамма-излучения, т. е. отношения интенсивности этого излучения, рассеянного под углом Θ, к интенсивности первичного излучения при разных значениях расстояния до детектора:

$$\lg\left(\frac{I_\Theta}{I_0}\right) = \lg\left(\frac{3\sigma_0}{16\pi r^2}\frac{(1+\cos^2\Theta)}{[1+\alpha(1-\cos^2\Theta)]^3} \times \times\left\{1+\frac{\alpha(1-\cos\Theta)^2}{[1+\alpha(1-\cos\Theta)]\cdot(1-\cos\Theta)}\right\}\right). \quad (6)$$

В результате выполненных расчетов установлено, что интенсивность рассеянного излучения снижается при увеличении угла рассеяния. При значениях угла рассеяния в рабочем диапазоне от 90 до 180 град интенсивность гамма-квантов падает более, чем в 10 раз, и одновременно ее зависимость от угла рассеяния становится менее выраженной.

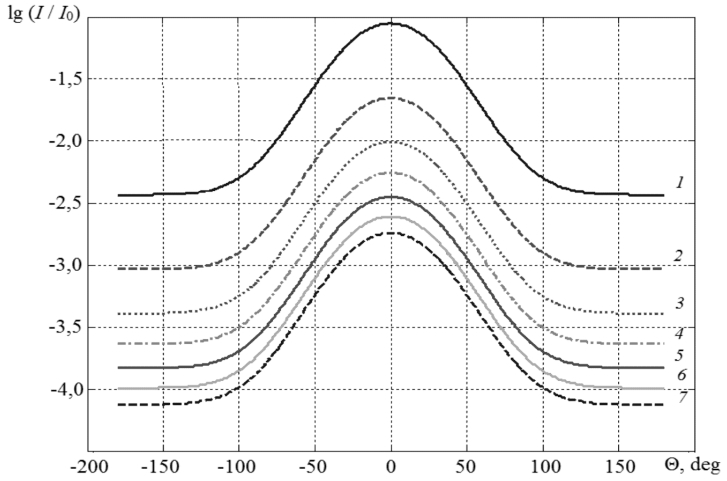


Рис. 1. Зависимости нормализованного уровня гамма-излучения от угла рассеяния гамма-квантов при различных расстояниях r от рассеивающего элемента; r = 0,5 (кривая *1*), 1,0 (*2*), 1,5 (*3*), 2,0 (*4*), 2,5 (*5*), 3,0 (*6*), 4,0 (7)

Энергия рассеянного излучения соотносится с углом рассеяния следующим образом:

$$E = \frac{E_\gamma}{1 + (E_\gamma / m_e c^2)(1 - \cos\Theta)}. \qquad (7)$$

Зависимость этой энергии от угла рассеяния для источников гамма-квантов с энергией $E_\gamma = 440 - 660$ кэВ, в том числе для Cs^{137} ($E_\gamma = 660$ кэВ), показана на рис. 2.

Энергия гамма-квантов убывает с ростом угла их рассеяния. При значениях угла рассеяния от 90 до 180 град энергия рассеянного излучения снижается по сравнению с энергией первичного и приближается к 200 кэВ. Энергия рассеянных гамма-квантов в рабочем диапазоне становится менее зависимой от энергии источника.

Фактор размещения источников и приемников излучения на спускаемом аппарате. Взаимное расположение составных частей гамма-лучевой системы (источника гамма-излучения и двух приемников, включающих сцинтилляционные детекторы) пока-

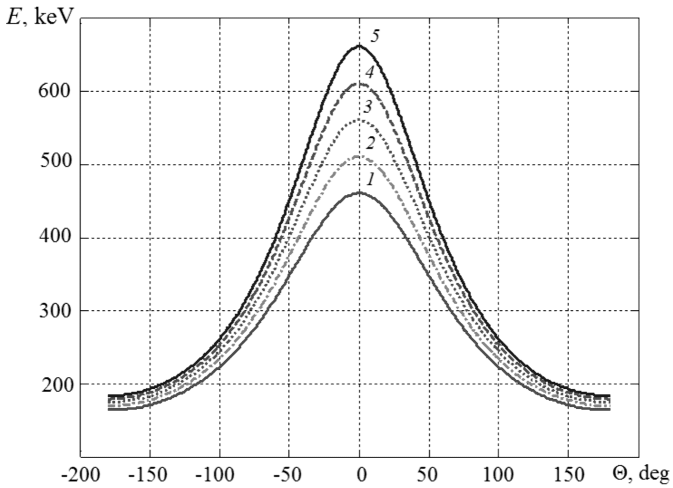


Рис. 2. Зависимости энергии рассеянного гамма-излучения от угла рассеяния при различных значениях энергии источников гамма-квантов E_0, кэВ: 460 (*1*), 510 (*2*), 560 (*3*), 610 (*4*), 660 (*5*)

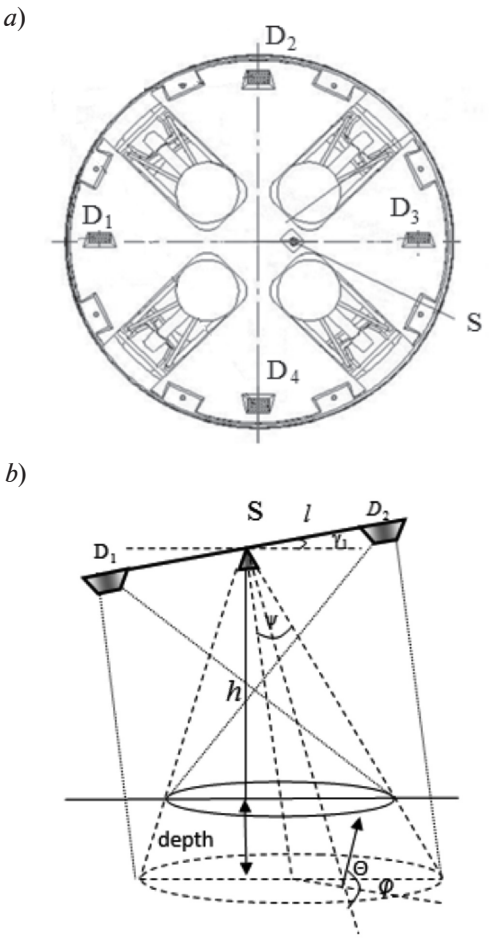


Рис. 3. Проекции расположения источника (S) и приемников излучения (D_1 – D_4) на горизонтальную (*a*) и вертикальную (*b*) плоскости; depth – глубина залегания в грунт рассеивающего элемента

зано на рис. 3. Источник гамма-излучения размещен ближе к центру, а два детектора (D_1, D_2) расположены по краям, на расстоянии l от источника. Спускаемый аппарат может находиться под некоторым углом к подстилающей поверхности, причем угол наклона оси, на которой расположены два приемника, обозначен как γ; h – текущее значение высоты спускаемого аппарата, Ψ – угол падения прямого потока гамма-квантов, φ – угол между проекцией оси, где расположен детектор D_1, и радиусом, проходящим через точку падения луча; Θ – угол рассеяния гамма-квантов, которые достигают детектора D_1.

Зависимости крайних углов регистрации гамма-квантов детекторами от высоты имеют вид:

$$\Theta_1 = \pi - \operatorname{arctg}\frac{l}{h};\ \ \Theta_2 = \pi - \operatorname{arctg}\frac{l+w}{h},$$

где w – ширина детектора; разность Θ_1 и Θ_2 определяет диапазон углов регистрации рассеянных гамма-квантов на определенной высоте (диапазон зависит от ширины детектора).

С увеличением высоты спускаемого аппарата угол регистрации рассеянных гамма-квантов растет, приближаясь к 180 град. При малых высотах угол регистрируемых гамма-квантов уменьшается, приближаясь к 90 град. Наклон спускаемого аппарата по отношению к плоскости подстилающей поверхности определяется двумя углами: γ_1 и γ_2 – углы наклона осей, соединяющих детекторы D_1 с D_2 и D_3 с D_4 соответственно.

Сечение комптоновского рассеяния на один электрон, в границах телесного угла излучения, определяется путем интегрирования по углу рассеяния:

$$\sigma(\Theta_1,\Theta_2) = \int_{\Theta_1}^{\Theta_2} \frac{r_e^2}{2}\left[\frac{1}{1+\alpha(1-\cos\Theta)}\right]^2 \times \left[1+\cos^2\Theta + \frac{\alpha^2(1-\cos\Theta)^2}{1+\alpha(1-\cos\Theta)}\right] d\Theta. \quad (8)$$

Для оценки результатов регистрации детекторами величины интенсивности потока гамма-квантов, рассеянных от лунной поверхности, выполняется расчет геометрии гамма-лучевой системы. Квадрат расстояния от рассеивающего элемента до детектора определяется по формуле

$$r^2 = h^2\operatorname{tg}^2\Psi + l^2\cos^2\gamma - 2hl\cos\gamma\operatorname{tg}\Psi + (h + l\sin\gamma)^2. \quad (9)$$

Косинус угла φ между осью расположения рассеивающего элемента и детектора излучения следует выражению

$$\cos\varphi = \frac{(h+l\sin\gamma)^2 + (h\operatorname{tg}\psi)^2}{hl\cos\gamma\operatorname{tg}\psi} + \frac{(l\cos\gamma)^2 - r^2}{hl\cos\gamma\operatorname{tg}\psi}. \quad (10)$$

Косинус угла рассеяния выражается

следующей формулой:

$$\cos(\pi - \Theta) = \frac{h^2(1 + \mathrm{tg}^2\Psi) + r^2 - l^2}{2rh\sqrt{(1 + \mathrm{tg}^2\psi)}}. \quad (11)$$

Детектор регистрирует гамма-кванты, рассеянные рассеивающим элементом на лунной поверхности, положение которого характеризуется значением угла Ψ для потока падающего прямого излучения, и значением угла φ, характеризующего положение рассеивающего элемента на плоскости. Диапазон значений угла Ψ определяется углом коллимации источника $0 \le \Psi \le \Psi_{\max}$, а значения угла φ лежат в диапазоне $[-\pi, \pi]$. Расстояние от проекции центра на плоскость рассеяния до рассеивающего элемента определяется по формуле $\rho = h\,\mathrm{tg}\,\Psi$.

Интенсивность рассеянного гамма-излучения, воспринимаемого одним из детекторов (например, D_1) зависит от угла наклона γ оси расположения детектора над подстилающей поверхностью, высоты h, расстояния r между источником и детектором излучения, угла коллимации $\Psi_{\max}$. Интенсивность потока детектируемых гамма-квантов можно получить интегрированием по объему рассеивающего вещества:

$$I_d = \int_{dpt}\int_{\varphi}\int_{\rho} e^{-\mu(E)\cdot\rho\cdot dpt} I_\Theta(r, l, \gamma, \Psi, h, \varphi, \Theta) \times \times d(dpt)\, d\varphi d\rho, \quad (12)$$

где $\mu(E)$ – коэффициент массового поглощения, зависящий от энергии гамма-квантов; ρ – плотность слоя лунной поверхности; dpt – глубина, на которой расположен рассеивающий элемент.

Интенсивность потока рассеянных гамма-квантов зависит от взаимного расположения источника и приемников излучения. Ее можно вычислить с использованием выражений (5), (9) – (11) по формуле

$$I_\Theta(r, l, \gamma, \Psi, h, \varphi, \Theta) = = I_0 \frac{3\sigma_0}{16\pi r^2} \cdot \frac{(1 + \cos^2\Theta)}{[1 + \alpha(1 - \cos^2\Theta)]^2} \times \times \left\{1 + \frac{\alpha^2(1 - \cos\Theta)^2}{[1 + \alpha(1 - \cos\Theta)]\cdot(1 + \cos^2\Theta)}\right\}. \quad (13)$$

Количество электронов в объеме dV определяется по формуле

$$n_e(dV) = \frac{dV \cdot N_A}{M_A} \cdot \rho, \quad (14)$$

где ρ – плотность грунта, N_A – число Авогадро, M_A – молекулярная масса.

Значение массового коэффициента поглощения кремнием гамма-квантов с энергией 660 кэВ $\mu_1 = 0,0802\ \text{см}^2/\text{г}$, а значение такого коэффициента для гамма-квантов, обладающих энергией 200 кэВ после рассеяния, $\mu_2 = 0,123\ \text{см}^2/\text{г}$.

Поток гамма-квантов, достигающих детектор, ослабляется в результате рассеяния, в соответствии с выражением

$$J_{\text{detect}} = J \cdot e^{-(\mu 1 + \mu 2)\cdot\rho\cdot(h + dpt)}, \quad (15)$$

где ρ – плотность грунта, $(h + dpt)$ – расстояние от источника до рассеивающего элемента.

Анализ результатов моделирования

В соответствии с приведенным выше описанием различных факторов, влияющих на процессы взаимодействия потока гамма-квантов с лунной поверхностью и его регистрации, были представлены стадии моделирования гамма-лучевой системы при различных высотах и углах наклона спускаемого аппарата.

В результате моделирования получены зависимости интенсивности потока рассеянных гамма-квантов, попадающих на детектор, от высоты спускаемого аппарата над лунной поверхностью, при различных значениях угла наклона спускаемого аппарата (рис. 4). Видно, что интенсивность потока гамма-квантов повышается по мере снижения высоты над поверхностью Луны и уменьшения угла наклона спускаемого аппарата относительно этой поверхности. Влияние угла наклона на принимаемый сигнал становится заметным только на небольших высотах ($h < 5$ м).

Таким образом, при малых значениях высоты ($h < 1$ м) точность измерений высоты спуска увеличивается, что, несомненно, является достоинством метода регистрации. Чтобы найти значение угла наклона γ_1 спускаемого аппарата над подстилающей поверхностью, целесообразно измерять

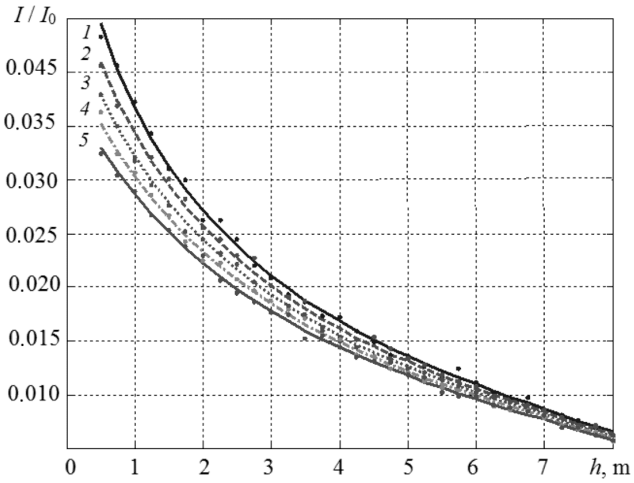


Рис. 4. Зависимости относительной средней интенсивности потока гамма-квантов, регистрируемого детектором спускаемого аппарата, от высоты над подстилающей поверхностью при различных значениях угла γ – наклона оси расположения детектора; $\gamma = 0°$ (*1*), 5,60° (*2*), 11,25° (*3*), 16,88° (*4*), 22,50° (*5*)

и вычислять разности значений потоков гамма-квантов, регистрируемых двумя детекторами D_1 и D_2.

Влияние состава грунта. Важным достоинством проведенного моделирования является возможность оценить влияние состава грунта. В соответствии с соотношением (4), этот состав определяет величину комптоновского сечения; при этом значение последнего может изменяться почти в два раза. Если же не учитывать состав грунта, то погрешность измерения высоты спускаемого аппарата над подстилающей поверхностью может достигать десятков процентов. В связи с этим требуется разработать алгоритм измерения параметров движения спускаемого аппарата с целью их адаптации к составу лунной поверхности.

Адаптивный алгоритм измерения параметров движения спускаемого аппарата

Относительная интенсивность потока рассеянных гамма-квантов зависит от состава грунта в месте посадки. В результате экспедиций на Луну состав грунта был изучен достаточно хорошо на некоторых участках ее поверхности – в местах посадки исследовательских модулей [8]. Тем не менее, посадку необходимо успешно производить и в других, неисследованных ранее, областях, например, при отклонении от расчетного места посадки.

Для обеспечения посадки в неисследованных областях разработан алгоритм измерения, который позволяет адаптироваться к месту посадки. Он объединяет показания двух высотомеров, работающих на разных физических принципах: радиолокации и эффекта Комптона. Кроме того, два высотомера работают на разных диапазонах высот. В процессе приближения к поверхности, погрешности измерения с помощью радиовысотомера возрастают, а погрешности гамма-лучевого высотомера снижаются. В интервале высот от 20 до 10 м работают одновременно два высотомера, показания одного из которых, как было показано, зависят от состава грунта. Это дает возможность выполнять адаптацию алгоритма измерения гамма-лучевого высотомера с учетом показаний радиовысотомера и последующим плавным переключением на показания только одного гамма-лучевого высотомера.

Предлагается использовать нейросетевой алгоритм измерения параметров движения. Важное свойство нейронной сети состоит в способности к обучению и к обобщению полученных знаний [13]. Обученная на ограниченном множестве специальных вы-

борок, нейронная сеть обобщает накопленную информацию и вырабатывает ожидаемую реакцию применительно к данным, не участвовавшим в процессе обучения [14]. Нейронная сеть способна самостоятельно определять неинформативные для анализа параметры и производить их отсев. В связи с этим пропадает необходимость дополнительного анализа информационного вклада входных данных. Нейронные сети можно переучить в новых условиях окружающей среды, описываемых колебаниями параметров этой среды. Для нестационарной среды (ее свойства изменяются с течением времени) можно использовать нейронные сети, которые способны переучиваться в реальном времени, причем чем выше адаптивные способности системы, тем более устойчивой будет ее работа в нестационарной среде [15]. Возможность параллельной обработки информации современными процессорами обеспечивает быстродействие нейронных сетей. Благодаря этой способности, при большом количестве межнейронных связей достигается значительное ускорение процесса обработки информации, причем в реальном времени.

Чтобы уменьшить влияние типа грунта подстилающей поверхности на точность измерений, предлагается использовать нелинейную авторегрессионную сеть с внешними входами, обозначаемую обычно как NARX [16] (рис. 5). Для обучения был использован алгоритм Бройдена – Флетчера – Гольдфарба – Шанно. Данные, полученные в результате моделирования, были использованы для предварительного обучения нейронной сети, при значении угла наклона спускаемого аппарата $\gamma = 0$ и предполагаемом составе грунта. Итак, при спуске аппарата в интервале высот от 20 до 10 м работают два высотомера. Показания радиовысотомера используются для адаптации сети.

Предполагается, что он дает показание высоты

$$H_{radio}(i) = H(i) + \Delta_i$$

с погрешностью Δ_i, которая имеет случайный характер и возрастает вплоть до 60 %, когда приближается к значению высоты 10 м над поверхностью Луны:

$$\Delta_i = 0,3 \cdot \varepsilon_i(21 - H(i)), i = 1, 2, ..., N; \quad H = 20, ..., 10, \tag{16}$$

где ε_i – нормально распределенная случайная величина.

Погрешность измерения высоты с помощью гамма-лучевого высотомера моделировалась как случайная величина, распределенная по закону Пуассона.

Результаты моделирования зависимости интенсивности детектируемого гамма-излучения от высоты в диапазоне от 20 до 10 м при разных значениях величины σ_0, характеризующей состав грунта подстилающей поверхности, показаны на рис. 6.

Анализ представленных данных показывает, что зависимость интенсивности

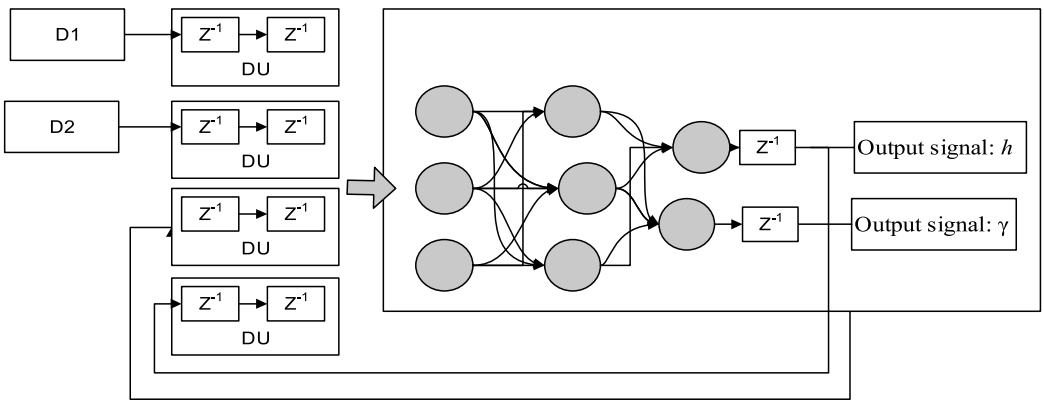


Рис. 5. Нейронная сеть NARX, используемая для измерения высоты h и угла наклона γ спускаемого аппарата к подстилающей лунной поверхности:
D_1, D_2 – детекторы, DU (delay unit) – блоки задержек, Output signal – выходной сигнал

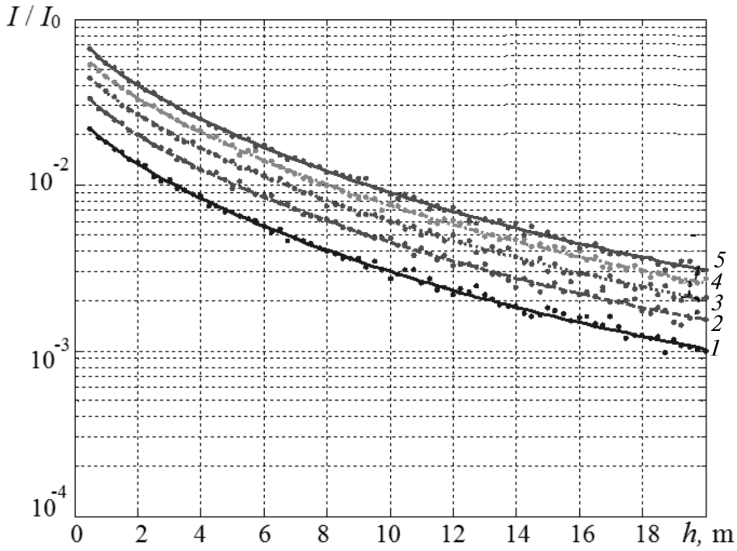


Рис. 6. Зависимости нормализованного уровня детектируемого гамма-излучения от высоты спускаемого аппарата над подстилающей поверхностью при различных составах лунного грунта (значениях показателя $k\sigma_0$);
k = 0,50 (*1*), 0,75 (*2*), 1,00 (*3*), 1,25 (*4*), 1,50 (*5*). Углы наклона положительные

детектированного излучения от состава грунта может приводить к существенным методическим погрешностям измерения высоты и угла наклона спускаемого аппарата. Поэтому необходимо выполнить адаптацию нейронной сети к разным составам грунта.

На рис. 7 показана в качестве примера структурная схема процесса измерения параметров, которые обеспечивают требуемое движение спускаемого аппарата над лунной поверхностью. Это необходимо для управления процессом его успешной посадки. На высотах от 20 до 10 м выходные сигналы детекторов рассеянного гамма-излучения $\{I_1, I_2, I_3, I_4\}$ используются для адаптации нейронной сети на основе измерения высоты с помощью радиовысотомера H_{radio}. Для устранения влияния углов наклона спускаемого аппарата мы рекомендуем вы-

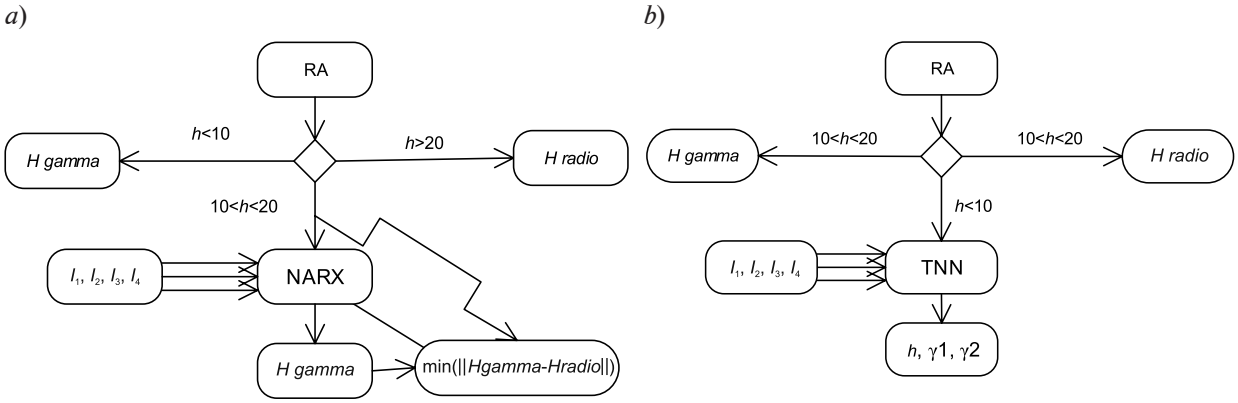


Рис. 7. Схемы измерения и адаптации параметров движения на разной высоте спускаемого аппарата от лунной поверхности: *a* – адаптация алгоритма на высоте от 20 до 10 м; *b* – измерение параметров движения после адаптации;
$I_1 - I_4$ – интенсивности сигналов четырех детекторов; RA – радиовысотомер (R– радио); TNN – измерение с помощью обученной нейронной сети, адаптированной к типу грунта поверхности

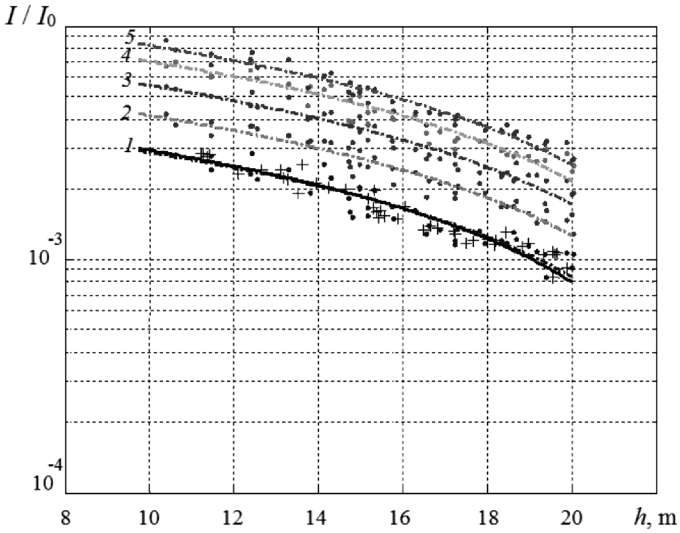


Рис. 8. Результаты адаптации алгоритма к составу лунной поверхности: сплошная кривая *1* и символы (+) относятся к адаптированной зависимости при $k = 0{,}50$; $k = 0{,}50$ (*1*), 0,75 (*2*), 1,00 (*3*), 1,25 (*4*), 1,50 (*5*)

полнять суммирование выходных данных с четырех детекторов. Адаптация нейронной сети обеспечивает получение сети, соответствующей текущему значению σ_0 комптоновского рассеяния и характеризующей состав грунта поверхности.

Для измерения на высотах от 10 до 0,3 м предлагается использовать обученную нейронную сеть TNN (Trained Neural Network), адаптированную к составу грунта.

На рис. 8 представлены результаты адаптации алгоритма измерения на основе модели рассеяния гамма-квантов лунной поверхностью. Штриховыми линиями показаны зависимости среднего значения интенсивности детектируемых гамма-квантов на высотах 20 – 10 м при значениях комптоновского рассеяния гамма-квантов, относящихся к грунтам разного состава – $\{0,50\sigma_0,\ 0,75\sigma_0, 1,00\sigma_0,\ 1,25\sigma_0, 1,50\sigma_0\}$. Сплошной линией в качестве примера показан результат адаптации алгоритма для случая $0{,}50\sigma_0$. Хорошее совпадение кривых, полученных при моделировании и адаптации, позволяет заключить, что предложенный нами алгоритм позволяет выполнять измерения параметров движения спускаемого аппарата при разных составах лунного грунта.

Заключение

С целью разработки систем посадки спускаемых аппаратов на поверхность планет с неопределенным составом их поверхностей, в связи с большой сложностью выполнения натурных экспериментов, предложена математическая модель, позволяющая определять характеристики измерительной системы. Модель позволяет выполнять анализ геометрии расположения источника и детекторов излучения, оценивать интенсивности потоков гамма-квантов, достигающих детекторы, анализировать влияние состава подстилающей поверхности.

Показано, что состав подстилающей поверхности оказывает существенное влияние на данные измерений гамма-лучевой системы. В связи с этим показания гамма-лучевых высотомеров необходимо адаптировать к месту посадки. Предложенный нейросетевой алгоритм измерения позволяет выполнять адаптацию измеряющих систем на средних высотах с учетом показаний радио- и гамма-лучевого высотомеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке ЦНИИ Робототехники и технической кибернетики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Поляков В.М., Покровский В.П., Сомс Л.Н.** Лазерный передающий модуль с переключаемой диаграммой направленности для дальномера космического аппарата «Фобос-грунт» // Оптический журнал. 2011.Т. 78. № 10. С. 4–9.

2. **Зубов Н.Е., Савчук Д.В., Старовойтов Е.И.** Анализ возможностей оптимизации массы и энергопотребления лазерного высотомера для управления спуском с окололунной орбиты // Космическая техника и технологии. 2014. № 1 (4). С. 67–74.

3. **Егоров В.В.** Доплеровские радары посадки космических аппаратов на Луну и планеты Солнечной системы // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2012. Т. 9. № 2. С. 145–151.

4. **Huang Xiangyu, Wang Dayi, He Yingzi, Guan Yifeng**. Autonomous navigation and control for pin point lunar soft landing // 7th International ESA Conference on Guidance, Navigation and Control Systems, 2 – 5 June 2008. Tralee, County Kerry, Ireland. Pp. 1–7.

5. **Bilodeau V.S., Clerc S., Drai R., de Lafontaine J.** Optical navigation system for pin point lunar landing // Preprints of the 19th World Congress. The International Federation of Automatic Control. 24 –29 August 2014. Cape Town, South Africa. Pp. 4062–4067.

6. **Юревич Е.И.** ЦНИИ РТК. История создания и развития. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 1995. 100 с.

7. **Юревич Е.И.** Фотонная техника. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2003. 192 с.

8. Луна – шаг к технологиям освоения Солнечной системы. / Под ред. В.П. Легостаева и В.А. Лопоты. М.: РКК «Энергия», 2011. 684 с.

9. **Коротеев А.С., Семенов Ю.П., Сизенцев Г.А., Синявский В.В., Соколов Б.А., Сотников Б.И.** Космическая техника и космонавтика в решении экологических проблем мировой энергетики XXI века // Известия РАН. Энергетика. 2006. № 1. С. 142–155.

10. **Дубкова С.И.** Книга о Луне: фамильные тайны Солнечной системы. М.: Белый город, 2008. Серия: Энциклопедия тайн и загадок Вселенной. 200 с.

11. **Шевченко В.В.** Современная селенография. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1980. 288 с.

12. New views of the Moon reviews in mineralogy and geochemistry. Eds. B.L. Joliff, M.A. Wieczorek, C.K. Shearer, C.R. Neal. Reviews in mineralogy and geochemistry. Vol. 60. USA: Mineralogical Society of America, 2006. 721 p.

13. **Галушкин А.И.** Нейронные сети: основы теории. М.: Горячая линия Телеком, 2010. 480 с.

14. **Долгачева С.А., Цапков Ю.А.** Обработка сигнала ЧМ-дальномера с использованием нейронных сетей // Вестник Волгоградского гос. ун-та. Сер. 1. Математика. Физика. 2010. Вып. 13. С. 107–112.

15. **Lingling Wang, Li Fu, Xiaoguang Hu, Guofeng Zhang.** Attitude estimation for UAV with low-cost IMU/ADS based on adaptive-gain complementary filter // Proc. 13th Intern. Symp. on Neural Networks. SPb. 2016. Pp. 346–355.

16. **Haykin S.** Neural network, a comprehensive foundation. 2nd ed. Prentice Hall, New Jersey, 1999. 842 p.

Статья поступила в редакцию 13.03.2017, принята к публикации 01.06.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КИСЛИЦЫНА Ирина Александровна – *научный сотрудник Центрального научно-исследовательского и опытно-конструкторского института робототехники и технической кибернетики, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

194064, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Тихорецкий пр., 21.

irina_kislitsyna@mail.ru

МАЛЫХИНА Галина Федоровна – *доктор технических наук, профессор кафедры «Измерительные информационные технологии» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

g_f_malychina@mail.ru

REFERENCES

[1] **V.M. Polyakov, V.P. Pokrovskiy, L.N. Soms,** Lazernyy peredayushchiy modul s pereklyuchayemoy diagrammoy napravlennosti dlya dalnomera kosmicheskogo apparata «Fobos-Grunt» [A laser transmitting module with a geared directional diagram for the "Fobos-Grunt" spacecraft's ranger],

Opticheskiy Zhurnal. 78 (10) (2011) 4–9.

[2] **N.E. Zubov, D.V. Savchuk, E.I. Starovoytov,** Analiz vozmozhnostey, optimizatsii massy i energopotrebleniya lazernogo vysotomera dlya upravleniya spuskom s okololunnoy orbity [An opportunity analysis of optimization of mass and energy consumption of a laser altimeter for controlled descent from the near-earth orbit], Kosmicheskaya tekhnika i tekhnologii. 1 (4) (2014) 67–74.

[3] **V.V. Egorov,** Doplerovskiye radary posadki kosmicheskikh apparatov na Lunu i planety Solnechnoy sistemy [Doppler radars of spacecrafts's landings on the Moon and the planets of the planetary system], Sovremenniye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa. 9 (2) (2012) 145–151.

[4] **Xiangyu Huang, Dayi Wang, Yingzi He, Yifeng Guan,** Autonomous navigation and control for pin point lunar soft landing, Tralee: 7th International ESA Conference on Guidance, Navigation and Control Systems. (2008) 1–7.

[5] **V.S. Bilodeau, S. Clerc, R. Drai, J. de Lafontaine,** Optical navigation system for pin point lunar landing, Preprints of the 19th World Congress, The International Federation of Automatic Control, Cape Town, South Africa. 24–29 August, 2014.

[6] **E.I. Yurevich,** TsNII RTK. Istoriya sozdaniya i razvitiya [TsNII RTK. The history of foundation and development], St. Petersburg, Izd-vo SPbPU, 1995.

[7] **E.I. Yurevich,** Fotonnaya tekhnika [Photonic technique], St. Petersburg, Izd-vo SPbPU, 2003.

[8] Luna – shag k tekhnologiyam osvoyeniya Solnechnoy sistemy [The Moon is the 1st step to technologies of the planetary system opening], Eds. V.P. Legostayev, V.A. Lopota, Moscow, RKK "Energy", 2011.

[9] **A.S. Koroteyev, Yu.P. Semenov, G.A. Sizentsev, et al.,** Kosmicheskaya tekhnika i kosmonavtika v reshenii ekologicheskikh problem mirovoy energetiki XXI veka [Space techniques and astronautics in the solving the ecological problems on the world energy of the 21th century], Izvestiya RAS, Energetika. (1) (2006) 142–155.

[10] **S.I. Dubkova,** Kniga o Lune: familnye tayni Solnechnoy sistemy [A book about the Moon: Family secrets of the planetary system], Moscow, Beliy gorod, 2008.

[11] **V.V. Shevchenko,** Sovremennaya selenografiya [Modern selenography], Moscow, Nauka, Glavnaya redaktsiya fiziko-matematicheskoy literatury, 1980.

[12] New Views of the Moon Reviews in mineralogy and geochemistry. Eds. B.L. Joliff, M.A. Wieczorek, C.K. Shearer, C.R. Neal, Reviews in mineralogy and geochemistry, Mineralogical Society of America. 60 (2006).

[13] **A.I. Galushkin,** Neyronnyye seti: osnovy teorii [Neural networks: foundations of the theory], Moscow, Goryachaya liniya Telekom, 2010.

[14] **S.A. Dolgacheva, Yu.A. Tsapkov,** Obrabotka signala ChM-dalnomera s ispolzovaniye neyronnykh setey [FM-altimeter signal processing with the use of neural networks], Vestnik Volgogradskogo gosudarstvennogo universiteta, Ser. 1: Matematika, Fizika. (13) (2010) 107–112.

[15] **Lingling Wang, Li Fu, Xiaoguang Hu, Guofeng Zhang**, Attitude estimation for UAV with low-cost IMU/ADS based on adaptive-gain complementary filter, Proceedings of 13th International Symposium on neural networks, ISNN 2016, St. Petersburg, 346–355.

[16] **S. Haykin,** Neural network, a comprehensive foundation, 2nd ed. Prentice Hall, New Jersey, 1999.

Received 13.03.2017, accepted 01.06.2017.

THE AUTHORS

KISLITSYNA Irina A.
State Scientific Center for Robotics and Technical Cybernetics (RTC)
21 Tikhoretskiy Ave., Saint-Petersburg, 194064, Russian Federation
irina_kislitsyna@mail.ru

MALYKHINA Galina F.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
g_f_malychina@mail.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

DOI: 10.18721/JPM.10305
УДК 536.246

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИСПАРИТЕЛЯ КОНТУРНОЙ ТЕПЛОВОЙ ТРУБЫ

А.А. Пожилов, Д.К. Зайцев, Е.М. Смирнов, А.А. Смирновский

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

Приводятся результаты имитационного численного моделирования трехмерного течения и сопряженного тепломассопереноса в модели испарителя контурной тепловой трубы спутника TacSat-4. Математическая модель основана на общих уравнениях баланса массы, импульса и энергии в составных системах, включающих занятые паром или жидкостью проточные части, а также твердотельные и пористые элементы, с испарением рабочей жидкости на границе между пористой структурой и паровой областью. Установлено, что процессы испарения теплоносителя наиболее интенсивно идут в углах паровых канавок вблизи корпуса испарителя. Показано, что отводящие пар аксиальные канавки испарителя работают в существенно разных условиях, в результате расходы пара отличаются в несколько раз. Существенное утолщение стенок корпуса испарителя лишь незначительно снижает степень неравномерности в распределении расхода теплоносителя по паровым канавкам.

Ключевые слова: численное моделирование; сопряженный тепломассоперенос; испаритель контурной тепловой трубы

Ссылка при цитировании: Пожилов А.А., Зайцев Д.К., Смирнов Е.М., Смирновский А. А. Численное моделирование тепломассопереноса в трехмерной модели испарителя контурной тепловой трубы // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 52–63. DOI: 10.18721/JPM.10305

NUMERICAL SIMULATION OF HEAT AND MASS TRANSFER IN A 3D MODEL OF A LOOP HEAT PIPE EVAPORATOR

A.A. Pozhilov, D.K. Zaitsev, E.M. Smirnov, A.A. Smirnovsky

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

The article presents results of 3D numerical simulation of flow and conjugate heat and mass transfer in a model of the TacSat-4 satellite loop heat pipe evaporator. Mathematical model includes the Reynolds averaged Navier-Stokes equations describing a flow in the liquid and vapor regions, Darcy's law for filtration modeling in the wicks and the energy equation with accurate coupling of connected subdomains including effects of evaporation on interfaces between the porous and vapor regions. According to the simulation results, the evaporation localizes mainly at the vapor groove corners near the evaporator body. The vapor grooves operate under essentially different conditions; as a result, the flow rates differ several times. Significant thickening of the evaporator body yields only weak reduction in a level of the grooves' flow rate nonuniformity.

Key words: numerical simulation; conjugate heat and mass transfer; loop heat pipe evaporator

Citation: A.A. Pozhilov, D.K. Zaitsev, E.M. Smirnov, A.A. Smirnovsky, Numerical simulation of heat and mass transfer in a 3D model of a loop heat pipe evaporator, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 52–63. DOI: 10.18721/JPM.10305

Введение

В настоящее время для эффективного отвода тепла от тепловыделяющих элементов широко используются так называемые контурные тепловые трубы (КТТ) [1]. Основными элементами КТТ являются конденсатор и испаритель. При подводе тепла к корпусу испарителя жидкость начинает испаряться, нагретый пар через паропровод поступает в конденсатор, где охлаждается и конденсируется, а затем по конденсатопроводу идет в компенсационную камеру, сочлененную с испарителем. Функцию прокачки теплоносителя из компенсационной камеры к зоне испарения выполняет пористое тело (так называемый фитиль). Благодаря таким преимуществам, как высокая теплопередающая способность, низкое термическое сопротивление, механическая гибкость и отличная адаптируемость к различным условиям компоновки, КТТ получили широкое распространение, в том числе в системах обеспечения теплового режима (СОТР) космических аппаратов (КА). Экспериментальное исследование теплофизических процессов в КТТ при условиях, характерных для функционирования СОТР КА, является крайне непростой и дорогостоящей задачей. Поэтому актуальным становится численное моделирование работы КТТ, для которого открылись новые возможности, обусловленные быстрым прогрессом в развитии вычислительной техники.

Наиболее важными и сложными для моделирования являются процессы сопряженного тепломассопереноса в испарителе КТТ. Представленные в литературе расчеты выполнены с существенными ограничениями: в работах [2 – 6] рассматриваются только двумерные постановки, а трехмерный анализ в работах [7, 8] проводится лишь для одной из нескольких паровых канавок испарителя, т. е. авторы этих исследований не учитывают неравномерность подвода тепла к разным канавкам.

В настоящей работе представлены постановка задачи и результаты численного моделирования течения и сопряженного тепломассопереноса в трехмерной модели испарителя КТТ, оценивается влияние толщины стенок корпуса испарителя на неравномерность распределения теплоносителя по паровым канавкам. Рассматриваемая модель испарителя построена на основе имеющейся в открытом доступе информации о КТТ, установленной на американском микроспутнике TacSat-4 [9]. Предварительные результаты численного анализа процессов в данной модели испарителя представлены в работах [10, 11]. Для выполнения расчетов использован программный код SINF/Flag-S [12], разработанный сотрудниками кафедры гидроаэродинамики, горения и теплообмена СПбПУ.

Математическая модель

Моделируются течение и прогрев теплоносителя на всех стадиях его движения по испарителю КТТ; а именно, рассматриваются:

течение в подводящих проточных частях;

фильтрация через пористое тело;

испарение теплоносителя;

движение пара к выходу из испарителя.

Для анализа указанных процессов используется достаточно общая математическая модель, описывающая сопряженный тепломассообмен с испарением или конденсацией рабочего тела в составных системах, содержащих проточные части, занятые теплоносителем в паровой или жидкой фазе, а также различные твердотельные и пористые элементы. Полагается, что все пористые тела заполнены теплоносителем исключительно в жидком состоянии, а процессы испарения или конденсации происходят только на границе между паром и пористой структурой.

Течение в жидких и паровых областях рассчитывается на основе осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье – Стокса в предположении существенно дозвукового характера движения и изотропности турбулентной вязкости:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0; \qquad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}\mathbf{V}) = -\nabla p + \nabla \cdot [2(\mu + \mu_t)\mathbf{S}], \qquad (2)$$

где $\mathbf{V}$ – скорость движения рабочей жидкости (пара); ρ – плотность рассматриваемой среды; p – давление; $\mathbf{S}$ – тензор скоростей деформации; μ, μ_t – коэффициенты молекулярной и турбулентной вязкости соответственно.

Для расчета турбулентной вязкости используется SST-модель турбулентности Ментера [13].

Фильтрация в пористом теле описывается законом Дарси (3), подстановка которого в уравнение неразрывности дает уравнение (4) для распределения давления:

$$\mathbf{V} = -\frac{K}{\mu}\nabla p, \tag{3}$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{K}{\mu}\nabla p\right) = 0. \tag{4}$$

Здесь K – коэффициент проницаемости пористого тела.

Теплообмен моделируется на основе уравнений пространственного переноса тепла в потоке рабочей жидкости или пара (5), в твердотельных элементах (6) и в пористых структурах (7); последнее уравнение записано в однотемпературном приближении, т. е. в предположении о равенстве локальных температур пористого каркаса и протекающей сквозь него жидкости:

$$\frac{\partial(\rho c_v T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c_p T\mathbf{V}) = \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{\mathrm{Pr}} + \frac{\mu_t}{\sigma_t}\right)\nabla T\right], \tag{5}$$

$$\frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T), \tag{6}$$

$$\frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l c_l T\mathbf{V}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T). \tag{7}$$

Здесь T – локальная температура, c – удельная теплоемкость (для пара различаются теплоемкости при постоянном давлении c_p и при постоянном объеме c_v), λ – коэффициент теплопроводности, σ_t – турбулентное число Прандтля.

Для пористого тела «эффективные» значения ρ, c и λ (без индексов) в уравнении (7) определяются из соответствующих параметров жидкости (нижний индекс l) и пористого каркаса (индекс s) и зависят от коэффициента пористости ε:

$$\rho c = \varepsilon \rho_l c_l + (1-\varepsilon)\rho_s c_s, \tag{8}$$

$$\lambda = \varepsilon \lambda_l + (1-\varepsilon)\lambda_s. \tag{9}$$

На внутренних границах между подобластями без фазового перехода обеспечивается сопряжение по тепловым потокам и температурам, с возможностью учета скачка температуры, обусловленного контактным термическим сопротивлением r:

$$\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_1 = \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_2, \; T_2 - T_1 = r\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right). \tag{10}$$

Если граница проницаемая, то также производится сопряжение по нормальной составляющей скорости и по давлению, а касательная составляющая скорости полагается равной нулю. В случае пористого тела условие для касательной составляющей скорости не ставится, а условие для нормальной составляющей скорости выражается через градиент давления согласно уравнению (3).

На границе пористого тела с паром температура полагается равной температуре насыщения при текущем давлении в паровой области, при этом имеется возможность учета поверхностного термического сопротивления r (см. далее формулу (11)), связанного либо с перегревом пористого тела при испарении, либо с образованием тонкой пленки конденсата при конденсации:

$$T_v = T_{sat}(p_v), T_w = T_v + r(g)\cdot gL. \tag{11}$$

Скорость испарения g определяется величиной подводимого к границе теплового потока:

$$g = \frac{1}{L}\left[\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_v - \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_w\right], \tag{12}$$

где g – удельный массовый расход через межфазную поверхность; L – скрытая теплота парообразования, n – координата по нормали к границе; индексы w и v относятся к жидкой фазе внутри пористой структуры и паровой фазе теплоносителя соответственно.

Здесь и далее считается, что на межфазной границе нормаль направлена из жидкости в пар, положительные значения

g отвечают испарению, а отрицательные – конденсации.

Связь между давлением p_{sat} и температурой T_{sat} на линии насыщения определяется по формуле Антуана:

$$\log p_{sat} = A - \frac{B}{C + T_{sat}}, \qquad (14)$$

где A, B, C – эмпирические коэффициенты.

На внешних границах для уравнения энергии задаются условия первого, второго или третьего рода, а для уравнения движения либо задается значение скорости, либо значение давления и мягкие условия для скорости.

Программная реализация

Представленная математическая модель реализована в программном коде SINF/Flag-S, разработанном для численного решения системы уравнений Навье – Стокса на неструктурированных сетках с полиэдральными ячейками. Аппроксимация уравнений выполнена по методу конечных объемов со вторым порядком точности. Для решения системы уравнений гидродинамики и неразрывности применяется алгоритм SIMPLEC. Наиболее ресурсоемкой частью этого алгоритма является решение уравнения Пуассона для поправки давления; уравнение Пуассона также описывает теплопроводность в твердых элементах конструкции (см. формулу (6)) и фильтрационное движение рабочей жидкости в пористом теле (формула (4)). В связи с этим, для эффективного решения уравнения Пуассона в коде реализован оригинальный многосеточный алгоритм [11]. Распараллеливание кода выполнено по методу декомпозиции расчетной области на основе коммуникационной библиотеки MPI.

Трехмерная модель испарителя контурной тепловой трубы

Рассматривается модель испарителя микроспутника TacSat-4 [9]. Расчетная область и схема течения теплоносителя

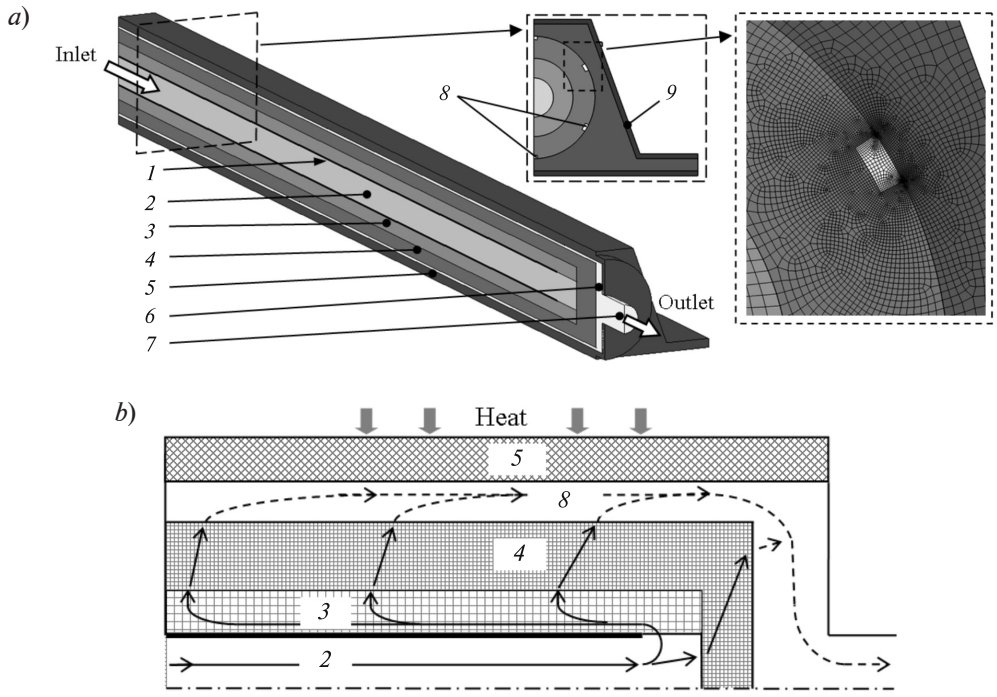


Рис. 1. Расчетная область, фрагмент расчетной сетки (*a*) и схема течения (*b*):
1 – подводящая трубка, *2* – жидкость, *3* – вторичный фитиль, *4* – основной фитиль, *5* – корпус испарителя, *6* – паровой пленум, *7* – выходной патрубок, *8* – паровые канавки, *9* – утолщение стенки (для второго варианта модели испарителя); Inlet, Outlet – впуск и выпуск теплоносителя, соответственно

(аммиака) представлены на рис. 1. С учетом симметрии задачи рассматривается половина испарителя. Расчетная область включает в себя заполненную жидкостью подводящую трубку (ее стенки полагаются бесконечно тонкими), основной и вторичный пористые фитили, корпус испарителя и занятую паром область, включающую паровые канавки, сборный пленум и выходной патрубок. При подводе тепла к корпусу испарителя прогреваются примыкающие к корпусу участки фитиля, жидкость испаряется и образующийся пар следует по паровым канавкам в выходной патрубок. Рассматривается нормальный режим работы испарителя (с умеренной тепловой нагрузкой), когда испарение происходит на поверхности фитиля (главным образом, на границе с паровыми канавками). Прокачку теплоносителя к зоне испарения обеспечивает капиллярный перепад давления, создаваемый основным (мелкопористым) фитилем. Для более равномерного подвода теплоносителя к внутренней поверхности основного фитиля служит высокопроницаемый вторичный фитиль.

Геометрические характеристики модели испарителя представлены в табл. 1.

В представляемом расчете моделируется стационарный режим работы испарителя. На входной границе задана постоянная температура в 240 K, что соответствует температуре на входе в испаритель по данным работы [9], и постоянное давление (значения скоростей экстраполируются изнутри расчетной области). К нижней поверхности основания корпуса испарителя подводится тепловая нагрузка, значение температуры задано равным 265 K, что соответствует подводимой мощности примерно в 450 Вт и, согласно работе [9], является рабочим режимом для реального прототипа.

Все остальные границы полагаются адиабатическими. Давление на выходе из

Таблица 1

Геометрические характеристики модели испарителя

Элемент конструкции	Параметр	Значение параметра, см
Корпус	Высота	3,0
Основания корпуса	Ширина нижнего верхнего	 6,7 2,2
Основной фитиль	Общая длина Диаметр внешний внутренний Толщина торца	30,5 2,5 1,6 1,25
Вторичный фитиль	Диаметр внешний внутренний	 1,6 0,8
Паровые канавки	Высота Ширина	0,07 0,15
Сборный пленум	Ширина	0,4
Выходной патрубок	Длина	1,4

Примечание. Дополнительно был рассмотрен вариант модели с утолщенными на 1 мм стенками корпуса.

испарителя задано равным $2{,}22 \cdot 10^5$ Па, в соответствии с полученной в экспериментах работы [9] температурой пара на выходе из испарителя, составляющей 256,7 К (в предположении, что в этой области пар находится в состоянии насыщения).

Физические параметры сред, которые использовались при моделировании, представлены в табл. 2.

Расчетная сетка содержит 1,4 млн ячеек: на жидкую и паровую зоны приходилось 40 и 200 тыс. ячеек соответственно, на вторичный и основной фитили – 50 и 600 тыс. ячеек, на корпус испарителя – 500 тыс. ячеек. Как видно из рис. 1, узлы сетки сильно сгущены к границе между основным фитилем и паровой зоной – для аккуратного расчета температурных градиентов и подводимого к межфазной границе теплового потока.

На рис. 2 представлено распределение температуры в сечениях испарителя и распределение векторов скорости на внутренней поверхности основного фитиля. Видно, что прогрев жидкости при ее движении через подводящую трубку составляет примерно 15 К. Локальные максимумы скорости наблюдаются напротив паровых канавок, при этом основная часть потока приходится на нижнюю часть устройства. По результатам расчетов расход пара в канавках, в долях от общего расхода, составляет, % : 7,8; 2 × 11,2; 2 × 21,9; 26,0 (от верхней канавки к нижней).

На рис. 3, *а* приведена плотность отводимого испарителем теплового потока, осредненного по ширине основания корпуса, в зависимости от продольной координаты. В самом конце устройства испарение происходит не только на поверхности паровых канавок, но и на всем торце фитиля, что и обуславливает резкий пик от-

Таблица 2

Физические характеристики материалов испарителя

Элемент испарителя	Материал	Параметр	Значение параметра
Корпус	Алюминий	Теплопроводность	$\lambda_s = 200$ Вт/(м·К)
Основной фитиль	Спеченый никелевый порошок	Пористость Коэффициент эффективной теплопроводности Проницаемость	$\varepsilon = 0{,}75$ $\lambda_{eff} = 5{,}5$ Вт/(м·К) $K = 2 \cdot 10^{-14}$ м^2
Вторичный фитиль	Сетка из нержавеющей стали	Пористость Коэффициент эффективной теплопроводности Проницаемость	$\varepsilon = 0{,}70$ $\lambda_{eff} = 1{,}4$ Вт/(м·К) $K = 10^{-9}$ м^2
Теплоноситель	Жидкий аммиак	Плотность Теплоемкость Динамическая вязкость	$\rho_l = 660$ кг/м^3 $C_{pl} = 4510$ кДж/(кг·К) $\mu_l = 2 \cdot 10^{-4}$ Па·с
	Парообразный аммиак	Плотность Теплоемкость Динамическая вязкость Теплопроводность Удельная теплота парообразования	$\rho_v = 1{,}89$ кг/м^3 $C_{pv} = 2400$ Дж/(кг· К) $\mu_v = 8{,}65 \cdot 10^{-6}$ Па·с $\lambda_v = 2{,}1 \cdot 10^{-2}$ Вт/(м·К) $L = 1{,}31$ МДж/кг

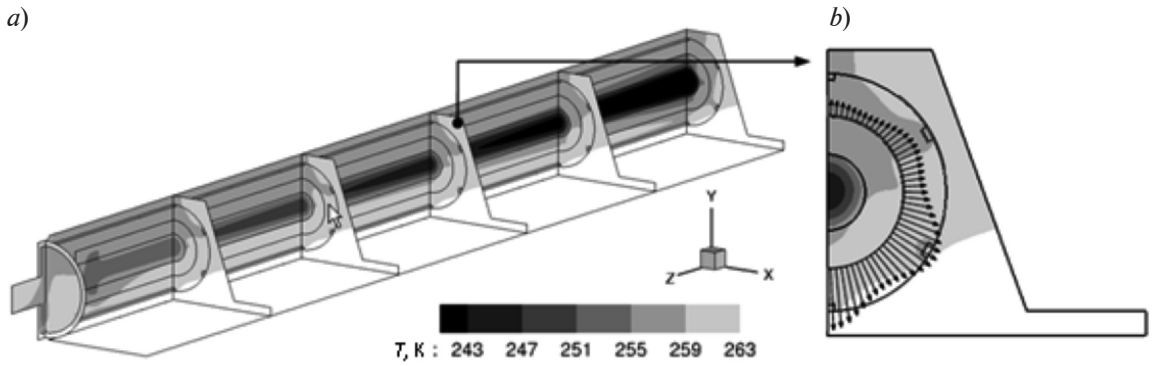


Рис. 2. Распределения температуры в сечениях (*a*) и скорости втекания жидкости в основной фитиль (*b*)

водимого тепла в этой области. Относительно небольшое увеличение теплоотдачи перед пиком и в самом начале испарителя связано с тем, что в этих местах (см. рис. 2), в основной фитиль поступает более холодная жидкость и для ее прогрева затрачивается дополнительное тепло.

На рис. 3, *b* показано распределение плотности отводимого от основания теплового потока в среднем поперечном сечении испарителя. Максимум теплоотдачи находится напротив нижней паровой канавки, положение второго пика приблизительно соответствует радиусу основного фитиля, отводимое в этом месте тепло идет по корпусу к остальным канавкам.

На рис. 4 представлено распределение скорости пара на торце основного фитиля и на стенках паровых канавок в среднем сечении испарителя. Видно, что наиболее интенсивное испарение идет в нижней паровой канавке в области контакта основного фитиля с корпусом испарителя. Скорость выходящего с поверхности фитиля пара в этом месте достигает 1,4 м/с, в то время как на основной части стенки канавки значения примерно в 50 раз меньше. В более удаленных от нагреваемой поверхности паровых канавках максимальная интенсивность испарения заметно ниже, но в целом наблюдается аналогичная картина в распределениях скорости по высоте канавки. На торце фитиля интенсивное испарение также наблюдается лишь в местах контакта с корпусом испарителя, и на большей части торца испарение идет на

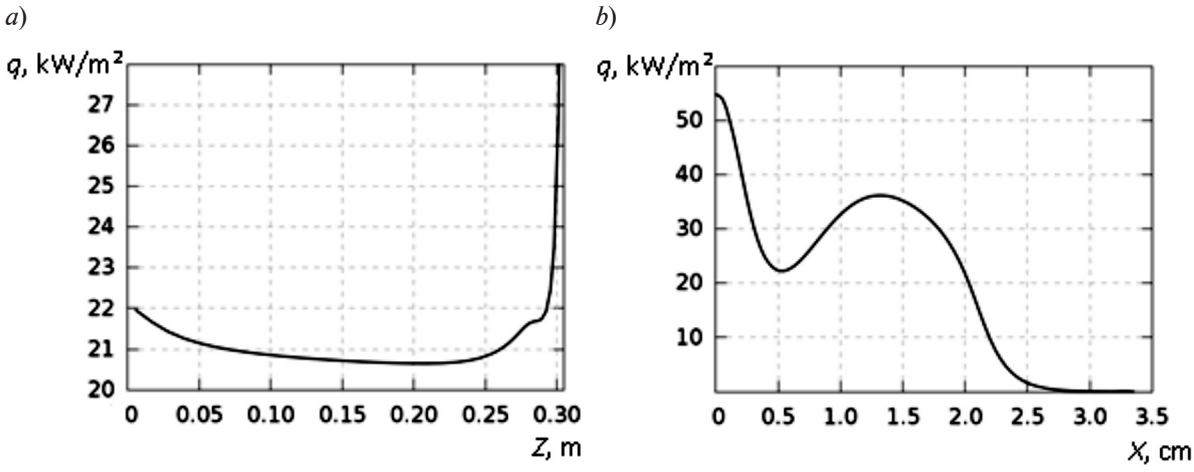


Рис. 3. Распределения плотности теплового потока, отводимого испарителем, вдоль (*a*) и поперек (*b*) устройства

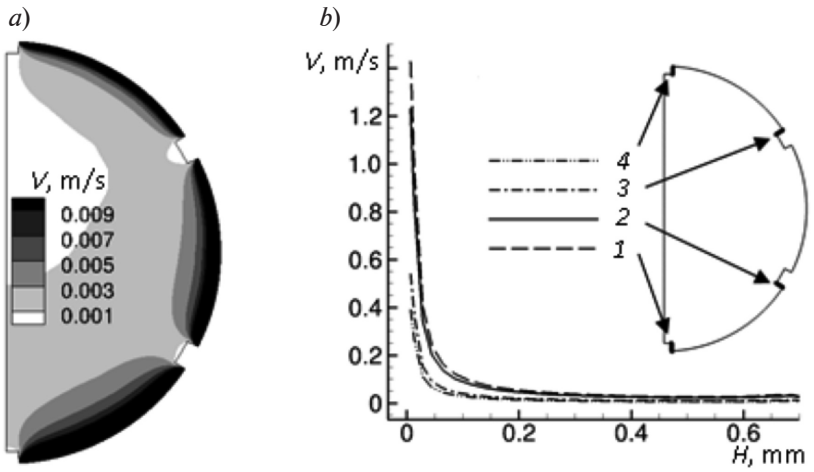


Рис. 4. Распределения скорости пара на торце основного фитиля (*a*) и на стенках паровых канавок *1* – *4* (*b*)

порядок менее интенсивно, чем в основной части канавок. Отметим, что для хорошего разрешения описанных локальных эффектов при проведении численного моделирования потребовались расчетные сетки с сильным сгущением узлов к областям наиболее интенсивного испарения.

При интенсивном испарении пар поступает в канавки с большими скоростями, направленными поперек основного течения, что приводит к заметному искажению профиля продольной скорости. Это, в свою очередь, сказывается на величине трения на стенках и, соответственно, на итоговом перепаде давления вдоль канавки. На рис. 5 приведена зависимость трения, осредненного по периметру нижней паровой канавки, от продольной координаты: сплошной линией показаны результаты численного моделирования, пунктирной линией – оценка по коэффициенту гидравлического сопротивления прямоугольного канала [14]. Максимальное отличие локального значения трения в 19 % наблюдается в конце паровой канавки. Среднее значение трения в расчете составило 4,36 Па, что соответствует вкладу в общий перепад давления по канавке в 5,58 кПа и на 13 % меньше оценочного значения.

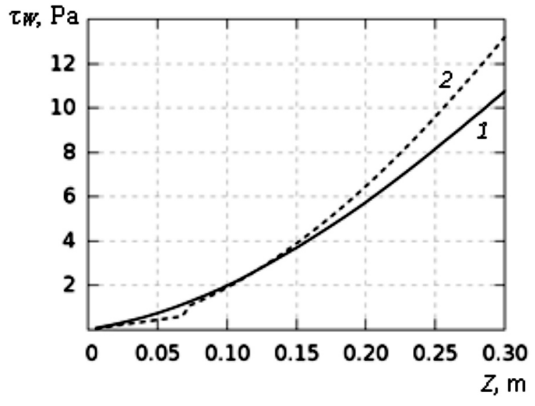


Рис. 5. Сравнение результатов численного моделирования (*1*) распределения по продольной координате величины трения, осредненной по периметру нижней паровой канавки, с соответствующей оценкой на основе справочных данных [14] (*2*)

На рис. 6 представлено распределение давления вдоль четырех паровых канавок (от первой – нижней, до четвертой – верхней). Как и расходы рабочего тела, перепады давления для разных канавок сильно различаются. Наибольшее падение давления наблюдается вдоль нижней паровой канавки и составляет 9 кПа. Если к этому добавить приблизительно 2 кПа падения давления по фитилю и 1 кПа падения давления по контуру конденсатора (последнее – по данным работы [9]), то общий перепад давления по контуру тепловой трубы составит 12 кПа. Это меньше, чем предельный капиллярный напор для данного фитиля (оценка по формуле Лапласа дает величину в 25 кПа). Последнее означает, что, согласно результатам расчета, рассмотренный

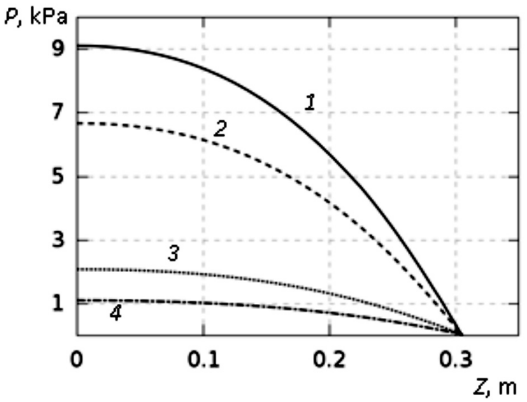


Рис. 6. Распределения давления вдоль четырех паровых канавок: от нижней (*1*) до верхней (*4*)

тепловой режим для данного фитиля является рабочим, осушения фитиля не происходит и использование математической модели, предполагающей, что испарение происходит на границе фитиль – пористое тело (11), оправдано. При повышении подаваемой на испаритель тепловой нагрузки расходы рабочего тела и, соответственно, перепады давления увеличатся, и лимитирующим максимальную тепловую нагрузку фактором окажется давление в нижней паровой канавке.

Таким образом, работа паровых канавок в существенно разных условиях может приводить к заметному ограничению максимальной тепловой мощности, отводимой испарителем.

Одним из способов ослабления описанного ограничения на максимальную тепловую мощность является выравнивание тепловых потоков, подводимых к канавкам, за счет изменения геометрии корпуса испарителя. Для оценки эффективности этого подхода дополнительно было проведено численное исследование для модели испарителя с увеличенной на 1 мм толщиной стенок корпуса, что соответствует утолщению наиболее тонких участков стенки почти в 1,5 раза.

По результатам расчетов расход пара в канавках, в долях от общего расхода, составляет для второй модели (%): 8,8; 2 × 11,9; 2 × 21,2; 25 (от верхней канавки к нижней).

Таким образом, как и ожидалось, распределение расхода по канавкам стало более равномерным, но в целом эффект довольно слабый: заметное утолщение стенок корпуса привело лишь к незначительному изменению расходов по канавкам и перепад давления в наиболее нагруженной нижней канавке уменьшился всего на 3,5 %.

Заключение

Проведено численное моделирование течения и сопряженного тепломассопереноса в трехмерной модели испарителя контурной тепловой трубы. Выполнен детальный анализ течения, продемонстрирована степень и характер неоднородности плотности отводимого испарителем теплового потока. Установлено, что процессы испарения теплоносителя наиболее интенсивно идут в углах паровых канавок вблизи корпуса испарителя. Испарение на стенках паровых канавок приводит к искажению профиля скорости пара, что влияет на трение и итоговый перепад давления в канавках. Показано, что при подводе тепла к испарителю только со стороны основания корпуса паровые канавки работают в существенно разных условиях, что значительно ограничивает максимальную тепловую мощность, отводимую испарителем. Увеличение толщины стенок корпуса испарителя лишь незначительно снижает степень неравномерности в распределении расхода теплоносителя по паровым канавкам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Майданик Ю.Ф.** Контурные тепловые трубы – высокоэффективные теплопередающие устройства // Инновации. 2003. № 5. С. 83–86.

2. **Демидов А.С., Яценко Е.С.** Математический эксперимент по исследованию тепломассопереноса в зоне испарения тепловых труб // Теплофизика высоких температур. 1992. Т. 30. Вып. 3. С. 566–572.

3. **Demidov A.S., Yatsenko E.S.** Investigation of heat and mass transfer in the evaporation zone of a heat pipe operating by the ‘inverted meniscus’ principle // International Journal of Heat and Mass

Transfer. 1994. Vol. 37. No. 14. Pp. 2155–2163.

4. **Kaya T., Goldak J.** Numerical analysis of heat and mass transfer in the capillary structure of a loop heat pipe // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2006. Vol. 49. No. 17–18. Pp. 3211–3220.

5. **Ren Chuan, Wu Qing-Song, Hu Mao-Bin.** Heat transfer with flow and evaporation in loop heat pipe's wick at low or moderate heat fluxes // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2007. Vol. 50. No. 11–12 . Pp. 2296–2308.

6. **Avgerinos N.A., Margaris D.P., Pittas K.X., Tsahalis D.T.** Computational study of a 2D capillary pump evaporator // International Journal of Low-Carbon Technologies. 2015. Vol. 10. No. 3. Pp. 246–253.

7. **Cao Y., Faghri A.** Conjugate analysis of a flat-plate type evaporator for capillary pumped loops with three-dimensional vapor flow in the groove // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1994. Vol. 37. No. 3. Pp. 401–409.

8. **Nishikawara M., Nagano H., Mottet L., Prat M.** Numerical study of thermal performance of a capillary evaporator in a loop heat pipe with liquid-saturated wick // Journal of Electronics Cooling and Thermal Control. 2014. No. 4. Pp. 118–127.

9. **Dussinger P.M., Sarraf D.B., Anderson W.G.** Loop heat pipe for TacSat-4 // AIP Conference Proceedings. 2009. Vol. 1103. No. 1. Pp. 91–100.

10. **Зайцев Д.К., Пожилов А.А., Смирнов Е.М., Смирновский А.А.** Численное моделирование сопряженного тепломассопереноса в испарителе контурной тепловой трубы // «Параллельные вычислительные технологии» (ПаВТ-2016). Тр. междунар. научн. конф. Архангельск, 28 марта – 1 апреля, 2016. С. 512–520.

11. **Зайцев Д.К., Пожилов А.А., Смирнов Е.М., Смирновский А.А.** Численное моделирование сопряженного тепломассопереноса с испарением рабочего тела на поверхности пористой структуры с применением многосеточных алгоритмов // «Параллельные вычислительные технологии». XI Междунар. конф. ПаВТ'2017. Короткие статьи и описания плакатов. Казань, 3–7 апреля, 2017. С. 309–317.

12. **Смирнов Е.М., Зайцев Д.К., Смирнов П.Е., Якубов С.А.** FLAG-S. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010610263 от 11/01/2010.

13. **Menter F.R., Langtry R., Kuntz M.** Ten 2017s of industrial experience with the SST turbulence model // Turbulence, Heat and Mass Transfer 4 (CD-ROM Proceedings), Begell House, Inc., 2003.

14. **Идельчик И.Е.** Справочник по гидравлическим сопротивлениям. Под ред. М.О. Штейнберга: 3-е изд. М.: Машиностроение, 1992. 672 с.

Статья поступила в редакцию 19.06.2017, принята к публикации 23.06.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПОЖИЛОВ Алексей Алексеевич – *инженер-исследователь 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
aapozhilov@mail.ru

ЗАЙЦЕВ Дмитрий Кириллович – *доктор физико-математических наук, доцент кафедры гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
zaitsev-aero@yandex.ru

СМИРНОВ Евгений Михайлович – *доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

СМИРНОВСКИЙ Александр Андреевич – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

REFERENCES

[1] **Yu.F. Maydanik,** Konturnyye teplovyye truby – vysokoeffektivnyye teploperedayushchiye ustroystva [Loop heat pipes are high performance facilities], Innovatsii. (5) (2003) 83–86.

[2] **A.S. Demidov, E.S. Yatsenko,** Matematicheskiy eksperiment po issledovaniyu teplomassoperenosa v zone ispareniya teplovykh trub [Mathematical experiment on investigation of heat-and-mass transfer in the evaporation zone of heat pipes], Teplofizika vysokikh temperatur. 30 (3) (1992) 566–572.

[3] **A.S. Demidov, E.S. Yatsenko,** Investigation of heat and mass transfer in the evaporation zone of a heat pipe operating by the 'inverted meniscus' principle, International Journal of Heat and Mass Transfer. 37 (14) (1994) 2155–2163.

[4] **T. Kaya, J. Goldak,** Numerical analysis of heat and mass transfer in the capillary structure of a loop heat pipe, International Journal of Heat and Mass Transfer. 49 (17–18) (2006) 3211–3220.

[5] **Ren Chuan, Wu Qing-Song, Hu Mao-Bin,** Heat transfer with flow and evaporation in loop heat pipe's wick at low or moderate heat fluxes, International Journal of Heat and Mass Transfer. 50 (11–12) (2007) 2296–2308.

[6] **N.A. Avgerinos, D.P. Margaris, K.X. Pittas, D.T. Tsahalis,** Computational study of a 2D capillary pump evaporator, International Journal of Low-Carbon Technologies. 10 (3) (2015) 246–253.

[7] **Y. Cao, A. Faghri,** Conjugate analysis of a flat-plate type evaporator for capillary pumped loops with three-dimensional vapor flow in the groove, International Journal of Heat and Mass Transfer. 37 (3) (1994) 401–409.

[8] **M. Nishikawara, H. Nagano, L. Mottet, M. Prat,** Numerical study of thermal performance of a capillary evaporator in a loop heat pipe with liquid-saturated wick, Journal of Electronics Cooling and Thermal Control. (4) (2014) 118–127.

[9] **P.M. Dussinger, D.B. Sarraf, W.G. Anderson,** Loop heat pipe for TacSat-4, AIP Conference Proceedings. 1103 (1) (2009) 91–100.

[10] **D.K. Zaytsev, A.A. Pozhilov, E.M. Smirnov, A.A. Smirnovsky,** Chislennoye modelirovaniye sopryazhennogo teplomassoperenosa v isparitele konturnoy teplovoy truby [Numerical simulation of conjugated heat-and-mass transfer in the evaporator of the loop heat pipe], "Parallel Computational Technologies" (PaCT-2016), Intern. Sci. Conf. Proc., Arkhangelsk, March 28 – April 1 (2016) 512–520.

[11] **D.K. Zaytsev, A.A. Pozhilov, E.M. Smirnov, A.A. Smirnovsky,** Chislennoye modelirovaniye sopryazhennogo teplomassoperenosa s ispareniyem rabochego tela na poverkhnosti poristoy struktury s primeneniyem mnogosetochnykh algoritmov [Numerical simulation of conjugated heat-and-mass transfer with working-medium evaporation on the porous-structure surface using multigrid algorithms], "Parallel Computational Technologies", 11th Intern. Conf. PaVT'2017, Short papers and poster's descriptions, Kazan, April, 3–7 (2017) 309–317.

[12] **E.M. Smirnov, D.K. Zaytsev, P.E. Smirnov, S.A. Yakubov,** FLAG-S. Svidetelstvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM № 2010610263 ot 11/01/2010 [Certificate on state registration of the computer program No. 2010610263, January 11, 2010].

[13] **F.R. Menter, R. Langtry, M. Kuntz,** Ten years of industrial experience with the SST turbulence model, Turbulence, Heat and Mass Transfer 4 (CD-ROM Proceedings), Begell House, Inc., 2003.

[14] **I.E. Idelchik,** Spravochnik po gidravlicheskim soprotivleniyam [A reference book on hydraulic resistances], Ed. M. O. Shteynberg, 3d ed., Moscow, Mashinostroyeniye, 1992.

Received 19.06.2017, accepted 23.06.2017.

THE AUTHORS

POZHILOV Aleksei A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
aapozhilov@mail.ru

ZAITSEV Dmitri K.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
zaitsev-aero@yandex.ru

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

SMIRNOVSKY Alexander A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
smirta@mail.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

DOI: 10.18721 /JPM.10306
УДК 537.226.33

VISIBLE QUANTUM CUTTING IN GREEN EMITTING BaF_2: Gd^{3+}, Tb^{3+} PHOSPHORS: AN APPROACH TOWARDS MERCURY-FREE LAMPS

S.R. Jaiswal[1], N.S. Sawala[2], K.A. Koparkar[2], P.A. Nagpure[1], V.B. Bhatkar[1], S.K. Omanwar[2]

[1]Shri Shivaji Science College, Amravati, India

[2]Sant Gadge Baba Amravati University, Amravati, India

Visible quantum cutting (QC) via down-conversion (DC) has been observed in the green emitting BaF_2 co-doped with Gd^{3+}, Tb^{3+} phosphors synthesized by wet chemical method. Powder X-ray diffraction (XRD) analysis showed structural purity of the synthesized phosphors. The excitation (PLE) and PL spectra in the vacuum ultraviolet (VUV) or UV region were measured with the help of 4B8-VUV spectroscopy experimental station of the Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF). In the QC process, one VUV-UV photon absorbed cuts into more than one visible photons emitted by Tb^{3+} through cross relaxation (CR) and direct energy transfer (DET) between Tb^{3+} and Tb^{3+} or Tb^{3+} and Gd^{3+}, depending on the excitation wavelength. From the emission spectra monitored at different wavelength excitation, the two-step energy transfer process was investigated, and theoretically calculated quantum efficiency observed was found to be 148 % and 177 % at the excitation wavelength of 174 nm and 219 nm respectively.

Key words: quantum cutting; inorganic phosphor; cross relaxation; energy transfer; quantum efficiency

Citation: S.R. Jaiswal, N.S. Sawala, K.A. Koparkar, P.A. Nagpure, V.B. Bhatkar, S.K. Omanwar, Visible quantum cutting in green emitting BaF_2 : Gd^{3+}, Tb^{3+} phosphors: an approach towards mercury-free lamps, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 64–74. DOI: 10.18721/JPM.10306

ЭФФЕКТ ДАУН-КОНВЕРСИИ В ЛЮМИНОФОРАХ ЗЕЛЕНОГО СВЕЧЕНИЯ BaF_2: Gd^{3+}, Tb^{3+} – ПЕРСПЕКТИВА ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В БЕЗРТУТНЫХ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ ЛАМПАХ

Ш.Р. Джайсвал[1], Н.С. Савала[2], К.А. Копаркар[2], П.А. Нагпуре[1], В.Б. Бхаткар[1], Ш.К. Оманвар[2]

[1]Научный колледж Шри Шиваджи, г. Амравати, Индия

[2]Университет Амравати имени Сант Гадж Баба, г. Амравати, Индия

В люминофорах BaF_2 : Gd^{3+}, Tb^{3+} с зеленым свечением, синтезированных мокрым химическим методом, наблюдалось понижение частоты кванта излучения в видимую область через процесс даун-конверсии. Анализ методом порошковой рентгеновской дифракции показал структурную чистоту синтезированных люминофоров. Спектры возбуждения и фотолюминесценции в ультрафиолетовой (УФ) и вакуумной ультрафиолетовой (ВУФ) областях измеряли

на экспериментальной спектроскопической установке синхротронного излучения 4B8-VUV (г. Пекин, КНР). В процессе понижения частоты кванта один фотон из ВУФ или УФ области излучения претерпевает конверсию в более, чем один фотон люминесценции в видимой области, и эти фотоны испускаются ионами Tb^{3+} по механизмам кросс-релаксации и прямого энергопереноса между двумя ионами Tb^{3+} либо между ионами Tb^{3+} и Gd^{3+}, что зависит от длины волны возбуждающего излучения. Путем отслеживания спектров испускания при различных длинах волн возбуждающего излучения исследован двухступенчатый процесс переноса энергии. Теоретически рассчитанные максимальные значения наблюдаемого квантового выхода составили 148 и 177 % для длин волн возбуждающего излучения 174 и 219 нм соответственно.

Ключевые слова: понижение частоты кванта; неорганический люминофор; кросс-релаксация; энергоперенос; квантовый выход

Ссылка при цитировании: Джайсвал Ш.Р., Савала Н.С., Копаркар К.А., Нагпуре П.А., Бхаткар В.Б., Оманвар Ш.К. Эффект даун-конверсии в люминофорах зеленого свечения $BaF_2:Gd^{3+}, Tb^{3+}$ – перспектива использования в безртутных флуоресцентных лампах // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 64–74. DOI: 10.18721/JPM.10306

1. Introduction

Luminescent tubes based on phosphors doped with lanthanide ions are presently useful rely on the ultraviolet (UV) excitation originating from a mercury discharge. These luminescent tubes are very popular for domestic and other purpose lighting applications. The main emission line of mercury is positioned at 254 nm. The major drawback of mercury-based fluorescent lamps is toxicity due to mercury and causes serious environmental concerns. In order to overcome these drawbacks the mercury-based discharge lamps are replaced by a xenon-based fluorescent tube. The xenon discharge has emissions in the vacuum ultraviolet (VUV), particularly the Xe resonance emission line (147 nm) and/or the Xe_2 molecular emission band (172 nm). The advantage of this xenon discharge is that it requires no start-up time. The phosphors presently worn in luminescent tubes do not absorb the 147 and 172 nm radiation efficiently and also undergo as of degradation upon VUV excitation. Moreover, in the conversion of one VUV photon of the xenon discharge into a visible photon more energy is lost [1].

In order to overcome these difficulties, it is necessary to develop the phosphors which absorb one high-energy VUV photon and split into two or more low energy (visible) photons; the phenomenon is known as quantum cutting (QC). The QC provides a means to obtain two or more photons for each absorbed photon [2 – 5]. Therefore it serves as a DC mechanism with quantum efficiency greater than unity and it offers the prospect of providing improved energy efficiency in lighting devices [6]. In order to obtain quantum-cutting phosphors with quantum efficiencies exceeding unity, the lanthanide ions are palpable candidates for this purpose due to their energy level structures that afford metastable levels from which quantum-cutting processes are promising.

Shi, et al. [7] reported that the inorganic host matrix BaF_2 is a crystal having broad band about 10.9 eV. The $BaF_2:Re^{3+}$ (Ce, Pr, Tb, Eu, Dy) were studied in earlier reports [8 – 10]. The process of energy transfer (ET) and QC in BaF_2: Gd^{3+}, Eu^{3+} can occur by the dopants combination of Gd^{3+} and Eu^{3+}, in which Gd^{3+} acts as a sensitizer, and absorbed high energy VUV photon which cuts into two visible photons emitted by two Eu^{3+} ions which act as activators. Palan, et al. [11, 12] reported terbium doped various phosphor materials.

Motivated from the above survey, here we intended to study the visible QC process under the excitation of VUV or UV radiation in $BaF_2:Gd^{3+}$, Tb^{3+} phosphors synthesized via wet chemical method followed by reactive atmosphere process (RAP). Belsare, et al. [13] well discussed the RAP in their papers. Trivalent terbium ions co-doped with Gd^{3+} ions in the BaF_2 host matrix are reported for the first time.

2. Experimental

Barium fluoride (BaF_2) co-doped with Gd^{3+}, Tb^{3+} phosphors was prepared by

wet chemical method followed by reactive atmospheric process. In this method we used metal carbonate like $BaCO_3$ (99.99 % AR) as a precursor. Barium carbonate was taken in the teflon beaker. A small amount of double-distilled water was added into the beaker and stirred it, then hydrofluoric acid (HF) was added in it to get slurry. The slurry was dried by blowing air or heating on a hot plate (80°C). A freshly prepared BaF_2 host was obtained. Gd_2O_3 (99.9% AR) and $Tb_2(SO_4)_3 \cdot 8H_2O$ (99.90 %, AR) were boiled in HNO_3 and evaporated to dryness, so as to convert them into respective nitrates. The aqueous solution of these nitrates was used as a dopant. The 1 mol % of gadolinium nitrate and 1mol % of terbium nitrate were mixed in the host material and dried completely by blowing hot air to obtain dried powder. The dried powder was transferred to a glass tube and about 2.5 wt. % RAP agent was added. In this process, we used ammonium fluoride as a RAP agent. The tube was closed with a tight stopper and slowly heated to 500°C for 2 h. The stopper was removed and the powders were transferred

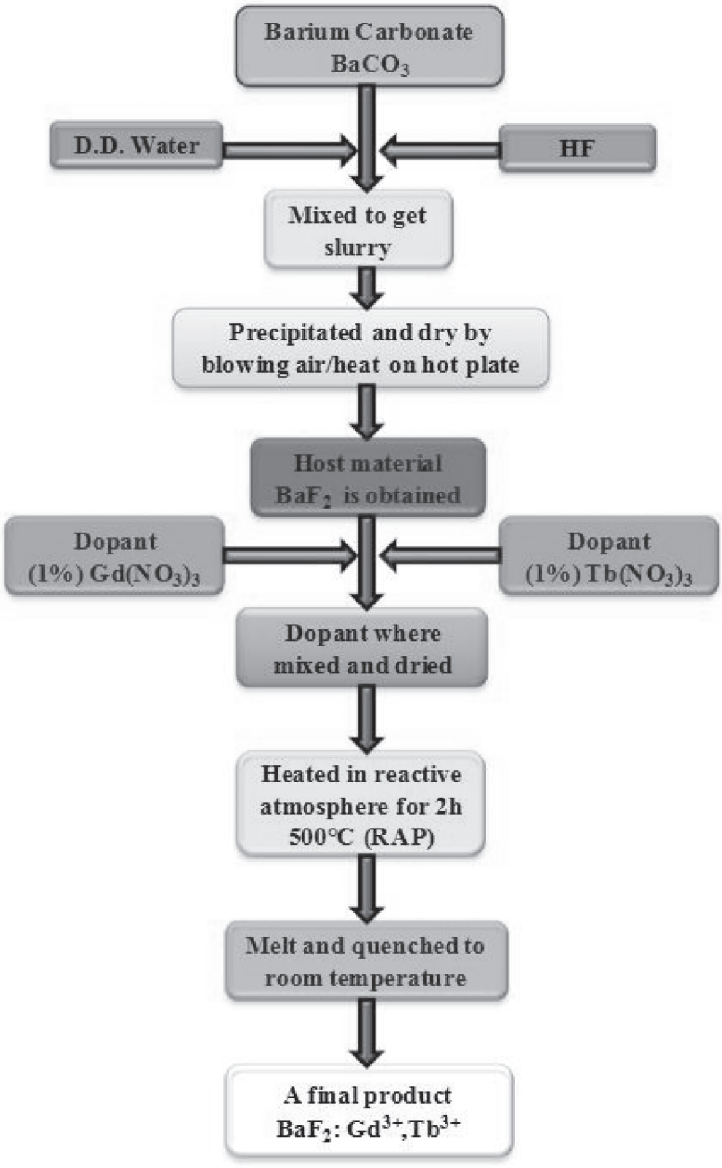


Fig. 1. Flow chart of BaF_2: 1% Gd^{3+}, xTb^{3+} ($0.5\% \le x \le 7.0\%$) synthesized by wet chemical method

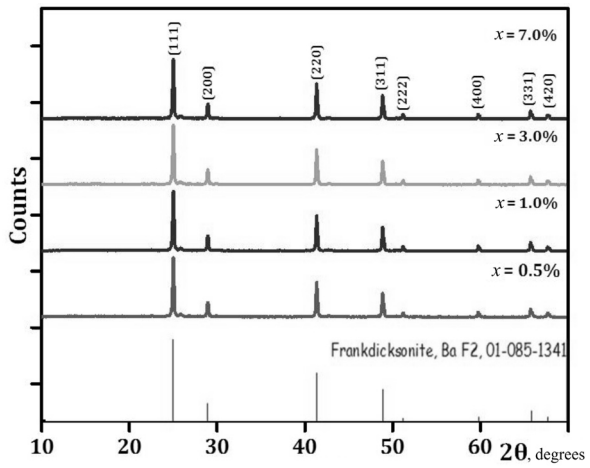


Fig. 2. XRD pattern of BaF_2: 1% Gd^{3+}, xTb^{3+} ($0.5\% \le x \le 7.0$ %) synthesized by wet chemical method

to a graphite crucible pre-heated to a suitable temperature. After heating in the graphite crucible for 1 h the resulting phosphor was rapidly quenched down to room temperature [13]. The complete process involved in the reaction is presented as a flow chart in Fig. 1. The crystal structure of the phosphor powders were characterized by powder X-ray diffraction (XRD) analysis by using Rigaku miniflex II X-ray diffractometer with a scan speed of 2.000°/min and CuK_α (λ = 0.15406 nm) radiation in the range from 10° to 80°. The PLE and PL spectra in the VUV region were measured at 4B8-VUV spectroscopy experimental station on beam line of the Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF), P.R. China. All the measurements were performed at room temperature.

3. Results and discussion

XRD of BaF_2 : 1% Gd^{3+}, xTb^{3+}. The phase purity of BaF_2: 1% Gd^{3+}, xTb^{3+} ($0.5\% \le x \le 7.0\%$) samples were confirmed by XRD pattern as shown in Fig. 2. The XRD pattern of prepared phosphors matched well with ICDD file card No. 01-085-1341. From the XRD pattern, the high intensity peaks were observed at 2θ = 24.87, 28.79, 41.17, 48.70, 51.02, 59.6, 65.62 and 67.55 degrees which correspond to (1 1 1), (2 0 0), (2 2 0), (3 1 1), (2 2 2), (4 0 0), (3 3 1) and (4 2 0) diffraction planes respectively.

Photoluminescence properties of BaF_2: 1% Gd^{3+}, xTb^{3+}. The concentration quenching of Gd^{3+} as a sensitizer in the BaF_2 host matrix was first determined. From Fig. 3 it can be advocated that at 1 mol % of Gd^{3+} ions in BaF_2 the host shows optimum intensity peak at 310 nm under an excitation wavelength of 274 nm [14].

Fig. 4, *a* shows VUV-UV excitation spectra of photoluminescence (PLE spectra) of BaF_2 : 1% Gd $^{3+}$, xTb^{3+} ($0.5\% \le x \le 7.0\%$) in the range from 125 to 300 nm. All the excitation spectra are the same except for their intensities. The spectra were obtained by monitoring at the transition of $^5D_4 \rightarrow {}^7F_5$ of Tb^{3+}, with an emission wavelength of 543 nm. The spectra consist of two bands and one small intensity peak. The first broad excitation band ranging from 150 to 190 nm and second excitation band ranging from 200 to 240 nm are centered at 174 and 219 nm, respectively. They are assigned to spin-allowed transitions from the $4f^8(^7F_6)$ to low-spin $4f^7 5d$ states of Tb^{3+} [15, 16]. The broadening of the absorption band of Tb^{3+} at 219 nm in the excitation spectrum also supports the fact that the origin of absorption is attributed to $4f^8 \rightarrow 4f^7 5d$ (LS) transition, as described by Wegh, et al. [15] and Lee, et al. [17]. Besides, the broadening of the absorption band is also complicated by the overlapping of the excitation transitions accredited to $^8S_{7/2} \rightarrow {}^6G_J$ of Gd^{3+} and $^7F_6 \rightarrow 4f^7 5d$ (LS) of Tb^{3+}. The one small intensity peak at 274 and

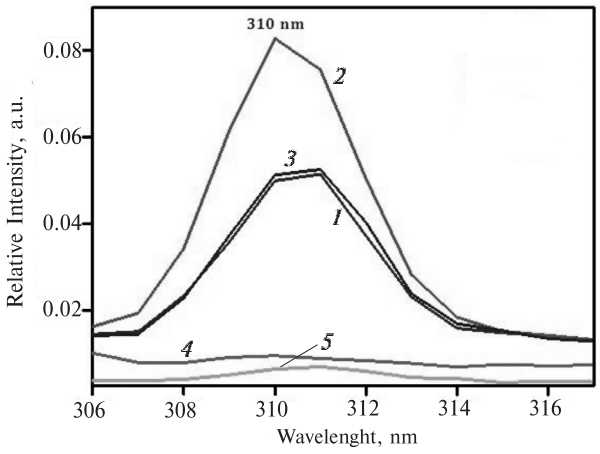


Fig. 3. Photoluminescence emission spectra of BaF_2: x Gd^{3+} under an excitation wavelength of 274 nm; x = 0.5 % (*1*), 1.0 % (*2*), 1.5 % (*3*), 2.0 % (*4*), 3.0 % (*5*)

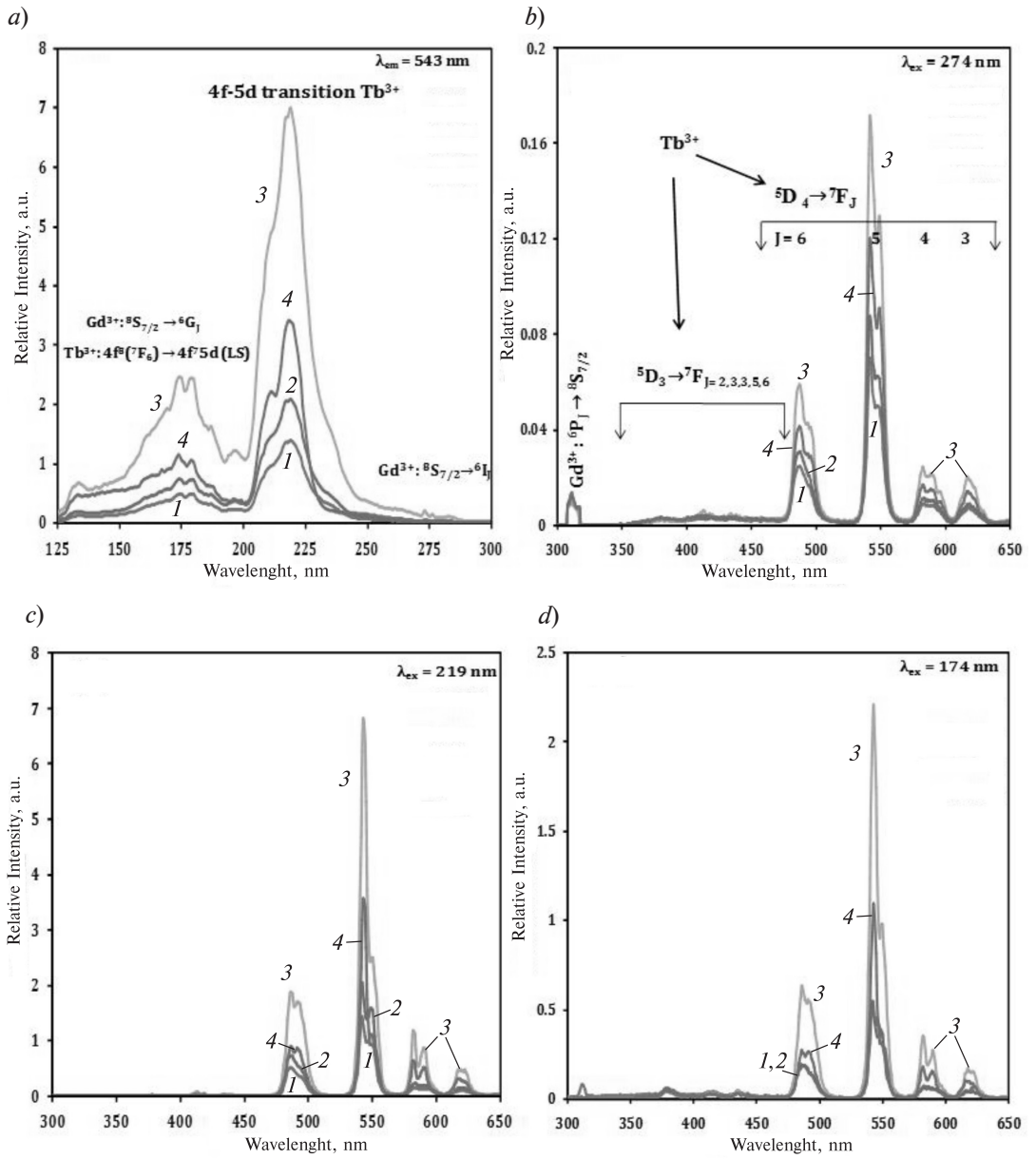


Fig. 4. VUV-UV PLE spectra monitored by the emission line of Tb^{3+} at 543 nm (*a*); PL spectra of the BaF_2: 1% Gd^{3+}, *x*Tb^{3+} (0.5% ≤ *x* ≤ 7.0%) phosphor excited at 274 nm (*b*), 219 nm (*c*) and 174 nm (*d*), respectively. *x* = 0.5 % (*1*), 1.0 % (*2*), 3.0 % (*3*), 7.0 % (*4*)

278 nm are accredited to the $^8S_{7/2}$ ground state to the ^6D_J and ^6I_J states of Gd^{3+}, respectively.

The measured emission spectra of BaF_2: 1% Gd^{3+}, *x*Tb^{3+} (0.5% ≤ *x* ≤ 7.0%) monitored at 274, 219 and 174 nm are shown in Fig. 4, *b*, *c* and *d* . The emissions could be accredited to $^5D_3 \rightarrow {}^7F_J$ (J = 2, 3, 4, 5 and 6) and $^5D_4 \rightarrow {}^7F_J$ (J = 3, 4, 5 and 6) transitions of Tb^{3+} ions among which the transition $^5D_4 \rightarrow {}^7F_5$ leads to the green emission at a wavelength of 543 nm. The $^5D_4$ emission of Tb^{3+} increased while the $^5D_3$ emission decreased with an increase in the Tb^{3+} content, which is due to the cross relaxation between the $^5D_3 \rightarrow {}^5D_4$ transition and $^7F_6 \rightarrow {}^7F_0$ transition of Tb^{3+} [18, 19]. The $^5D_4$ emission of Tb^{3+} increased rapidly with an increase in the concentration of Tb^{3+}. This is due to numerous factors along with the cross relaxation between the $^5D_3$ and $^5D_4$ levels since luminescence centers increase

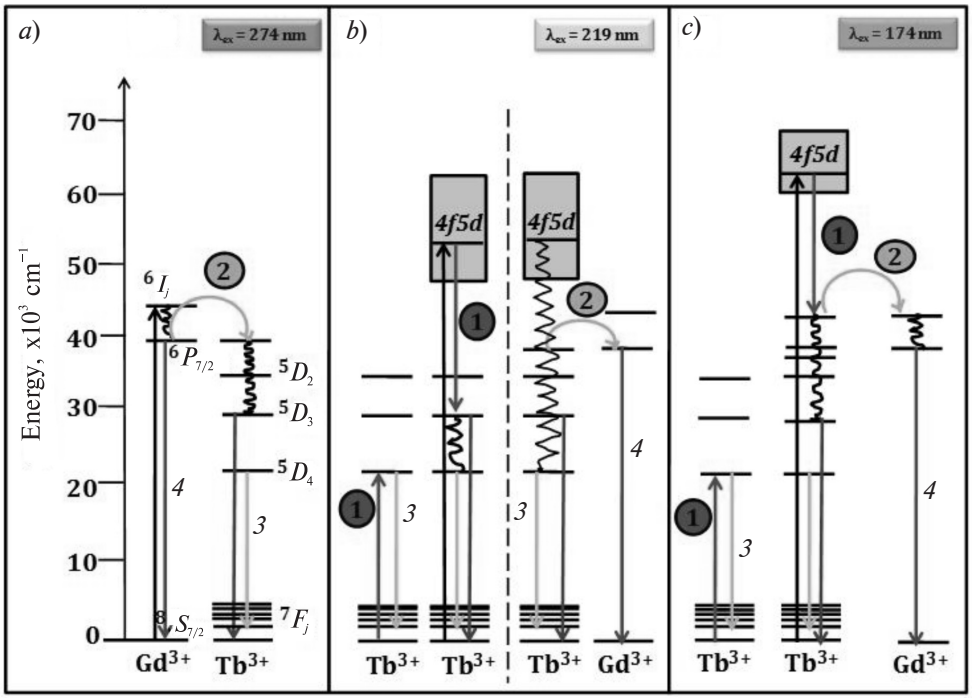


Fig. 5. Energy level diagrams for BaF_2: 1% Gd $^{3+}$, xTb^{3+} showing the mechanism for visible quantum cutting and the energy transfer process excited at 274(*a*), 219(*b*) and 174 nm(*c*)
(1), (2) represent cross relaxation and direct energy transfer mechanisms, respectively; *3*,*4* correspond to green and UV emission lines, respectively

with concentration of Tb^{3+} ions in the host matrix.

Quantum cutting in BaF_2: 1% Gd $^{3+}$, xTb^{3+}. In the QC process, one VUV-UV photon absorbed by Tb^{3+} ion "splits" into more than one visible photons emitted by Tb^{3+} through a cross-relaxation energy transfer (CRET) and a direct energy transfer (DET) between two Tb^{3+} ions or Tb^{3+} and Gd^{3+} ions, depending on the excitation wavelength, was observed in BaF_2: 1% Gd^{3+}, Tb^{3+} samples. Fig. 5 shows three simplified energy level diagrams for $Ba_{(0.99-x)}F_2$: 1% Gd^{3+} , xTb^{3+}. No quantum cutting occurs in BaF_2: 1% Gd $^{3+}$, xTb^{3+} with excitation of the $^8S_{7/2} \rightarrow {}^6I_J$ level of Gd^{3+} (274 nm) as shown in Fig. 5, *a*. When Tb^{3+} ions in the host matrix are excited to their $4f^7 5d^1$ states, the QC process can be realized by two steps: cross relaxation mechanism (step 1 is indicated by number 1 in the circle) and DET (step 2 is indicated by number 2 in the circle) as shown in Fig. 5, *b* and *c*. As revealed by the PL spectra shown in Figs. 6, *a*, *b* and *c*, the QC process is proposed to occur firstly through the pumping of Tb^{3+} and, afterwards, the released energy owing to $4f5d \rightarrow {}^5D_3$ transition was used to pump a neighboring Tb^{3+} by cross-relaxation (indicated by lines number 1) that resulted in green emission at 543 nm (indicated by lines *3*).

Secondly, in the process of relaxation of Tb^{3+} from 4*f*5*d* to higher ^5D_J levels, the released energy could be directly transferred from Tb^{3+} ion to a neighboring Gd^{3+} ion to generate the UV emission at 311 nm (indicated by lines *4*) or the excited Tb^{3+} ion could further relax to the $^5D_{3,\,4}$ levels to generate the second green emitting photon (indicated by line *3*), in which Tb^{3+} plays the role of activator by converting a VUV or UV photon into two green-emitting photons [20].

In the second step, i.e. the process of relaxation of Tb^{3+} from 4*f*5*d* to higher ^5D_J levels, the released energy utilized to excite Tb^{3+}ion could further relax to the $^5D_{3,\,4}$ levels with increasing the Tb^{3+} ions concentration in the host matrix.

The extra quantum efficiency η corresponding to cross relaxation can be theoretically calculated by the emission spectra, and some essential premises are proposed that,

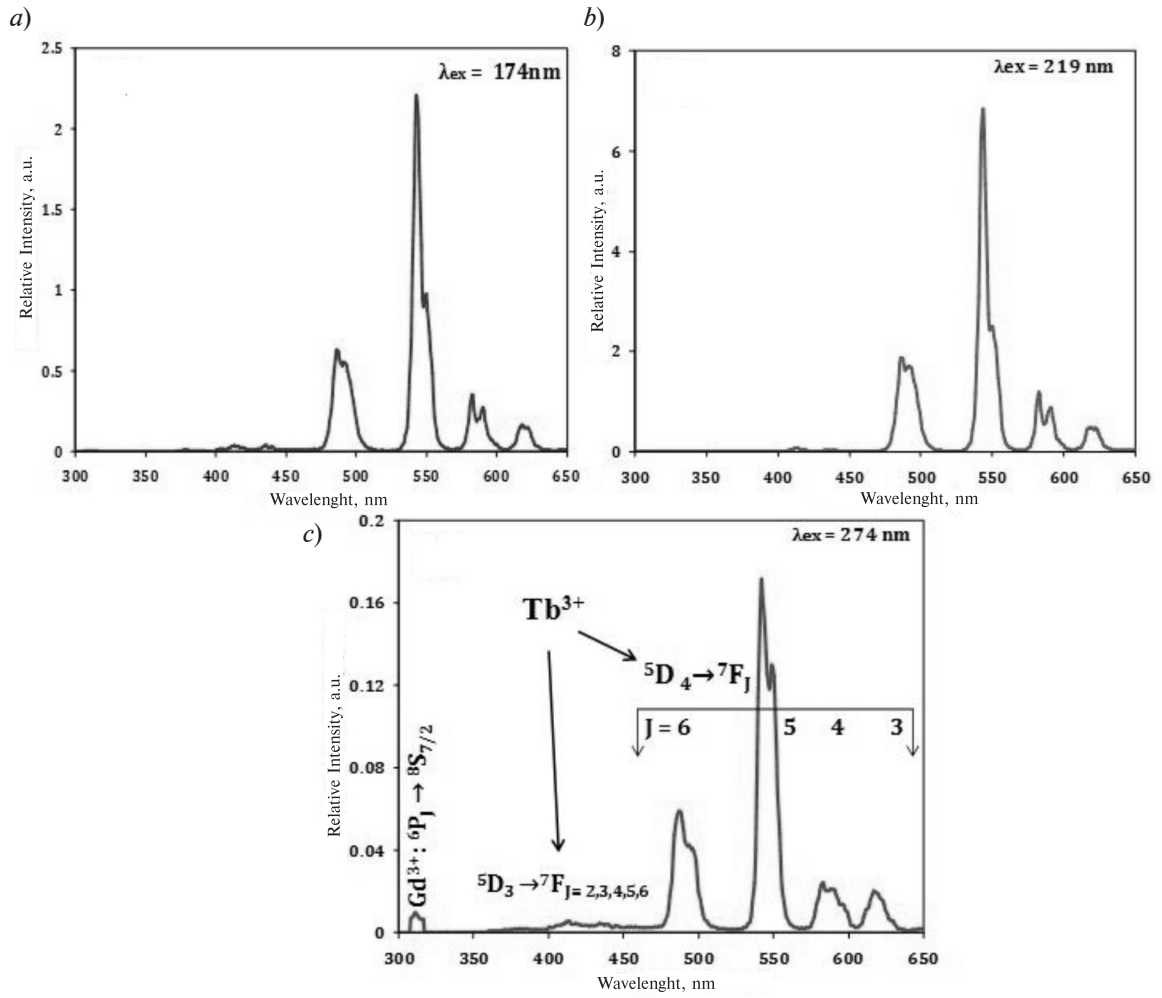


Fig. 6. VUV and UV PL spectra of BaF_2: 1% Gd^{3+}, 3%Tb^{3+} upon excitation at $4f^8 \rightarrow 4f^7 5d$(LS) (*a*) and $f \rightarrow d$ (LSA) (*b*) transitions (174 nm (*a*) and 219 (*b*) nm) on Tb^{3+}, and at ${}^8S_{7/2} \rightarrow {}^6I_J$ excitation (274 nm) on Gd^{3+}(*c*)

the VUV absorption of phosphors should not be taken into account and possible nonradiative losses due to energy migration over defects and impurities in samples must be ignored [20]. For calculations of theoretical value of QE involved in the QC processes, in addition to η_{DT} (i.e., 100 %), we have calculated the extra QE equivalent to cross relaxation (η_{QC}) from Tb^{3+} ion to a neighboring Tb^{3+} ion through QC with the following equation proposed by Wegh, et al. [15, 21 – 24] and modified by Lee, et al. [17]:

$$\eta_{QC} = \eta + \eta_{DT},$$

$$\eta = \frac{P_{CR}}{P_{CR} + P_{DT}} =$$

$$= \frac{R({}^5D_4 \ / \ \text{rest})_{Tb^{3+}} - R({}^5D_4 \ / \ \text{rest})_{Gd^{3+}}}{R({}^5D_4 \ / \ \text{rest})_{Tb^{3+}} + 1}.$$

Here P_{CR}, P_{DT} represent the probabilities for cross relaxation (CR) and direct energy (DE) transfer mechanisms, respectively; $R({}^5D_4/\text{rest})$ is the ratio of PL intensity of ${}^5D_4$ to that accredited to ${}^5D_3$ of Tb^{3+} and ${}^6P_{7/2}$ of Gd^{3+} where the subscripts indicate the excitation from Tb^{3+} or Gd^{3+}. If the QE of a phosphor via DET is 100%, from the integrated peak intensity then the cross relaxation efficiency of the phosphor was calculated theoretically.

The CRET efficiency increases with an increase in Tb^{3+} content in the host matrix and, according to calculations, maximum quantum

efficiency (QE) was calculated to be 148 % and 177% under the excitation wavelength of 174 and 219 nm, respectively, at 3% of Tb^{3+} ions concentration. The cross-relaxation efficiency decrease at $x = 7$ % concentration of Tb^{3+} may be due to a high concentration of defects or impurities in the host matrix [25].

4. Conclusions

The $Ba_{(0.99-x)}F_2$: 1% Gd^{3+}, xTb^{3+} (0.5 % ≤ x ≤ ≤ 7.0 %) phosphors were successfully prepared by the wet chemical method under RAP. Visible quantum cutting through down conversion has been observed in BaF_2 : 1% Gd^{3+}, xTb^{3+} phosphor. The quantum efficiency of BaF_2 : 1% Gd^{3+}, xTb^{3+} phosphor was calculated and the optimal theoretical quantum efficiency was found to be 148 and 177 % under the excitation of 174 and 219 nm, respectively, for 3 % of Tb^{3+} ions. From the above investigational report we conclude that the phosphors BaF_2: Gd^{3+}, Tb^{3+} can be an excellent potential candidate for the applications in Hg-free fluorescent lamps, plasma display panels and 3D PDPs technology.

Acknowledgements

We appreciative to 4B8 VUV spectroscopy beam line scientists of Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF), P.R. China, for providing that access for recording VUV on beamline 4B8 under dedicated synchrotron mode using remote access mode. One of the authors, S.R. Jaiswal, is thankful to the chairman of FIST-DST project, Department of Physics, Sant Gadge Baba Amravati University, Amravati, for providing necessary facilities, and the authors are also thankful to Dr. G.V. Korpe, Department of Chemistry, Shri Shivaji Science College, Akola, for moral and official supports.

REFERENCES

[1] **P.S. Peijzel, A. Meijerink**, Visible photon cascade emission from the high energy levels of Er^{3+}, Chem. Phys. Lett. 401 (1) (2005) 241–245.

[2] **N.S. Sawala, S.K. Omanwar**, Down conversion from ultraviolet to near infrared region in novel Yb^{3+} doped $LiSrVO_4$ phosphor, J. Alloys Compd. 686 (Nov. 25) (2016) 287–291.

[3] **N.S. Sawala, S.K. Omanwar**, Spectral downshifting from blue to near infrared region in Ce^{3+}-Nd^{3+} co-doped YAG phosphor, Infrared Phys. Technol. 77 (July) (2016) 480 –484.

[4] **N.S. Sawala, N.S. Bajaj, S.K. Omanwar**, Near-infrared quantum cutting in Yb^{3+} ion doped strontium vanadate, Infrared Phys. Technol. 76 (May) (2016) 271–275.

[5] **C.R. Ronda**, Phosphors for lamps and displays: an application view, J. Alloys Compd. 225 (1–2) (1993) 534–538.

[6] **N.S. Sawala, K.A. Koparkar, N.S. Bajaj, and S.K. Omanwar**, Near infrared photoluminescence in $La_{0.98}AlO_3$: $_{0.02}$ Ln^{3+} (Ln = Nd/Yb) for sensitization of *c*-Si solar cells, AIP Conf. Proc. 1728 (1) (2016) 020250 1–6.

[7] **C.S. Shi, T. Kloiber, G. Zimmerer**, Temperature effect of the luminescence band at 300 nm from BaF_2 crystals, J. Lumin. 48–49, 2 (Jan.-Feb.) (1991) 597–600.

[8] **A.S Grabtchikov, A.N. Kuzmin, V.A. Lisinetskii, G.I Ryabtsev, V.A Orlovich, A.A Demidovich**, Stimulated Raman scattering in Nd:KGW laser with diode pumping, J. Alloys Compd. 300–301 (Apr. 12) (2000) 300–302.

[9] **N.S. Sawala, S.K. Omanwar**, Near infrared DC approach by Bi^{3+}–Yb^{3+} co-doped YAG phosphor, Res. Chem. Intermed. 43(2) (2016) 693–702.

[10] **A.J. Wojtowicz, P. Szupryczynski, W. Drozdowski**, Radiative recombination in Ce-, Pr-, and Tb-doped barium fluoride, J. Alloys Compd. 300–301 (Apr.,12)(2000) 199–206.

[11] **C. Shi, Z. Xie, J. Deng**, Thermoluminescence of BaF_2 : RE (Ce, Dy, Eu) crystals, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 79 (May) (1996) 87–90.

[12] **C.B. Palan, N.S. Bajaj, A. Soni, S.K. Omanwar**, A novel $KMgPO_4$: Tb^{3+} (KMPT) phosphor for radiation dosimetry, J. Lumin. 176 (Aug.) (2016) 106–111.

[13] **C.B. Palan, N.S. Bajaj, A. Soni, M.S. Kulkarni, S.K. Omanwar**, Combustion synthesis and preliminary luminescence studies of $LiBaPO_4$: Tb^{3+} phosphor, Bulletin of Materials Science. 38 (6) (2015) 1527–1531.

[14] **P. Belsare, C. Joshi, S. Moharil, V. Kondawar, P. Muthal, S. Dhopte**, Luminescence of Eu^{2+} in some fluorides prepared by reactive atmosphere processing, J. Alloys Compd. 450 (1) (2008) 468–472.

[15] **A.O. Chauhan, A.B. Gawande, S.K. Omanwar**, Narrow band UVB emitting phosphor $LaPO_4$: Gd^{3+} for phototherapy lamp, Optik-Int. J. Light Electron Opt. 127 (16) (2016) 6647–6652.

[16] **R. Wegh, E. van Loef, A. Meijerink**, Visible quantum cutting via downconversion in $LiGdF_4$: Er^{3+}, Tb^{3+} upon Er^{3+} $4f^{11}\rightarrow 4f^{10}5d$ excitation, J.

Lumin. 90 (3–4) (2000) 111–122.

[17] **T. Lee, L. Luo, B. Cheng, W. Diau, T. Chen**, Investigation of Pr^{3+} as a sensitizer in quantum-cutting fluoride phosphors, Appl. Phys. Lett. 92 (8) (2008) 081106.

[17] **L. Pieterson, M. Reid, G. Burdick, A. Meijerink**, $4f^n \rightarrow 4f^{n-1}$ $5d$ transitions of the light lanthanides: Experiment and theory, Phys. Rev. B. 65 (4) (2002) 45113–16.

[19] **Z. Tian, H. Liang, W. Chen, Q. Su, G. Zhang, G. Yang**, Efficient emission-tunable VUV phosphors $Na_2GdF_2PO_4:Tb^{3+}$, Opt. Express. 17 (2) (2009) 956–962.

[20] **Y. Li, Y. Chang, Y. Chang, Y. Lin, C. Laing**, Luminescence and energy transfer properties of Gd^{3+} and Tb^{3+} in $LaAlGe_2O_7$, J. Phys. Chem. C. 111 (28) (2007) 10682–10688.

[21] **H. Tzenga, B. Chengb, T. Chena**, Visible quantum cutting in green-emitting $BaGdF_5:Tb^{3+}$ phosphors via downconversion, J. Lumin. 122–123 (Jan.–Apr.) (2007) 917–920.

[22] **R. Wegh, H. Donker, K. Oskam, A. Meijerink**, Visible quantum cutting in $LiGdF_4:Eu^{3+}$ through downconversion, Science 283 (5402) (1999) 663–666.

[23] **S.R. Jaiswal, N.S. Sawala, P.A. Nagpure, V.B. Bhatkar, S.K. Omanwar**, Visible quantum cutting in Tb^{3+}-doped $BaGdF_5$ phosphor for plasma display panel, J. Mater. Sci: Mater. Electron. 28 (3) (2017) 2407–2414.

[24] **R. Wegh, H. Donker, K. Oskam, A. Meijerink**, Visible quantum cutting in Eu^{3+}-doped gadolinium fluorides via downconversion, J. Lumin. 82 (2) (1999) 93–104.

[25] **D. Wang, N. Kodama**, Visible quantum cutting through downconversion in $GdPO_4:Tb^{3+}$ and $Sr_3Gd(PO_4)_3:Tb^{3+}$, J. Solid State Chem. 182 (8) (2009) 2219–2224.

Received 27.04.2017, accepted 26.06.2017.

THE AUTHORS

JAISWAL Shailesh R.
Department of Physics, Shri Shivaji Science College
Shivaji Nagar, Morshi Road, Amravati, Maharastra 444602, India

SAWALA Niraj S.
Department of Physics, Sant Gadge Baba Amravati University
Mardi Road, Amravati, Maharastra 444602, India
nssawala@gmail.com

KOPARKAR Kishor A.
Department of Physics, Sant Gadge Baba Amravati University
Mardi Road, Amravati, Maharastra 444602, India

NAGPURE Pankaj A.
Department of Physics, Shri Shivaji Science College
Shivaji Nagar, Morshi Road, Amravati, Maharastra 444602, India

BHATKAR Vinod B.
Department of Physics, Shri Shivaji Science College, Amravati
Shivaji Nagar, Morshi Road, Amravati, Maharastra 444602, India

OMANWAR Shreeniwas K.
Department of Physics, Sant Gadge Baba Amravati University
Mardi Road, Amravati, Maharastra 444602, India
omanwar@sgbau.ac.in

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Peijzel P.S., Meijerink A.** Visible photon cascade emission from the high energy levels of Er^{3+} // Chem. Phys. Lett. 2005. Vol. 401. No. 1. Pp. 241–245.

2. **Sawala N.S., Omanwar S.K.** Downconversion from ultra violet to near infer red region in novel Yb^{3+} doped $LiSrVO_4$ phosphor // J. Alloys Compd. 2016. Vol. 686. Nov. 25. Pp. 287–291.

3. **Sawala N.S., Omanwar S.K.** Spectral downshifting from blue to near infer red region in

Ce^{3+}-Nd^{3+} co-doped YAG phosphor // Infrared Phys. Technol., 2016. Vol. 77. July. Pp. 480 −484.

4. **Sawala N.S., Bajaj N.S., Omanwar S.K.** Near-infrared quantum cutting in Yb^{3+} ion doped strontium vanadate // Infrared Phys. Technol. 2016. Vol. 76. May. Pp. 271−275.

5. **Ronda C.R.** Phosphors for lamps and displays: an applicational view // J. Alloys Compd. 1993. Vol. 225. No. 1−2. Pp. 534 −538.

6. **Sawala N.S., Koparkar K.A., Bajaj N.S., Omanwar S.K.** Near infrared photoluminescence in $La_{0.98}AlO_3$: $_{0.02}$ Ln^{3+} (Ln = Nd/Yb) for sensitization of *c*-Si solar cells // AIP Conf. Proc. 2016. Vol. 1728. No. 1. Pp. 020250, 1−6.

7. **Shi C.S., Kloiber T., Zimmerer G.** Temperature effect of the luminescence band at 300 nm from BaF_2 crystals // J. Lumin. 1991. Vol. 48−49. Part 2. Jan.-Feb. Pp. 597−600.

8. **Grabtchikov A.S., Kuzmin A.N., Lisinetskii V.A., Ryabtsev G.I., Orlovich V.A., Demidovich A.A.** Stimulated Raman scattering in Nd:KGW laser with diode pumping // J. Alloys Compd. 2000. Vol. 300−301. Apr. 12. Pp. 300−302.

9. **Sawala N.S., Omanwar S.K.** Near infrared DC approach by Bi^{3+}−Yb^{3+} co-doped YAG phosphor // Res. Chem. Intermed. 2016. Vol. 43. No. 2. Pp. 693−702.

10. **Wojtowicz A.J., Szupryczynski P., Drozdowski W.** Radiative recombination in Ce-, Pr-, and Tb-doped barium fluoride // J. Alloys Compd. 2000. Vol. 300−301. Apr. 12. Pp. 199−206.

11. **Shi C., Xie Z., Deng J.** Thermoluminescence of BaF_2:RE(Ce, Dy, Eu) crystals // J. Electron Spectros. Relat. Phenom. 1996. Vol. 79. May. Pp. 87−90.

12. **Palan C.B., Bajaj N.S., Soni A., Omanwar S.K.** A novel $KMgPO_4$: Tb^{3+}(KMPT) phosphor for radiation dosimetry // J. Lumin. 2016. Vol. 176. Aug. Pp. 106−111.

13. **Palan C.B., Bajaj N.S., Soni A., Kulkarni M.S., Omanwar S.K.** Combustion synthesis and preliminary luminescence studies of $LiBaPO_4$: Tb^{3+} phosphor // Bulletin of Materials Science. 2015. Vol. 38. No. 6. Pp. 1527−1531.

14. **Belsare P., Joshi C., Moharil S., Kondawar V., Muthal P., Dhopte S.** Luminescence of Eu^{2+} in some fluorides prepared by reactive atmosphere processing // J. Alloys Compd. 2008. Vol. 450. No. 1. Pp. 468−472.

15. **Chauhan A.O., Gawande A.B., Omanwar S.K.** Narrow band UVB emitting phosphor $LaPO_4$: Gd^{3+} for phototherapy lamp // Optik-Int. J. Light Electron Opt., 2016. Vol. 127. No. 16. Pp. 6647−6652.

16. **Wegh R., van Loef E., Meijerink A.** Visible quantum cutting via downconversion in $LiGdF_4$: Er^{3+}, Tb^{3+} upon Er^{3+} $4f^{11} \rightarrow 4f^{10}5d$ excitation // J. Lumin. 2000. Vol. 90. No. 3−4. Pp. 111−122.

17. **Lee T., Luo L., Cheng B., Diau W., Chen T.** Investigation of Pr^{3+} as a sensitizer in quantum-cutting fluoride phosphors // Appl. Phys. Lett. 2008. Vol. 92. No. 8. P. 081106.

18. **Pieterson L., Reid M., Burdick G., Meijerink A.** $4f^n \rightarrow 4f^{n-1}$ $5d$ transitions of the light lanthanides: Experiment and theory // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. No. 4. P. 45113−45116.

19. **Tian Z., Liang H.,Chen W., Su Q., Zhang G., Yang G.** Efficient emission-tunable VUV phosphors $Na_2GdF_2PO_4$:Tb^{3+} // Opt. Express. 2009. Vol. 17. No. 2. Pp. 956−962.

20. **Li Y., Chang Y., Chang Y., Lin Y., and Laing C.** Luminescence and energy transfer properties of Gd^{3+} and Tb^{3+} in $LaAlGe_2O_7$ // J. Phys. Chem. C. 2007. Vol. 111. No. 28. Pp. 10682−10688.

21. **Tzenga H., Chengb B., Chena T.** Visible quantum cutting in green-emitting $BaGdF_5$:Tb^{3+} phosphors via down conversion // J. Lumin. 2007. Vol. 122−123. Jan. −Apr. Pp. 917−920.

22. **Wegh R., Donker H., Oskam K., Meijerink A.** Visible quantum cutting in $LiGdF_4$:Eu^{3+} through down conversion // Science. 1999. Vol. 283. No. 5402. Pp. 663−666.

23. **Jaiswal S.R., Sawala N.S., Nagpure P.A., Bhatkar V.B., Omanwar S.K.** Visible quantum cutting in Tb^{3+} doped $BaGdF_5$ phosphor for plasma display panel // J. Mater. Sci.: Mater. Electron. 2017. Vol. 28. No. 3. Pp. 2407−2414.

24. **Wegh R., Donker H., Oskam K., Meijerink A.** Visible quantum cutting in Eu^{3+}-doped gadolinium fluorides via downconversion // J. Lumin. 1999. Vol. 82. No. 2. Pp. 93−104.

25. **Wang D., Kodama N.** Visible quantum cutting through down conversion in $GdPO_4$:Tb^{3+} and $Sr_3Gd(PO_4)_3$:Tb^{3+} // J. Solid State Chem. 2009. Vol. 182. No. 8. Pp. 2219−2224.

Статья поступила в редакцию 27.04.2017, принята к публикации 26.06.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ДЖАЙСВАЛ Шайлеш − *сотрудник кафедры физики Научного колледжа Шри Шиваджи, г. Амравати, Индия.*

Shivaji Nagar, Morshi Road, Amravati, Maharastra 444602, India

САВАЛА Нираж – *сотрудник кафедры физики Университета Амравати имени Сант Гадж Баба, г. Амравати, Индия.*
Mardi Road, Amravati, Maharastra 444602, India
nssawala@gmail.com

КОПАРКАР Кишор – *сотрудник кафедры физики Университета Амравати имени Сант Гадж Баба, г. Амравати, Индия.*
Mardi Road, Amravati, Maharastra 444602, India

НАГПУРЕ Панкадж – *сотрудник кафедры физики Научного колледжа Шри Шиваджи, г. Амравати, Индия.*
Shivaji Nagar, Morshi Road, Amravati, Maharastra 444602, India

БАТКАР Винод – *сотрудник кафедры физики Научного колледжа Шри Шиваджи, г. Амравати, Индия..*
Shivaji Nagar, Morshi Road, Amravati, Maharastra 444602, India

ОМАНВАР Шринивас Керба – *заведующий кафедрой физики Университета Амравати имени Сант Гадж Баба, г. Амравати, Индия.*
Mardi Road, Amravati, Maharastra 444602, India
omanwar@sgbau.ac.in

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

DOI: 10.18721/JPM.10307
УДК 535.3

ФОРМИРОВАНИЕ УГЛОВОЙ ЗАВИСИМОСТИ ИНТЕНСИВНОСТИ СВЕТА, РАССЕЯННОГО НА ОПТИЧЕСКИ ПЛОТНОМ АТОМНОМ АНСАМБЛЕ

Н.В. Ларионов

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

Теоретически исследуется рассеяние пробного излучения на оптически плотном холодном атомном ансамбле. Для описания многократного рассеяния света атомами ансамбля используется квантово-электродинамический подход, основанный на диаграммной технике Константинова – Переля – Келдыша. С помощью этого подхода, для случая неподвижных двухуровневых атомов (переход $J_g = 0 \rightarrow J_e = 1$) выводится явное аналитическое выражение для сечения n-кратного некогерентного рассеяния. Численный анализ полученного выражения, проведенный методом Монте-Карло, позволил проследить роль различных порядков рассеяния в формировании угловой зависимости интенсивности рассеянного света.

Ключевые слова: холодный атомный ансамбль; многократное рассеяние света; диаграммная техника Константинова – Переля – Келдыша; некогерентное рассеяние

Ссылка при цитировании: Ларионов Н.В. Формирование угловой зависимости интенсивности света, рассеянного на оптически плотном атомном ансамбле // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 75–83. DOI: 10.18721/JPM.10307

FORMATION OF THE ANGULAR DEPENDENCE OF INTENSITY OF THE LIGHT SCATTERED ON THE OPTICALLY DENSE ATOMIC ENSEMBLE

N.V. Larionov

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

The probe light scattering on the cold optically dense atomic ensemble is studied theoretically in the paper. In order to describe the multiple scattering of light in the context of quantum electrodynamics the Konstantinov – Perel – Keldysh diagram technique has been used. This technique allows one to rewrite the considered case of the light scattering in terms of diagram series where each term describes the incoherent scattering of certain order. Decoding of these terms allowed us to obtain the explicit analytical expression for the cross-section of multiple incoherent scattering for the case of moveless two level atoms (transition $J_g = 0 \rightarrow J_e = 1$). The numerical analysis of this expression carried out by applying the Monte-Carlo simulation made possible to find out an influence of different orders of scattering on forming the angular dependence of scattered light intensity.

Keywords: cold atomic ensemble; Konstantinov – Perel – Keldysh diagram technique; incoherent scattering

Citation: N.V. Larionov, Formation of the angular dependence of intensity of the light scattered on the optically dense atomic ensemble, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (2) (2017) 75–83. DOI: 10.18721/JPM.10307

Введение

В настоящее время проводятся различные эксперименты по изучению взаимодействия пробного оптического излучения с холодными ансамблями щелочных или щелочноземельных атомов. Данные ансамбли приготавливаются в магнитооптических ловушках (МОЛ), позволяющих контролировать такие важные характеристики атомного облака, как его размер и форма, температура, концентрация атомов, а также заселенность энергетических уровней. Благодаря этому, такие ансамбли представляют собой удобные модельные объекты в экспериментах, направленных, в частности, на исследование и нахождение способов мониторинга различных эффектов. В основе последних могут лежать как процессы многократного рассеяния света (например, когерентное обратное рассеяние света (КОР), деструктивная интерференция при КОР), так и процессы, связанные с интерференцией атомных состояний (электромагнитно-индуцированная прозрачность, когерентное пленение населенностей).

Пробное излучение, рассеянное атомной средой, содержит кроме когерентной составляющей (ее сечение пропорционально второй степени числа рассеивателей) некогерентный вклад, обусловленный актами некогерентного рассеяния света (рассеяния не в моду падающего излучения) на атомах ансамбля.

Корректное описание вышеупомянутых эффектов для случая оптически плотного ансамбля возможно лишь при учете всех кратностей рассеяния, существенных при данных параметрах облака. Так, в работе [1], посвященной КОР, исследовалась форма конуса обратного рассеяния света ансамблем покоящихся атомов ^{85}Rb. Авторы провели анализ влияния числа учтенных в расчетах порядков рассеяния на скорость сходимости фактора усиления для рассеяния строго назад. Напомним, что этот фактор есть отношение интерференционной составляющей, обусловленной наложением двух встречных волн и ответственной за эффект КОР, к неинтерференционной фоновой подложке. В этой работе показано, что для получения фактора усиления с точностью до нескольких процентов, при определенных оптических толщинах b ($b = 1 - 6$) и концентрациях n_0 ($n_0 \approx 10^9 - 10^{10}$ см$^{-3}$), необходимо учитывать число порядков рассеяния, приблизительно равное удвоенной оптической толщине.

В данном исследовании мы будем рассматривать сходимость только неинтерференционной компоненты рассеянного света и, следовательно, ограничимся углами рассеяния, лежащими вне узкого конуса обратного рассеяния, куда основной вклад вносит интерференционная компонента.

Теоретическое описание рассеяния света

Рассмотрим атомный ансамбль, приготовленный в МОЛ, который облучается пробным светом; источником этого света служит излучение перестраиваемого лазера. Интенсивность излучения мала настолько, что всеми нелинейными эффектами можно пренебречь. Спектральная ширина излучения и поперечные размеры луча лазера такие, что падающая на атомный ансамбль волна может считаться плоской и монохроматической.

Свет от лазера пропускается через поляризатор P, а рассеянное ансамблем поле проходит перед детектированием поляризационный анализатор **A. Путем использования** различных типов поляризатора и анализатора можно организовать несколько поляризационных схем эксперимента. Здесь будет рассмотрена схема $H \| H$, соответствующая анализу рассеянного света с такой же спиральностью, как и у падающего фотона.

С помощью фотодетекторов, установленных под нужным углом, исследуется угловая зависимость рассеянного света. Квантовая теория фотодетектирования, развитая Р. Глаубером [2], позволяет вы-

разить ток фотодетектора в условиях спектрального и поляризационного анализов рассеянного света в следующем виде:

$$i(\omega) = \int d\tau e^{i\omega\tau} \sum_{\mu_1,\mu_2} \frac{\varsigma ec}{2\pi\hbar\omega} \int_S d^2 r\, f_{\mu_1,\mu_2} \times \quad (1)$$
$$\times\, D^{(E)}_{\mu_1,\mu_2}(\mathbf{r}, t+\tau/2; \mathbf{r}, t-\tau/2),$$

где $i(\omega)$ – Фурье-образ тока фотодетектора, причем величина ω определяется частотой спектрального фильтра, расположенного перед ним; ς – квантовая эффективность фотоприемника; e, c – заряд электрона и скорость света; матрица f_{μ_1,μ_2} характеризует свойства поляризационного анализатора; поляризационные индексы $\mu_1, \mu_2 = (x, y)$ определены в декартовой системе координат с осью z, направленной вдоль волнового вектора света; $D^{(E)}_{\mu,\mu'}(\mathbf{r}, t_1; \mathbf{r}, t_2)$ – корреляционная функция электромагнитного поля второго порядка.

Функция $D^{(E)}_{\mu,\mu'}(\mathbf{r}, t_1; \mathbf{r}, t_2)$ выражается через отрицательно-частотную $(\widehat{E}^{(-)}_{\mu}(\mathbf{r}, t))$ и положительно-частотную $(\widehat{E}^{(+)}_{\mu'}(\mathbf{r}, t))$ компоненты операторов напряженностей электрического поля, записанных в представлении Гейзенберга и определенных на поверхности фотодетектора в моменты времени t_1 и t_2, соответственно:

$$D^{(E)}_{\mu,\mu'}(\mathbf{r}, t_1; \mathbf{r}, t_2) = \left\langle \widehat{E}^{(-)}_{\mu}(\mathbf{r}, t_1) \widehat{E}^{(+)}_{\mu'}(\mathbf{r}, t_2) \right\rangle. \quad (2)$$

Угловые скобки в этом выражении соответствуют квантовому статистическому усреднению по оператору плотности всей рассматриваемой системы. Интегрирование в выражении (1) ведется по поверхности S фотодетектора.

Анализ корреляционной функции, входящей в это выражение, проводился с помощью диаграммной техники Константинова – Переля – Келдыша для неравновесных систем [3]. Применение этой техники к исследованию атомных ансамблей рассмотрено в работах [4 – 7], а в работах [8, 9] эта теория была модифицирована для ряда практически важных случаев. Здесь же приведем ключевые моменты теории, которые будут использоваться в данной статье.

Все диаграммы, описывающие процесс рассеяния света, можно разбить на две группы. Первая соответствует интерференционным вкладам; сюда же можно отнести вклад, описывающий когерентное рассеяние (рассеяние в моду падающего излучения), а также специфический вклад, отвечающий за эффект КОР света. Нас будет интересовать вторая группа, соответствующая неинтерференционному вкладу, который описывается так называемыми лестничными диаграммами (рис. 1). Этот диаграммный ряд представлен в виде разложения по числу актов некогерентного

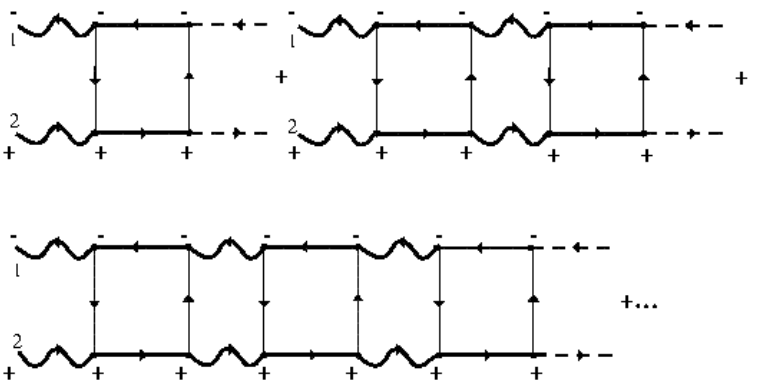


Рис. 1. Лестничный диаграммный ряд.
Представлены первые три диаграммы из бесконечного диаграммного ряда, соответствующие однократному, двукратному и трехкратному некогерентным рассеяниям; входящее пробное излучение (жирный пунктир), функции Грина основного и возбужденного состояний атома (тонкая и жирная прямые линии, соответственно) и фотонная функция Грина (жирная волнистая линия). Индексы 1 и 2 соответствуют следующей паре аргументов в формуле (2): ($\mathbf{r}_1$, t_1) и ($\mathbf{r}_2$, t_2)

рассеяния (при таком рассеянии происходит изменение волнового вектора фотона).

На диаграммах рис. 1 жирная пунктирная линия соответствует пробному излучению, испытавшему когерентное рассеяние на пути от источника до атома; на этом атоме происходит акт некогерентного рассеяния. Жирная прямая линия соответствует функции Грина возбужденного состояния атома, учитывающей взаимодействие с вакуумным термостатом, который обуславливает спонтанный распад. Жирная волнистая линия соответствует фотонной функции Грина. Тонкая прямая линия соответствует функции Грина основного состояния, в котором атомы были приготовлены с помощью МОЛ. Таким образом, первой диаграмме в бесконечном ряду на рис. 1 соответствует однократное некогерентное рассеяние, второй диаграмме с двумя атомными петлями – двукратное некогерентное рассеяние и т. д. Каждой такой диаграмме можно сопоставить аналитическое выражение для дифференциального сечения рассеяния $d\sigma^{(n)} / d\Omega$, представляющее собой n-кратный вклад в полное сечение.

Характеристики атомного ансамбля. Запишем конкретные характеристики атомного ансамбля, исследуемого в статье, и приведем аналитическое выражение для $d\sigma^{(n)} / d\Omega$.

Будем рассматривать неподвижные атомы, что оправдано низкими температурами атомного ансамбля в соответствующих экспериментах ($T \approx 50$ мкК [10]), когда характерные доплеровские сдвиги частот во много раз меньше ширины линии рассматриваемого перехода. Энергетическая структура атома представлена двумя уровнями:

основной уровень с энергией E_g, он характеризуется квантовыми числами $J_g = 0$, $M_g = 0$;

возбужденный уровень E_e, характеризуется квантовыми числами $J_e = 1$, $M_e = 0, \pm 1$.

Частота перехода между этими уровнями выражается как

$$\omega_0 = (E_e - E_g) / \hbar.$$

Атомы в облаке приготовлены в основном состоянии, частота пробного излучения $\omega \approx \omega_0$. Одноатомная матрица плотности (межатомные корреляции предполагаются отсутствующими) имеет следующий вид:

$$\rho_{J_g,J_g}(\mathbf{r},\mathbf{v}) = \frac{1}{(2J_g+1)} n(\mathbf{r}) f(\mathbf{v}) = \\ = n_0 \exp\left(-\frac{r^2}{2r_0^2}\right)\delta(\mathbf{v})(2\pi\hbar)^3, \quad (3)$$

где пространственное распределение атомов $n(\mathbf{r})$ принимается гауссовым, с концентрацией атомов в центре облака n_0 и «радиусом» облака r_0.

При этом предполагаем, что $n_0 \lambda^3 << 1$, т. е., как и отмечено выше, не рассматривается случай, когда необходимо учитывать зависимое рассеяние (см., например, работы [11, 12]). Распределение по скоростям $f(\mathbf{v})$ дается δ-функцией Дирака, центрированной на нулевом векторе скорости центра масс атома.

Если рассматривать предельный случай рассеяния на одном атоме, то легко получить следующее выражение для дифференциального сечения:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\omega_0^4}{c^4}\left|\alpha_{s,p}(\omega)\right|^2, \quad (4)$$

где матрица рассеяния

$$\alpha_{s,p}(\omega) = \frac{1}{\hbar(\omega-\omega_0)+i\hbar\gamma/2} \times \\ \times \sum_{M_e} (\mathbf{e}_s^* \cdot \mathbf{d}_{J_g M_g, J_e M_e})(\mathbf{d}_{J_e M_e, J_g M_g} \cdot \mathbf{e}_p). \quad (5)$$

Здесь $\mathbf{d}_{J_g M_g, J_e M_e} = (\mathbf{d}_{J_e M_e, J_g M_g})^*$ – матричный элемент дипольного момента перехода $J_e, M_e \to J_g, M_g$; $\mathbf{e}_p$, $\mathbf{e}_s$ – векторы поляризации падающего и рассеянного фотонов, соответственно; γ – ширина линии возбужденного состояния атома.

Выражение (4) соответствует первой диаграмме в ряду (см. рис. 1) с тонкими «фотонными» линиями (волнистой и пунктирной).

Учет когерентного распространения света вперед, между актами некогерентного рассеяния, проводится в переделе геометрической оптики. Для этого (см. работу [6]) положительно частотную часть функции Грина фотона в среде записывают в

следующем виде:

$$D^{(R)}_{\mu,\mu'+}(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1)=X_{\mu,\mu'}(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1,\omega)\frac{\exp\left(i\frac{\omega}{c}|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1|\right)}{|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1|},\quad(6)$$

где медленно меняющаяся амплитуда $X_{\mu,\mu'}(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1,\omega)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d}{dz_2}X_{\mu,\mu'}(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1,\omega)=$$
$$=-\frac{1}{2}\sum_{\mu''}\chi_{\mu,\mu''}(\mathbf{r}_2,\omega)X_{\mu'',\mu'}(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1,\omega)\quad(7)$$

и поляризационные индексы μ,μ' в системе координат с осью z в направлении вектора $\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1$, могут принимать значения (x,y).

Функция $\chi_{\mu,\mu'}(\mathbf{r},\omega)$, связанная с диэлектрической проницаемостью атомного ансамбля, имеет следующий вид:

$$\chi_{\mu,\mu'}(\mathbf{r},\omega)=i\frac{4\pi\omega}{\hbar c}\sum_{M_e}(\mathbf{d}_{J_gM_g,J_eM_e})_{\mu}\times$$
$$\times(\mathbf{d}_{J_eM_e,J_gM_g})_{\mu'}\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\rho_{J_g,J_g}(\mathbf{r},\mathbf{v})}{(\omega-\omega_0)+i\gamma/2}=\quad(8)$$
$$=i\frac{4\pi\omega}{3\hbar c}\delta_{\mu,\mu'}\left\|d_{J_gJ_e}\right\|^2\frac{n(\mathbf{r})}{(\omega-\omega_0)+i\gamma/2},$$

где $\left\|d_{J_gJ_e}\right\|$ – приведенный дипольный матричный элемент, не зависящий от магнитных квантовых чисел M_e, M_g.

Решая уравнение (7), получаем

$$X_{\mu,\mu'}(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1,\omega)=X(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1,\omega)\cdot\delta_{\mu,\mu'}=$$
$$=\exp\left[-i\frac{2\pi\omega}{3\hbar c}\left\|d_{J_gJ_e}\right\|^2\frac{1}{(\omega-\omega_0)+i\gamma/2}\times\right.\quad(9)$$
$$\left.\times\int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2}n(\mathbf{r})ds\right]\cdot\delta_{\mu,\mu'},$$

где интеграл берется вдоль распространения луча света от $\mathbf{r}_1$ до $\mathbf{r}_2$, и в нашем случае он равен

$$\int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2}n(\mathbf{r})ds=$$
$$=n_0\sqrt{\frac{\pi r_0^2}{2}}\exp\left[-\frac{1}{2r_0^2}(r_1^2-(\mathbf{r}_1\mathbf{n}_{21})^2)\right]\times\quad(10)$$
$$\times\left\{\operatorname{erf}\left(\frac{r+\mathbf{r}_1\mathbf{n}_{21}}{\sqrt{2}r_0}\right)-\operatorname{erf}\left(\frac{\mathbf{r}_1\mathbf{n}_{21}}{\sqrt{2}r_0}\right)\right\},$$

где $\mathbf{n}_{21}=(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)/r$, $r=|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1|$.

В пределе, при формальном устремлении $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ к минус- и плюс- бесконечности, соответственно, в случае рассматриваемого гауссова облака и точного резонанса $\omega=\omega_0$, получаем выражение

$$X(\infty,-\infty,\omega_0)=\exp(-b/2),\quad(11)$$

где $b=\sqrt{2\pi}n_0\sigma_0r_0$ – оптическая плотность; $\sigma_0=6\pi\lambda\!\!\!^{-2}$ – резонансное сечение рассеяния на одном атоме (для случая $J_g=0\to J_e=1$ и $\omega_0=ck_0=c/\lambda\!\!\!^{-}$).

Используя выражение (9), мы можем обобщить формулу (4) на случай плотной среды:

$$\frac{d\sigma^{(1)}}{d\Omega}=\frac{\omega_0^4}{c^4}\int d^3r\cdot n(\mathbf{r})\times$$
$$\times\left|X(\infty,\mathbf{r},\omega)\alpha_{s,p}(\omega)X(\mathbf{r},-\infty,\omega)\right|^2.\quad(12)$$

Здесь функция $X(\mathbf{r},-\infty,\omega)$ описывает распространение фотона от источника, формально удаленного на минус-бесконечность, до атома внутри ансамбля, на котором происходит акт некогерентного рассеяния, и интеграл (10) равен

$$\int_{-\infty}^{\mathbf{r}}n(\mathbf{r})ds=n_0\sqrt{\frac{\pi r_0^2}{2}}\exp\left[-\frac{1}{2r_0^2}(r^2-(\mathbf{re}_z)^2)\right]\times$$
$$\times\left\{1+\operatorname{erf}\left(\frac{\mathbf{re}_z}{\sqrt{2}r_0}\right)\right\},\quad(13)$$

где предполагается, что фотон распространяется вдоль оси z лабораторной системы координат.

Функция $X(\infty,\mathbf{r},\omega)$ описывает распространение рассеянного фотона до детектора в направлении $\mathbf{n}$, и соответствующий интеграл

$$\int_{\mathbf{r}}^{+\infty}n(\mathbf{r})ds=n_0\sqrt{\frac{\pi r_0^2}{2}}\exp\left[-\frac{1}{2r_0^2}(r^2-(\mathbf{rn})^2)\right]\times$$
$$\times\left\{1-\operatorname{erf}\left(\frac{\mathbf{rn}}{\sqrt{2}r_0}\right)\right\}.\quad(14)$$

Для двукратного рассеяния сечение

принимает следующий вид:

$$\frac{d\sigma^{(2)}}{d\Omega} = \left(\frac{\omega_0^4}{c^4}\right)^2 \int d^3r_1 \int d^3r_2 \cdot n(\mathbf{r}_1) \times$$

$$\times n(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|^2} \left| \sum_{\mu} X(\infty, \mathbf{r}_2, \omega)\alpha_{s,\mu}(\omega) \times \right. \quad (15)$$

$$\left. \times X(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega)\alpha_{\mu,p}(\omega)X(\mathbf{r}_1, -\infty, \omega) \right|^2,$$

где суммирование по μ предполагает суммирование по поляризациям промежуточного фотона.

Теперь легко можно записать явное выражение для дифференциального сечения n-кратного рассеяния:

$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} = \left(\frac{\omega_0^4}{c^4}\right)^n \int d^3r_1 \int d^3r_2 \ldots$$

$$\ldots \int d^3r_n \cdot n(\mathbf{r}_1)n(\mathbf{r}_2)\ldots n(\mathbf{r}_n) \frac{1}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1}|^2} \ldots$$

$$\ldots \frac{1}{|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2|^2} \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|^2} \cdot \left| \sum_{\{\mu_i\}} X(\infty, \mathbf{r}_n, \omega)\alpha_{s,\mu_{n-1}}(\omega) \times \right. \quad (16)$$

$$\times X(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_{n-1}, \omega)\alpha_{\mu_{n-1},\mu_{n-2}}(\omega)X(\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}_{n-2}, \omega)\ldots$$

$$\left. \ldots\alpha_{\mu_2,\mu_1}(\omega)X(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega)\alpha_{\mu_1,p}(\omega)X(\mathbf{r}_1, -\infty, \omega) \right|^2.$$

При расчете полного сечения расчет вкладов от различных порядков рассеяния сводился к взятию $3n$-кратных интегралов по координатам n атомов. Вычисления проводились методом Монте-Карло, с использованием гауссовой плотности вероятности (метод существенной выборки). Для лучшей сходимости метода, путем введения относительных векторов

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \ \mathbf{R}_2 = \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{R}_n = \mathbf{r}_n,$$

избавлялись от разностей $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, стоящих в знаменателе сечений (см. выражения (15) и (16)).

Результаты расчетов и их обсуждение

На рис. 2 представлены графики зависимости интенсивности рассеянного света (нормирована на полную интенсивность) от учтенных в расчетах порядков рассеяния. Видно, что интенсивность света, рассеянного вбок, в основном сформирована первым порядком рассеяния, тогда как для рассеяния в направлении, близком к направлению строго назад, основной вклад будут давать порядки рассеяния, начиная со второго. Такую зависимость легко понять, если сравнить угловые распределения парциальных вкладов первых нескольких порядков (рис. 3). Из этого рисунка видно, что для данной поляризационной схемы эксперимента $H \| H$, вероятность рассеяния назад, в случае однократного акта, близка к нулю, тогда как для двукратного рассеяния эта вероятность уже существенна.

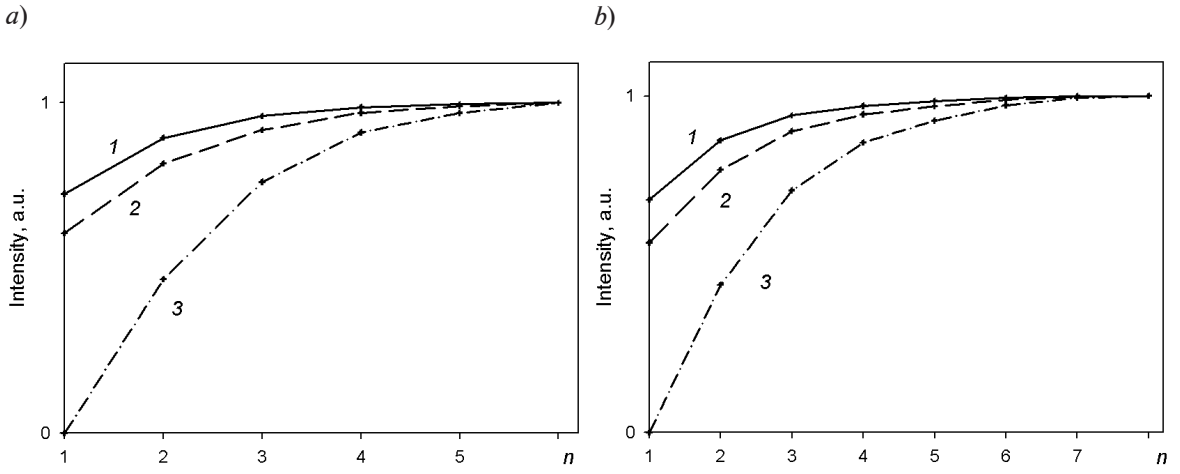


Рис. 2. Зависимости нормированной интенсивности рассеянного света от числа учтенных в расчете порядков некогерентного рассеяния для следующих параметров: $n_0\lambda^3 = 0,0015$; $b = 3$ (*a*), 4 (*b*). Углы рассеяния $\theta = \pi/4$ (*1*), $\pi/2$ (*2*) и $0,9\pi$ (*3*)

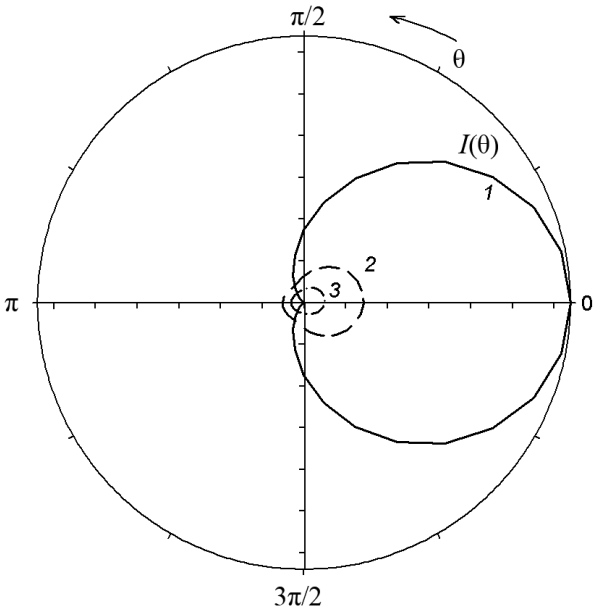


Рис. 3. Зависимости интенсивностей I однократного (1), двукратного (2) и трехкратного (3) рассеяний от угла рассеяния θ; $b = 3$, $n_0\lambda^3 = 0,0015$

Сходимость интенсивности для всех трех углов (см. рис. 2 *a*, *b*) наблюдается при учете числа порядков рассеяния, примерно равного удвоенной оптической плотности $2b$. Так, для рассеяния вбок, для случая $b = 3$, вклад шестого порядка составляет примерно 0,5 % от полной интенсивности, а для рассеяния в направлении, близком к направлению назад, − 2,5 %. Более медленная сходимость для последнего из указанных направлений обусловлена тем, что основную роль в этом случае играют атомы, расположенные на поверхностном слое облака, где уменьшение амплитуды поля при когерентном распространении света между рассеивателями (см. равенство (9)) не такое значительное, как для атомов, лежащих ближе к центру облака.

Увеличение оптической плотности атомного ансамбля усиливает роль многократного рассеяния. Из графиков на рис. 2 видно, что при большей оптической плотности ($b = 4$) для сходимости интенсивности необходимо учитывать больше порядков рассеяния, чем в случае с $b = 3$, но их число по-прежнему приблизительно равно $2b$.

Заключение

С использованием диаграммной техники Константинова − Переля − Келдыша и полученного на ее основе аналитического выражения для сечения многократного рассеяния, в работе проанализировано влияние различных порядков рассеяния на формирование угловой зависимости интенсивности света, рассеянного холодным гауссовым атомным ансамблем. Показано, что для корректного описания угловой зависимости интенсивности рассеянного света (кроме направления, попадающего в узкий конус обратного рассеяния) необходимо учитывать число порядков рассеяния, приблизительно равное удвоенной оптической плотности b.

Автор выражает искреннюю признательность В.В. Дубову, профессору Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, за ценные замечания и многочисленные обсуждения полученных автором результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 17-12-01085.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kupriyanov D.V., Sokolov I.M., Kulatunga P., Sukenik C.I., Havey M.D.** Coherent backscattering of light in atomic systems: Application to weak localization in an ensemble of cold alkali atoms // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 67. No. 1. Pp. 013814 (1−13).

2. **Глаубер Р.** Оптическая когерентность и статистика фотонов // Квантовая оптика и радиофизика. Под ред. О.В. Богданкевича, О.Н. Крохина. М.: Мир, 1966. С. 1−189.

3. **Константинов О.В., Перель В.И.** Графическая техника для вычисления кинетических величин // ЖЭТФ. 1960. Т. 39. С. 197−210.

4. **Batygin V.V., Kupriyanov D.V., Sokolov I.M.** Polarization-sensitive correlation spectroscopy of an atomic medium polarized in angular momentum: I. General formalism // Quant. Semicl. Opt. 1997. Vol. 9. No. 4. Pp. 529−557.

5. **Batygin V.V., Kupriyanov D.V., Sokolov I.M.** Polarization-sensitive correlation spectroscopy of an atomic medium polarized in angular momentum: II. Application to the spin ground state // Quant. Semicl. Opt. 1997. Vol. 9. No. 4. Pp. 559−573.

6. **Куприянов Д.В., Соколов И.М., Субботин С.В.** Влияние поляризации атомов на процесс распространения квазирезонансного излучения в газовой среде // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. № 1. С. 127–140.

7. **Куприянов Д.В., Соколов И.М., Субботин С.В.** О наблюдении в прошедшем свете корреляций между поляризацией угловых моментов и пространственной анизотропией атомных фотофрагментов // Оптика и спектроскопия. 1996. Т. 80. № 5. С. 728–742.

8. **Куприянов Д.В., Ларионов Н.В., Соколов И.М.** Когерентное обратное рассеяние немонохроматического света ансамблем холодных атомов // Оптика и спектроскопия. 2004. Т. 96. № 5. С. 812–819.

9. **Дацюк В.М., Соколов И.М.** Когерентное обратное рассеяние в условиях пленения импульсного излучения // ЖЭТФ. 2006. Т. 129. № 5. С. 830–843.

10. **Kulatunga P., Sukenik C.I., Balik S., Havey M.D., Kupriyanov D.V., Sokolov I.M.** Measurement of correlated multiple light scattering in ultracold atomic ^{85}Rb // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 68. No. 3. P. 033816 (1–10).

11. **Fofanov Ya.A., Kuraptsev A.S., Sokolov I.M., Havey M.D.** Spatial distribution of optically induced atomic excitation in a dense and cold atomic ensemble // Phys. Rev. A. 2013. Vol. 87. No. 6. P. 063839.

12. **Fofanov Ya.A., Kuraptsev A.S., Sokolov I.M., Havey M.D.** Dispersion of the dielectric permittivity of dense and ultracold atomic gases // Phys. Rev. A. 2011. Vol. 84. P. 053811.

Статья поступила в редакцию 20.06.2017, принята к публикации 07.07.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ЛАРИОНОВ Николай Владимирович – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

larionov.nickolay@gmail.com

REFERENCES

[1] **D.V. Kupriyanov, I.M. Sokolov, P. Kulatunga, C.I. Sukenik, M.D. Havey,** Coherent backscattering of light in atomic systems: application to weak localization in an ensemble of cold alkali atoms, Phys. Rev. A. 67 (1) (2003) 013814.

[2] **R. Glauber,** Opticheskaya kogerentnost i statistika fotonov [Optical coherence and photon statistics], In: Kvantovaya optika i radiofizika. Eds. O.V. Bogdankevich, O.N. Krokhin, Moscow, Mir, 1966.

[3] **O.V. Konstantinov, V.I. Perel,** Graficheskaya tekhnika dlya vychisleniya kineticheskikh velichin [Graphical technique for calculation of kinetic quantities], JETP. 39 (1960) 197–210 .

[4] **V.V. Batygin, D.V. Kupriyanov, I.M. Sokolov,** Polarization-sensitive correlation spectroscopy of an atomic medium polarized in angular momentum: I. General formalism, Quant. Semicl. Opt. 9 (4) (1997) 529–557.

[5] **V.V. Batygin, D.V. Kupriyanov, I.M. Sokolov,** Polarization-sensitive correlation spectroscopy of an atomic medium polarized in angular momentum: II. Application to the spin ground state, Quant. Semicl. Opt. 9 (4) (1997) 559–573.

[6] **D.V. Kupriyanov, I.M. Sokolov, S.V. Subbotin,** Effect of the polarization of atoms on the propagation of quasi-resonance emission in a gaseous medium, JETP. 66 (1) (1987) 71–83.

[7] **D.V. Kupriyanov, I.M. Sokolov, S.V. Subbotin,** Observation in transmitted light of correlations between the polarization of angular momenta and the angular anisotropy of atomic photofragments, Optics and Spectroscopy. 80 (5) (1996) 653–666.

[8] **D.V. Kupriyanov, N.V. Larionov, I.M. Sokolov,** Coherent backscattering of nonmonochromatic light by an ensemble of cold atoms, Optics and Spectroscopy. 96 (5) (2004) 742–748.

[9] **V.M. Datsyuk, I.M. Sokolov,** Coherent backscattering under conditions of pulsed radiation trapping, JETP. 102 (5) (2006) 724–736.

[10] **P. Kulatunga, C.I. Sukenik, S. Balik, M.D. Havey, D.V. Kupriyanov, I. M. Sokolov,** Measurement of correlated multiple light scattering in ultracold atomic ^{85}Rb, Phys. Rev. A. 68 (3) (2003) 033816.

[11] **Ya.A. Fofanov, A.S. Kuraptsev, I.M. Sokolov, M.D. Havey,** Spatial distribution of optically induced atomic excitation in a dense and cold atomic ensemble, Phys. Rev. A. 87 (6) (2013) 063839.

[12] **Ya.A. Fofanov, A.S. Kuraptsev, I.M. Sokolov, M.D. Havey,** Dispersion of the dielectric permittivity of dense and ultracold atomic gases, Phys. Rev. A. 84 (2011) 053811

Received 20.06.2017, accepted 07.07.2017.

THE AUTHOR

LARIONOV Nikolay V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
larionov.nickolay@gmail.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

DOI: 10.18721/JPM.10308
УДК 517.958

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ КОЛЕБАНИЙ МЕМБРАНЫ

Д.С. Аниконов[1], Я.А. Киприянов[2], Д.С. Коновалова[1]

[1]Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН,
г. Новосибирск, Российская Федерация;
[2]Новосибирский государственный университет,
г. Новосибирск, Российская Федерация

В настоящей работе используется математическая модель процесса колебаний мембраны; модель основана на решении гиперболического дифференциального уравнения второго порядка. Ставится и исследуется новая обратная задача, содержащая два варианта. В первом известны следующие данные: коэффициент, определяющий фазовую скорость; начальные данные задачи Коши; решение задачи Коши на двух заданных плоскостях; производные от решения вдоль направления вектора нормали к этим плоскостям. В работе поставлена задача – локализовать носитель правой части уравнения колебаний. Построен алгоритм, позволяющий найти ограниченную область, содержащую неизвестный носитель. Во втором варианте алгоритм относится к случаю, когда коэффициент, определяющий фазовую скорость, не известен, но известен интервал его возможных значений. Проведен ряд численных экспериментов для иллюстрации предложенной модели.

Ключевые слова: математическое моделирование; уравнение колебаний мембраны; интегральная геометрия; дифференциальное уравнение

Ссылка при цитировании: Аниконов Д.С., Киприянов Я.А., Коновалова Д.С. Обратная задача для уравнения колебаний мембраны // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 84–94. DOI: 10.18721/JPM.10308

AN INVERSE PROBLEM FOR THE EQUATION OF MEMBRANE'S VIBRATION

D.S. Anikonov[1], Ya.A. Kipriyanov[2], D.S. Konovalova[1]

[1]Sobolev Institute of Mathematics, Novosibirsk, Russian Federation;
[2]Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation

A mathematical model for membrane's vibration process is used in this paper. The model is based on seeking a solution of the second-order hyperbolic differential equation. A new inverse problem is set and investigated in two versions. In the first version the known data are as follows: the coefficient defining a phase velocity, starting data of the Cauchy problem, the Cauchy problem solution on the two given planes, derivatives of the solution along the vector being normal to these planes. The challenge has been in localizing the support of the right-hand side of the equation for vibrations. The algorithm permitting to find the bounded domain containing the unknown support was designed. In the second version the algorithm refers to the

case where the coefficient defining a phase velocity is unknown but an interval of its possible values is known. A series of runs was performed to illustrate the proposed model.

Key words: simulation; equation of membrane's vibration; integral geometry; inverse problem

Citation: D.S. Anikonov, Ya.A. Kipriyanov, D.S. Konovalova, An inverse problem for the equation of membrane's vibration, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 84–94. DOI: 10.18721/JPM.10308

Введение, обозначения и постановка задачи

Настоящая работа относится к математическому моделированию физических процессов, в частности рассматриваются колебания однородной неограниченной мембраны при наличии внешней силы. Соответствующее уравнение колебаний имеет вид

$$u_{tt} - a^2(u_{x_1x_1} + u_{x_2x_2}) = \\ = f(t, x_1, x_2), (x_1, x_2) \in R^2, t > 0, \quad (1)$$

где $u(t, x_1, x_2)$ – смещение точки (x_1, x_2) мембраны в момент времени t относительно плоскости мембраны; $f(t, x_1, x_2)$, $f \in C^1((0, \infty) \times R^2)$ – внешняя сила, приложенная к точке (x_1, x_2) мембраны в момент времени t, a – скорость распространения возмущения, причем $a \in R$, $a > 0$.

Пусть заданы следующие начальные условия:

$$u(0, x_1, x_2) = \varphi(x_1, x_2), \\ u_t(0, x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2), \quad (2)$$

$$\varphi(x_1, x_2) \in C^2(R^2), \psi(x_1, x_2) \in C^1(R^2).$$

Уравнение (1) и условия (2) образуют задачу Коши для уравнения колебаний бесконечной мембраны. Хорошо известно, что существует единственное решение этой задачи в виде формулы Пуассона.

Как указано, например, в работе [1, С. 705 – 712], для гиперболических уравнений и систем справедливо следующее свойство. Если правая часть при каждом фиксированном t финитна по x и также финитны начальные условия, то и решение задачи Коши оказывается финитным по x при каждом фиксированном t. Отметим, что для задачи (1), (2) этот же факт легко следует из формулы Пуассона.

Рассмотрим теперь задачу, обратную задаче (1), (2). Для этого сделаем некоторые дополнительные предположения. Функция f предполагается не зависящей от t, т. е.

$$f(t, x_1, x_2) = f_1(x_1, x_2), \ f_1 \in C^1(R^2),$$

причем f_1 может принимать лишь неотрицательные значения, а множество точек, в которых функция f_1 положительна, является некоторой ограниченной областью G. Функции φ, ψ предполагаются финитными.

Везде в настоящей работе обозначение E относится к некоторому прямоугольнику в плоскости $t = 0$, со сторонами, параллельными координатным осям Ox_1, Ox_2. Работа посвящена исследованию следующих двух задач при выполнении сделанных выше предположений.

Задача 1. *Имея в качестве исходных данных коэффициент a, функции φ, ψ, $u(t, x_1, 0)$, $u_{x_2}(t, x_1, 0)$, $u(t, 0, x_2)$, $u_{x_1}(t, 0, x_2)$, найти такой прямоугольник E, содержащий в себе область G, чтобы каждая его сторона касалась границы области G.*

Смысл этой задачи состоит в локализации носителя правой части уравнения (1), что с физической точки зрения означает приближенное определение места воздействия внешней силы на мембрану.

Рассмотрим также более общий случай, когда про коэффициент a известна только его принадлежность определенному отрезку $[a_1, a_2]$. Начальные данные здесь будем считать нулевыми.

Задача 2. *Имея в качестве исходных данных интервал $[a_1, a_2]$ для коэффициента a, функции $u(t, x_1, 0)$, $u_{x_2}(t, x_1, 0)$, $u(t, 0, x_2)$, $u_{x_1}(t, 0, x_2)$ и полагая $\varphi = 0$, $\psi = 0$, найти прямоугольник E, содержащий в себе область G.*

Отметим, что эта задача аналогична предыдущей, но исследование проводится в условиях большей неопределенности. Подразумевается, что при нахождении ис-

комого прямоугольника E мы должны стремиться к минимизации его размеров.

Теоретическое исследование поставленных проблем

Вначале приведем анализ задачи о локализации источника возмущения мембраны в случае, когда скорость распространения волны (коэффициент a) известна.

Теорема 1. *При выполнении всех вышеуказанных предположений существует единственное решение задачи 1.*

Доказательство. Произведя замену

$$w_1 = u_t + au_{x_1}, \quad w_2 = -au_{x_2},$$

мы из задачи (1), (2) получим видоизмененную задачу:

$$\frac{\partial w_1}{\partial t} - a\left(\frac{\partial w_1}{\partial x_1} - \frac{\partial w_2}{\partial x_2}\right) = f, \tag{3a}$$

$$\frac{\partial w_2}{\partial t} + a\left(\frac{\partial w_2}{\partial x_1} + \frac{\partial w_1}{\partial x_2}\right) = 0, \tag{3b}$$

$$w_1(0, x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2) + a\varphi_{x_1}(x_1, x_2), \tag{4a}$$

$$w_2(0, x_1, x_2) = -a\varphi_{x_2}(x_1, x_2). \tag{4b}$$

Отметим, что при сделанных предположениях функции w_1, w_2 также оказываются финитными по x при каждом фиксированном t.

Для того чтобы уменьшить количество переменных в задаче (3), (4) до двух, употребим метод плоских средних, предложенный Р. Курантом [1, С. 705 – 712]. Для этого воспользуемся следующим свойством: интеграл от производной финитной функции по некоторой переменной вдоль числовой оси, соответствующей этой же переменной, равен нулю. Следуя этому методу, проинтегрируем уравнения системы (3) по переменной x_1 от минус бесконечности до плюс бесконечности и введем следующие обозначения:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w_1(t, x_1, x_2)dx_1 = v_1(t, x_2),$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} w_2(t, x_1, x_2)dx_1 = v_2(t, x_2).$$

Тогда из задачи (3),(4), пользуясь условием, что функции w_1, w_2 являются финитными и, следовательно,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial w_i(t, x_1, x_2)}{\partial x_1}dx_1 = 0, i = 1, 2,$$

получим следующую задачу:

$$\frac{\partial v_1}{\partial t} + a\frac{\partial v_2}{\partial x_2} = g(t, x_2), \tag{5a}$$

$$\frac{\partial v_2}{\partial t} + a\frac{\partial v_1}{\partial x_2} = 0, \tag{5b}$$

$$v_1(0, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x_1, x_2)dx_1, \tag{6a}$$

$$v_2(0, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} -a\varphi_{x_2}(x_1, x_2)dx_1, \tag{6b}$$

где $g(t, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t, x_1, x_2)dx_1$.

Складывая и вычитая уравнения в системе (5) и используя замену

$$z_1 = v_1 + v_2, \; z_2 = v_1 - v_2,$$

получим задачу в таком виде:

$$\frac{\partial z_1}{\partial t} + a\frac{\partial z_1}{\partial x_2} = g(t, x_2), \tag{7a}$$

$$\frac{\partial z_2}{\partial t} - a\frac{\partial z_2}{\partial x_2} = g(t, x_2), \tag{7b}$$

$$z_1(0, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} [\psi(x_1, x_2) - a\varphi_{x_2}(x_1, x_2)]dx_1, \tag{8a}$$

$$z_2(0, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} [\psi(x_1, x_2) + a\varphi_{x_2}(x_1, x_2)]dx_1. \tag{8b}$$

Таким образом, мы свели задачу (1), (2) к задаче для гиперболической системы с двумя независимыми переменными.

Будем рассматривать полученные уравнения вместе с начальными данными по отдельности. Для определенности будем исследовать задачу для уравнения относительно неизвестной переменной z_2. Заметим, что заданных в постановке задачи дополнительных условий $u(t, x_1, 0)$, $u_{x_2}(t, x_1, 0)$ достаточно для того, чтобы вычислить $z_2(t, 0)$. Действительно, значения $z_2(t, 0)$, определяются функциями $v_1(t, 0)$, $v_2(t, 0)$, имеющими вид

$$v_1(t,0) = \int_{-\infty}^{\infty} w_1(t,x_1,0)dx_1,$$

$$v_2(t,0) = \int_{-\infty}^{\infty} w_2(t,x_1,0)dx_1.$$

Напомним, что

$$w_1(t,x_1,x_2) = u_t(t,x_1,x_2) + au_{x_1}(t,x_1,x_2),$$

$$w_2(t,x_1,x_2) = -au_{x_2}(t,x_1,x_2),$$

т. е.

$$v_1(t,0) = \int_{-\infty}^{\infty} (u_t(t,x_1,0) + au_{x_1}(t,x_1,0))dx_1,$$

$$v_2(t,0) = -\int_{-\infty}^{\infty} au_{x_2}(t,x_1,0)dx_1.$$

Таким образом, наличия значений $u(t,x_1,0)$, $u_{x_2}(t,x_1,0)$ достаточно для того, чтобы вычислить $z_2(t,0)$.

В работе [2, С. 95] представлена формула, в которой решение задачи Коши для гиперболической системы с двумя независимыми переменными выражается через данные Коши, и интеграл от правой части вдоль соответствующей характеристики. Применяя эту формулу, мы получим следующее выражение для $z_2(t,0)$:

$$z_2(t,0) = z_2(0,at) + \int_L g dl, \qquad (9)$$

где L – отрезок (элемент соответствующей характеристики), соединяющий в плоскости (t,x_2) точки $(0,at)$ и $(t,0)$; dl – элемент длины вдоль отрезка L.

Рассмотрим правую часть выражения (9). Согласно начальному условию (8b),

$$z_2(0,at) = \int_{-\infty}^{\infty} [\psi(x_1,at) + a\varphi_{x_2}(x_1,at)]dx_1.$$

Рассмотрим теперь интеграл в правой части выражения (9). Выразим dl через $d\tau$, $\tau \in [0,t]$:

$$dl = \sqrt{1+a^2}\,d\tau.$$

Тогда интеграл в правой части выражения (9) можно записать следующим образом:

$$\int_L g(t,x_2)dl = \sqrt{1+a^2}\int_0^t g(\tau, a(t-\tau))d\tau =$$

$$= \sqrt{1+a^2}\int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau,x_1,a(t-\tau))dx_1 d\tau.$$

Сделав еще одну замену переменных, $a(t-\tau) = \xi$, перепишем последний интеграл в равенстве выше:

$$\sqrt{1+a^2}\int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau,x_1,a(t-\tau))dx_1 d\tau =$$

$$= \frac{\sqrt{1+a^2}}{a}\int_0^{at} \int_{-\infty}^{\infty} f\left(t-\frac{\xi}{a},x_1,\xi\right)dx_1 d\xi.$$

Таким образом, мы преобразовали выражение (9) к виду

$$z_2(t,0) = \int_{-\infty}^{\infty} [\psi(x_1,at) + a\varphi_{x_2}(x_1,at)]dx_1 +$$

$$+ \frac{\sqrt{1+a^2}}{a}\int_0^{at} \int_{-\infty}^{\infty} f\left(t-\frac{\xi}{a},x_1,\xi\right)dx_1 d\xi.$$

В последнем равенстве перенесем слагаемое

$$\int_{-\infty}^{\infty} [\psi(x_1,at) + a\varphi_{x_2}(x_1,at)]dx_1$$

в левую часть и воспользуемся предположением о том, что функция f не зависит от t:

$$z_2(t,0) - \int_{-\infty}^{\infty} [\psi(x_1,at) + a\varphi_{x_2}(x_1,at)]dx_1 =$$

$$= \frac{\sqrt{1+a^2}}{a}\int_0^{at} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x_1,\xi)dx_1 d\xi. \qquad (10)$$

Проделывая выкладки, аналогичные приведенным выше для равенств (7), (8) относительно переменной z_1, получим следующее равенство, аналогичное (10):

$$z_1(t,0) - \int_{-\infty}^{\infty} [\psi(x_1,-at) - a\varphi_{x_2}(x_1,-at)]dx_1 =$$

$$= \frac{\sqrt{1+a^2}}{a}\int_{-at}^{0} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x_1,\xi)dx_1 d\xi. \qquad (11)$$

Рассмотрим теперь возможные случаи расположения области G. Для простоты мы предполагаем, что область G не пересекает координатные оси.

Пусть область G расположена в полупло-

скости $x_2 > 0$. Рассмотрим уравнение (10). Ранее нами было отмечено, что функция $z_2(t, 0)$ однозначно определяется данными задачи, поэтому левая часть равенства (10) известна, а правая представляет собой интеграл от функции f_1 по полосе, длина которой (вдоль переменной x_1) бесконечна, а ширина равна *at*. Заметим, что с увеличением *t* будет расти и ширина полосы. Для краткости обозначим правую часть равенства (10) через $I_2(t)$. Поскольку область *G* расположена в полуплоскости $x_2 > 0$, при некотором значении $t = T_1$ верхняя граница полосы коснется границы области *G*. При последующих значениях *t*, вплоть до некоторого значения $t = T_2$, значение функции $I_2(t)$ будет возрастать (здесь мы пользуемся предположением о том, что функция f_1 является неотрицательной). При $t > T_2$ значение функции $I_2(t)$ будет одним и тем же, равным $I_2(T_2)$.

Вернемся к задаче (7), (8). Проведем две характеристические прямые, соответствующие уравнению (7b), через точки $(T_1, 0)$ и $(T_2, 0),$, соответственно. Эти прямые пересекут ось x_2 в двух точках: aT_1 и aT_2. Следовательно, область *G* содержится в полосе

$$\{t = 0,\ x_1 \in R^1,\ x_2 \in [aT_1, aT_2]\}.$$

Пусть теперь область *G* расположена в полуплоскости $x_2 < 0$. Рассмотрим равенство (11). Обозначим его правую часть через $I_1(t)$. Заметим, что $I_1(t)$, как и $I_2(t)$, является интегралом от функции f_1 по полосе бесконечной длины, ширина которой равна *at*, только в данном случае при увеличении *t* будет меняться нижняя граница полосы, а не верхняя. Определим значения $t = T_1$, $t = T_2$, $T_2 > T_1$, при которых нижняя граница полосы касается границы области *G*. Проведем две характеристические прямые, соответствующие уравнению (7a), через точки $(T_1, 0)$ и $(T_2, 0)$. Эти прямые пересекут ось x_2 в двух точках: $-aT_1$ и $-aT_2$. Следовательно, область *G* содержится в полосе

$$\{t = 0,\ x_1 \in R^1,\ x_2 \in [-aT_1, -aT_2]\}.$$

Итак, нами были найдены точки на оси x_2, соответствующие границам полосы, внутри которой содержится область *G*. Обозначим найденные значения как X_2^1, X_2^2 (пусть для определенности $X_2^1 < X_2^2$).

Вернемся к системе (3) и теперь, вместо интегрирования по переменной x_1, проинтегрируем уравнения системы (3) по переменной x_2 от минус-бесконечности до плюс-бесконечности. Далее, проводя рассуждения, полностью аналогичные приведенным выше, получим равенства, аналогичные равенствам (10), (11), правая часть которых будет представлять собой интеграл по полосе, длина которой (на этот раз вдоль переменной x_2) бесконечна, а ширина равна *at*.

Рассматривая эти уравнения при различных значениях переменной *t*, определим значения $\tilde{T}_1$, $\tilde{T}_2$, при которых полосы будут касаться области *G*. Проведя через точки $(0, \tilde{T}_1)$, $(0, \tilde{T}_2)$ соответствующие характеристические прямые, получим в плоскости (t, x_1) некоторые значения X_1^1, X_1^2 (пусть $X_1^1 < X_1^2$), при которых эти прямые пересекают ось $x_1 = 0$.

Теперь в качестве искомой локализации *E* для области *G* можно взять прямоугольник

$$\{(x_1, x_2) \in [X_1^1, X_1^2] \times [X_2^1, X_2^2]\}.$$

Из построения ясно, что этот прямоугольник единственный. Тем самым задача локализации решена для случая, когда известен коэффициент *a*.

Таким образом, теорема 1 доказана.

Далее проведем теоретическое исследование задачи 2.

Теорема 2. *Пусть* $a \in [a_1, a_2]$, *где* a_1, a_2 – *известные положительные вещественные числа,* $\varphi = 0$, $\psi = 0$. *Тогда в предположениях, принятых для теоремы 1, существует алгоритм, который позволяет определить область E для задачи 2.*

Доказательство. Проведем доказательство теоремы для случая, когда область *G* расположена в квадранте

$$\{(x_1, x_2) : x_1 > 0, x_2 > 0\}.$$

Остальные случаи расположения области *G* рассматриваются аналогично. Как и при доказательстве теоремы 1, обратимся к равенству (10). Поскольку по условию теоремы $\varphi = 0$, $\psi = 0$, левая часть в этом

равенстве нам по-прежнему известна. Следовательно, рассуждая точно так же, как и при доказательстве теоремы 1, можно определить значения T_1, T_2, при которых соответствующие полосы интегрирования будут касаться области G. Ясно, что при наших предположениях

$$T_1 a_1 \le T_1 a \le T_2 a \le T_2 a_2,$$

т. е. полоса

$$\{t = 0,\ x_1 \in R^1,\ x_2 \in [aT_1, aT_2]\},$$

содержащая область G, содержится в полосе

$$\{t = 0,\ x_1 \in R^1,\ x_2 \in [a_1 T_1, a_2 T_2]\}.$$

Продолжим действовать аналогично доказательству теоремы 1, а именно – вернемся к системе (3), проинтегрируем ее уравнения от $-\infty$ до $+\infty$ по переменной x_2; тогда получим выражение, аналогичное равенству (10), и определим из него значения $t = \tilde{T}_1, \tilde{T}_2$, при которых прямые $x_1 = a\tilde{T}_1$, $x_2 = a\tilde{T}_2$ будут касаться области G. Соответствующая полоса

$$\{t = 0,\ x_1 \in [a\tilde{T}_1, a\tilde{T}_2],\ x_1 \in R^1\},$$

содержащая G, находится в множестве

$$\{t = 0, x_1 \in [a_1\tilde{T}_1, a_2\tilde{T}_2],\ x_2 \in R^1\},$$

а пересечение полос

$$\{t = 0, x_1 \in [a_1\tilde{T}_1, a_2\tilde{T}_2],\ x_2 \in R^1\}$$

и

$$\{t = 0,\ x_1 \in R^1,\ x_2 \in [a_1 T_1, a_2 T_2]\}$$

является искомым прямоугольником.

Как видно, размеры оболочки E зависят от интервала $[a_1, a_2]$. В частности, если интервалы $[a_1, a_2]$ стягиваются в точку, т. е. $a_2 - a_1 \to 0$, то соответствующие прямоугольники стремятся к прямоугольнику E, являющемуся решением задачи 1, размеры которого минимальны.

Теорема 2 доказана.

Отметим, что доказательства теорем 1 и 2, ввиду их конструктивности, могут рассматриваться как численные алгоритмы, что также подтверждается приведенными ниже численными экспериментами.

Замечание 1. С физической точки зрения функция $f_1(x), x = (x_1, x_2)$ означает применение силы на участке ее носителя. Возможно, более естественным было бы считать функцию $f_1(x)$ разрывной. Однако и наш подход, где $f_1(x)$ – гладкая функция, тоже оправдан с физической точки зрения. Действительно, разрывную функцию можно приближенно заменить гладкой функцией, изменяя ее только в ε-окрестности линии ее разрыва. При этом, конечно, производные этой функции могут принимать лишь очень большие значения в упомянутой ε-окрестности. Но в нашем алгоритме производные от $f_1(x)$ не используются и поэтому не влияют на получение искомых оболочек. Вышеизложенное хорошо проиллюстрировано на приведенных в статье численных экспериментах.

Замечание 2. Рассмотренная задача соответствует неограниченной мембране, что несколько снижает ее физическое содержание. Однако, если учесть упомянутую финитность функции $u(t, x)$, то, задавая $u(t, x) = 0$ для значений x, достаточно больших по модулю, мы получаем задачу для мембраны больших размеров с закрепленными краями. Решение указанной задачи совпадает с решением задачи для неограниченной мембраны при $t \in (0, T^*]$. Еще отметим, что для простоты формулировки в задачах 1, 2 предполагаются известными определенные функции, однако фактически используются только интегралы от них, т. е. объем необходимой информации несколько меньше, чем утверждают теоремы 1 и 2.

Что касается истории вопроса об исследовании обратных задач для гиперболических уравнений, то она весьма обширна и не может быть представлена сколько-нибудь полно в этой небольшой работе. Укажем только некоторые публикации этого направления [3 – 12]. Также отметим, что существенный вклад в эту теорию принадлежит сибирской школе условно-корректных задач под руководством М.М. Лаврентьева. Часть соответствующих результатов можно найти в монографии [13], где имеется обширная библиография. В вышеуказанных работах преобладали постановки обратных задач о нахождении коэффициентов или правых частей дифференциальных уравнений.

Специфика нашей работы состоит в новом подходе, когда определяется только часть неизвестной информации, но и это позволяет получать новые результаты и способствует улучшению качества ограничений на известные данные. Из последних работ отметим статьи [14 – 16], в которых используются некоторые математические приемы, частично аналогичные нашим.

Численные эксперименты

Как видно из доказательств теорем 1 и 2, исходная задача сводится к следующей проблеме.

Задача интегральной геометрии. *Требуется указать прямоугольник E, соответствующий решениям задач 1, 2, если известны интегралы от $f_1(x)$ по полоскам*

$$\{(x_1, x_2) \in [0, at] \times [-\infty, \infty]\},$$

$$\{(x_1, x_2) \in [-at, 0] \times [-\infty, \infty]\},$$

$$\{(x_1, x_2) \in [-\infty, \infty] \times [0, at]\},$$

$$\{(x_1, x_2) \in [-\infty, \infty] \times [-at, 0]\},\ t \in [0, \infty).$$

Отметим, что процедура сведения исходной задачи к указанной проблеме интегральной геометрии осуществлялась с помощью однократного дифференцирования, интегрирования и построения определенных линейных комбинаций. Эти действия с точки зрения численных расчетов легко реализуемы. Поэтому в численных экспериментах мы решили ограничиться тестированием задачи интегральной геометрии; эту задачу можно отнести к новой составляющей выполненного исследования.

Напомним, что если коэффициент a известен, то прямоугольник E, построенный при доказательстве теоремы 1, имеет стороны, которые параллельны осям координат и касаются области G (носителя функции $f_1(x)$).

Процедура численного эксперимента. Данный эксперимент проводился следующим образом. Сначала на равномерной сетке (двумерной) с заданным шагом h вычислялись значения функции $f(x)$. Затем на одномерной сетке с тем же шагом численно находились значения функций

$$g(x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x_1, x_2)dx_1,$$

$$\tilde{g}(x_1) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x_1, x_2)dx_2.$$

Далее осуществлялось численное интегрирование функций $g(x_2)$ и $\tilde{g}(x_1)$ по соответствующим независимым переменным от нуля до некоторого граничного значения в положительном и отрицательном направлениях.

Стороны прямоугольника E находились следующим образом. Сначала фиксировалось некоторое положительное число $\delta > 0$. Если для некоторого значения X_2^1 на оси x_2 впервые выполнялось условие

$$\left| \int_0^{X_2^1+h} g(x_2)dx_2 - \int_0^{X_2^1} g(x_2)dx_2 \right| > \delta$$

(данное условие означает, что полоса, по которой производится интегрирование функции $f_1(x)$, коснулась границы области G), то мы считали, что одна сторона прямоугольника E найдена и ее x_2-координата равна X_2^1.

Далее, после нахождения X_2^1, если для некоторого значения X_2^2 на оси x_2 впервые выполнилось условие

$$\left| \int_0^{X_2^2+h} g(x_2)dx_2 - \int_0^{X_2^2} g(x_2)dx_2 \right| < \delta$$

(данное условие означает, что переменная граница полосы снова коснулась границы области G и эта область теперь целиком содержится в указанной полосе), то мы считали, что другая сторона прямоугольника E найдена и ее x_2-координата равна X_2^1.

Аналогичным образом находились стороны прямоугольника E, параллельные оси x_1. Число δ определялось путем численных экспериментов. Физически это число можно интерпретировать как предельную погрешность измерительной аппаратуры.

В приведенных примерах функция $f_1(x)$ строилась путем свертки некоторой разрывной функции с бесконечно гладкой финитной функцией («шапочкой») $\omega_\varepsilon(x)$, $\varepsilon > 0$,

определенной, например, в работе [17, С. 86].

Конкретизация процедуры. Зафиксируем $\varepsilon > 0$ и определим функцию $\omega_\varepsilon(x)$ равенствами

$$\omega_\varepsilon(x) = c_\varepsilon \exp(-\varepsilon^2 / (\varepsilon^2 - |x|^2)),$$

$$|x| < \varepsilon;\ \omega_\varepsilon(x) = 0,\ |x| \geq \varepsilon,$$

где число c_ε выбрано так, чтобы интеграл от $\omega_\varepsilon(x)$ по кругу $|x| < \varepsilon$ был равен единице.

Все тесты проводились в квадрате

$$[-10, 10] \times [-10, 10].$$

Во всех тестах использовались следующие значения параметров: $h = 0{,}01$, $\varepsilon = 0{,}04$, $\delta = 0{,}001$. В первых трех тестах предполагалось что $a = 1$, а носитель функции $f_1(x)$ выбирался таким образом, чтобы искомая область E в идеале представляла собой квадрат с вершинами

(2,96, 4,96), (2,96, 7,04),

(5,04, 7,04), (5,04, 4,96).

В тесте 4 мы предположили, что сам параметр a неизвестен, но известно, что его значение принадлежит интервалу [0,9; 1,1].

Носитель функции $f_1(x)$ был выбран таким образом, чтобы область E представляла собой прямоугольник с вершинами

(2,42, 4,06), (2,42, 8,60),

(6,16, 8,60), (6,16, 4,06).

В действительности, при работе алгоритма полученный прямоугольник E несколько отличается от точного варианта вследствие погрешностей.

Тест 1. Здесь при тестировании мы положили $f_1(x) = \tilde{f}_1(x) * \omega_\varepsilon(x)$, где

$$\tilde{f}_1(x_1, x_2) = \begin{cases} 1, & (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 6)^2 \leq 1; \\ 0, & (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 6)^2 > 1. \end{cases}$$

Результаты численного эксперимента представлены на рис. 1, *a*. Найденный прямоугольник E имеет следующие вершины:

$A_1 = (3{,}00,\ 5{,}00),\ B_1 = (3{,}00,\ 7{,}01),$

$C_1 = (5{,}01,\ 7{,}01),\ D_1 = (5{,}01,\ 5{,}00).$

Тест 2. При данном тестировании мы считаем, что

$$f_1(x) = (f_2(x_1) * \omega_\varepsilon(x_1))(\tilde{f}_2(x_2) * \omega_\varepsilon(x_2)),$$

где

$$f_2(x_1) = \begin{cases} 1, & x_1 \in [3, 5]; \\ 0, & x_1 \notin [3, 5], \end{cases}$$

$$\tilde{f}_2(x_2) = \begin{cases} 1, & x_2 \in [5, 7]; \\ 0, & x_2 \notin [5, 7]. \end{cases}$$

Результаты численного эксперимента представлены на рис. 1, *b*.

Найденный прямоугольник E имеет следующие вершины:

$A_2 = (2{,}98,\ 4{,}98),\ B_2 = (2{,}98,\ 7{,}03),$

$C_2 = (5{,}03,\ 7{,}03),\ D_2 = (5{,}03,\ 4{,}98).$

Тест 3. В данном тестировании мы положили $f_1(x) = f_3(x) * \omega_\varepsilon(x)$, где

$$f_3(x_1, x_2) = \begin{cases} 1, & 0{,}25 \leq (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 6)^2 \leq 1; \\ 0, & \text{иначе}. \end{cases}$$

Результаты численного эксперимента представлены на рис. 1, *c*. Найденный прямоугольник E имеет следующие вершины:

$A_3 = (3{,}00,\ 5{,}00),\ B_3 = (3{,}00,\ 7{,}01),$

$C_3 = (5{,}01,\ 7{,}01),\ D_3 = (5{,}01,\ 5{,}00).$

Можно заметить, что в тестах 1 и 3 был восстановлен один и тот же прямоугольник E.

Тест 4. В данном тестировании мы взяли $f_1(x)$ из теста 1. Результаты представлены на рис. 1, *d*. Найденный прямоугольник E имеет следующие вершины:

$A_4 = (2{,}45,\ 4{,}09),\ B_4 = (2{,}45,\ 8{,}56),$

$C_4 = (6{,}12,\ 8{,}56),\ D_4 = (6{,}12,\ 4{,}09).$

Замечание 3. Отметим, что при проведении численного эксперимента в работе мы не встретились с какими-либо затруднениями. Однако, поскольку рассмотренные обратные задачи имеют физический смысл, для полного анализа алгоритмов следует проверить их устойчивость и, возможно, предложить вариант их регуляризации. Кроме того, при проведении численных экспериментов целесообразно использовать исходные данные с погрешностью (шумом). Указанные аспекты могут быть предметом последующего самостоятельного исследования.

Замечание 4. Важно подчеркнуть, что в этой работе главным для нас является

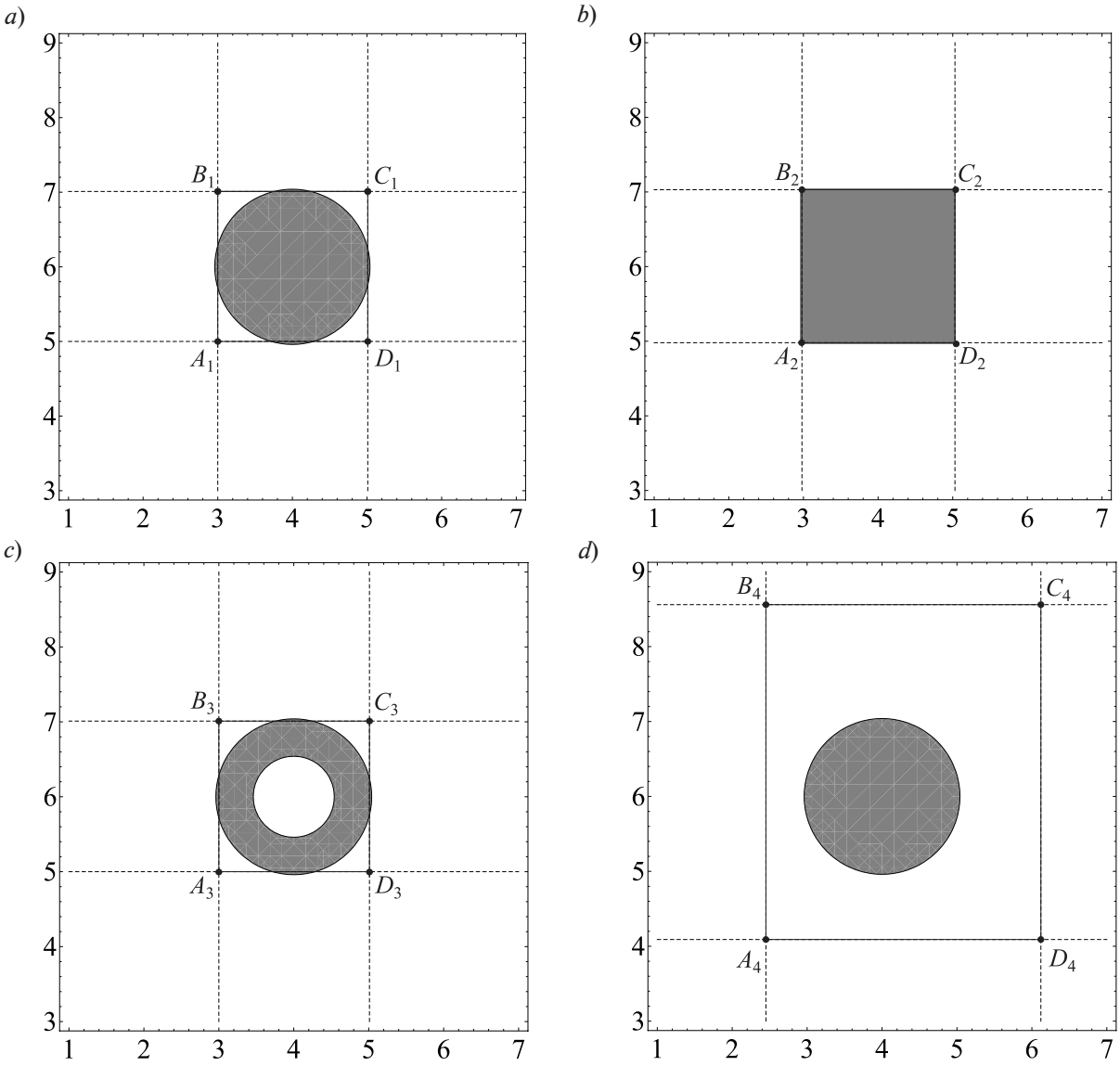


Рис. 1. Результаты численного эксперимента по нахождению прямоугольника E с помощью тестов 1 (*a*), 2 (*b*), 3 (*c*), 4 (*d*)

не полученный результат, а демонстрация нового метода, который, по нашему мнению, имеет определенные перспективы для исследования более общих обратных задач. В частности, представленный здесь метод можно применить к исследованию задач с разрывной правой частью. В соответствующих обратных задачах нужно будет локализовать линию разрыва. Если при этом начальные данные (функции φ и ψ) будут гладкими, то их конкретных значений в таких задачах, по-видимому, не потребуется.

Заключение

В работе рассмотрены задачи приближенного нахождения места приложения внешней силы, вызывающей колебания мембраны. Рассмотрены два варианта постановки задач, для каждого из которых доказана теорема единственности и построен соответствующий алгоритм. Теоретические выводы оказались хорошо согласованными с результатами проведенных численных экспериментов. Полученные результаты дают нам основание рекомендовать построенные алгоритмы для практического применения.

Работа выполнена при поддержке программы Президиума РАН, номер проекта 0314-2015-001013-01-275, а также при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, номер проекта 16-31-00112мол_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Курант Р.** Уравнения с частными производными. М.: Мир, 1964. 830 с.

2. **Петровский И.Г.** Лекции об уравнениях с частными производными. 3-е изд. М.: Наука, 1961. 401 с.

3. **Denisov A.M.** Determination of a nonlinear coefficient in a hyperbolic equation for the Coursat problem // J. of Inverse and Ill-Posed Problems. 1998. Vol. 6. No. 4. Pp. 327–334.

4. **Scheglov A.Yu.** The inverse problem of determination of a nonlinear course in a hyperbolic equation // J. of Inverse and Ill-Posed Problems. 1998. Vol. 6. No. 6. Pp. 625–644.

5. **Яковлева Ю.О.** Характеристическая задача для системы гиперболических дифференциальных уравнений третьего порядка общего вида с некратными характеристиками // Вестник Самарского гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. 2013. № 1(30). С. 99–106.

6. **Орловский Д.Г.** Об одной обратной задаче для дифференциального уравнения второго порядка в банаховом пространстве // Дифференциальные уравнения. 1989. Т. 25. № 6. С. 1000–1009.

7. **Щеглов А.Ю.** Приближенное решение обратной коэффициентной задачи для квазилинейного уравнения гиперболического типа // Вестник МГУ. Сер. 15. Вычисл. математика и физика. 2004. № 2. С. 13–19.

8. **Friedman A., Reitich F.** Hyperbolic inverse problem arising in the evolution of combustion aerosol // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1990. Vol. 110. No. 4. Pp. 313–350.

9. **Prilepko A.I., Orlovsky D.G., Vasin I.A.** Methods for solving inverse problems in mathematical physics. New York: Marcel Dekker, XII, 2000. 709 p.

10. **Puel J.P., Yamamoto M.** Generic well-posedness in a multidimensional hyperbolic inverse problem // J. of Inverse and Ill-Posed Problems. 1997. Vol. 5. No. 1. Pp. 55–83.

11. **Yamamoto M.** Lipschitz stability for a hyperbolic inverse problem by finite local boundary data// Appl. Anal. 2006. Vol. 85. No. 10. Pp. 1219–1243.

12. **Weston V.H., Krueger R.J.** On the inverse problem for a hyperbolic dispercive partial differential equation // J. Math. Phys. 1972. Vol. 13. Pp. 1952–1956.

13. **Лаврентьев М.М., Савельев Л.Я.** Теория операторов и условно-корректные задачи. Новосибирск: Изд-во Института математики СО РАН, 1999. 912 с.

14. **Derevtsov E.Yu., Maltseva S.V., Svetov I.E.** Mathematical models and algorithms for reconstruction of singular support of functions and vector fields by tomographic data // Eurasian J. Math. Comp. Applications. 2015. Vol. 3. No. 4. Pp. 4–44.

15. **Коновалова Д.С.** Локализация линии разрывов правой части дифференциального уравнения // Сиб. журн. индустр. матем. 2016. Т. 19. № 1. С. 62–72.

16. **Kazantsev S.G.** Singular value decomposition for the cone-beam transform in the ball // J. of Inverse and Ill-Posed Problems. 2015. Vol. 23. No. 2. Pp. 173–185.

17. **Владимиров В.С.** Уравнения математической физики. 4-е изд. М.: Наука, 1981. 512 с.

Статья поступила в редакцию 29.05.2017, принята к публикации 03.07.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АНИКОНОВ Дмитрий Сергеевич – *доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией условно-корректных задач Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, г. Новосибирск, Российская Федерация.*

630090, Российская Федерация, г. Новосибирск, пр. Академика Коптюга, 4
anik@math.nsc.ru

КИПРИЯНОВ Ярослав Андреевич – *аспирант кафедры дифференциальных уравнений Новосибирского государственного университета, г. Новосибирск, Российская Федерация.*

630090, Российская Федерация, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2а.
yaroslav.kipriyanov@gmail.com

КОНОВАЛОВА Дина Сергеевна – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории условно-корректных задач Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, г. Новосибирск, Российская Федерация.*

630090, Российская Федерация, г. Новосибирск, пр. Академика Коптюга, 4
dsk@math.nsc.ru

REFERENCES

[1] **R. Kurant**, Uravneniya s chastnymi proizvodnymi [Partial differential equations], Moscow, Mir, 1964.

[2] **I.G. Petrovskiy,** Lektsii ob uravneniyakh s chastnymi proizvodnymi [Lectures on partial differential equations], 3d ed., Moscow, Nauka, 1961.

[3] **A.M. Denisov**. Determination of a nonlinear coefficient in a hyperbolic equation for the Coursat problem, J. of Inverse and Ill-Posed Problems. 6 (4) (1998) 327–334.

[4] **A.Yu. Scheglov,** The inverse problem of determination of a nonlinear course in a hyperbolic equation, J. of Inverse and Ill-Posed Problems. 6 (6) (1998) 625–644.

[5] **Yu.O. Yakovleva,** Kharakteristicheskaya zadacha dlya sistemy giperbolicheskikh differentsialnykh uravneniy tretyego poryadka obshchego vida s nekratnymi kharakteristikami [A characteristic problem for a system of the third-order hyperbolic differential equations of a common mode with aliquant characteristics], Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta, Ser. fiz.-mat. nauki. No. 1(30) (2013) 99–106.

[6] **D.G. Orlovskiy,** Ob odnoy obratnoy zadache dlya differentsialnogo uravneniya vtorogo poryadka v banakhovom prostranstve [On an inverse problem for the second-order differential equation in the Banach space], Differentsialnyye uravneniya. 25 (6) (1989) 1000–1009.

[7] **A.Yu. Shcheglov,** Priblizhennoye resheniye obratnoy koeffitsiyentnoy zadachi dlya kvazilineynogo uravneniya giperbolicheskogo tipa [An approximate solution of the inverse coefficient problem for a quasilinear hyperbolic equation], Vestnik MGU. Ser. 15, Vychislitelnaya Matematika i Fizika. (2) (2004) 13–19.

[8] **A. Friedman, F. Reitich,** Hyperbolic inverse problem arising in the evolution of combustion aerosol, Archive for Rational Mechanics and Analysis. 110 (4) (1990) 313–350.

[9] **A.I. Prilepko, D.G. Orlovsky, I.A. Vasin,** Methods for solving inverse problems in mathematical physics, NY, Marcel Dekker. xii, 2000.

[10] **J.P. Puel, M. Yamamoto,** Generic well-posedness in a multidimensional hyperbolic inverse problem, J. of Inverse and Ill-Posed Problems. 5(1) (1997) 55–83.

[11] **M. Yamamoto**, Lipschitz stability for a hyperbolic inverse problem by finite local boundary data, Appl. Anal. 85 (10) (2006) 1219–1243.

[12] **V.H. Weston, R.J. Krueger,** On the inverse problem for a hyperbolic dispercive partial differential equation, J. Math. Phys. 13 (1972) 1952–1956.

[13] **M.M. Lavrentyev, L.Ya. Savelyev,** Teoriya operatorov i uslovno-korrektnyye zadachi [The theory of operators and conventionally well-set problems], Novosibirsk, Izdatelstvo Instituta matematiki SO RAN, 1999.

[14] **E.Yu. Derevtsov, S.V. Maltseva, I.E. Svetov,** Mathematical models and algorithms for reconstruction of singular support of functions and vector fields by tomographic data , Eurasian J. Math. Comp. Applications. 3 (4) (2015) 4–44.

[15] **D.S. Konovalova,** Lokalizatsiya linii razryvov pravoy chasti differentsialnogo uravneniya [Localization of a line of discontinuities in the right side of a differential equation], Sib. Zhurn. Industr. Matem. 19 (1) (2016) 62–72.

[16] **S.G. Kazantsev,** Singular value decomposition for the cone-beam transform in the ball, J. of Inverse and Ill-Posed Problems. 23 (2) (2015) 173–185.

[17] **V.S. Vladimirov,** Uravneniya matematicheskoy fiziki [Equations of mathematical physics], 4-th ed., Moscow, Nauka, 1981.

Received 29.05.2017, accepted 03.07.2017.

THE AUTHORS

ANIKONOV Dmitriy S.
Sobolev Institute of Mathematics
4 Acad. Koptyug Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation
anik@math.nsc.ru

KIPRIYANOV Yaroslav A.
Novosibirsk State University
2a, Pirogov St., Novosibirsk, 630090. Russian Federation
yaroslav.kipriyanov@gmail.com

KONOVALOVA Dina S.
Sobolev Institute of Mathematics
4 Acad. Koptyug Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation
dsk@math.nsc.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

DOI: 10.18721/JPM.10309
УДК 519.246.2

ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫЕ РОБАСТНЫЕ *M*-ОЦЕНКИ ПАРАМЕТРА МАСШТАБА НА БАЗЕ *Q*-ОЦЕНКИ

П.О. Смирнов, И.С. Широков, Г.Л. Шевляков

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

Широко используемая высокоэффективная робастная *Q*-оценка параметра масштаба, предложенная в работе Руссива и Крукса (1993), аппроксимирована с помощью «быстрых» хьюберовских *M*-оценок. Показано, что предложенные нами *M*-оценки являются высокоэффективными и робастными на произвольном распределении, благодаря правильному выбору параметров аппроксимации. Особое внимание уделено случаям гауссовского распределения и распределения Коши.

Ключевые слова: *M*-оценка; *Q*-оценка; робастность; параметр масштаба; гауссовское распределение; распределение Коши

Ссылка при цитировании: Смирнов П.О., Широков И.С., Шевляков Г.Л. Высокоэффективные робастные *M*-оценки параметра масштаба на базе *Q*-оценки // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 95–99. DOI: 10.18721/JPM.10309

HIGHLY-EFFICIENT AND ROBUST *M*-ESTIMATES OF THE SCALE PARAMETER ON THE *Q*-ESTIMATE BASIS

P.O. Smirnov, I.S. Shirokov, G.L. Shevlyakov

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

The highly efficient and robust *Q*-estimate of the scale parameter proposed by Rousseeuw and Croux (1993) and commonly employed has been approximated using computationally fast Huber *M*-estimates. The suggested *M*-estimates were shown to be robust and highly efficient for an arbitary underlying data distribution due to right choosing the approximation parameters. The following indicators of the efficiency and robustness of *M*-estimates of scale were computed: their asymptotic variances, influence functions and breakdown points. A special attention was given to the particular cases of the Gaussian and Cauchy distributions. It is noteworthy that for the Cauchy distribution, the suggested robust estimate of scale coincides with the maximal likelihood estimate. Finally, the computation time of these highly-efficient and robust estimates of scale is 3-4 times less than for the corresponding *Q*-estimates.

Key words: *M*-estimate; *Q*-estimate, robustness; scale parameter; Gaussian distribution; Cauchy distribution

Citation: P.O. Smirnov, I.S. Shirokov, G.L. Shevlyakov, Highly-efficient and robust M-estimates of the scale parameter on the Q-estimate basis, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 95–99. DOI: 10.18721/JPM.10309

Введение

Проблема оценивания параметра масштаба является одной из наиболее важных в статистическом анализе [1, 2, 6, 8, 10]. В настоящее время наилучшей считается робастная высокоэффективная Q_n-оценка параметра масштаба (n – размер выборки) [7]. Эта оценка определяется как первый квартиль расстояния между наблюдениями:

$$Q_n = c\{| x_i - x_j |\}_{(k)},$$

где c – константа, обеспечивающая состоятельность оценки; $k = C_h^2$ $(h = [n/2] + 1)$.

Q_n-оценка является робастной, с максимально возможной пороговой точкой $\varepsilon^* = 0,5$ и высокой для нормального распределения асимптотической эффективностью (82 %). К ее недостаткам следует отнести высокую асимптотическую сложность алгоритма вычисления, требующую $O(n\ln(n))$ времени и столько же памяти.

Напротив, для робастных M-оценок параметра масштаба характерна низкая вычислительная сложность. Кроме того, имеются возможности для повышения их эффективности.

Исходя из этого, целями данной работы являлись построение робастной высокоэффективной аппроксимации Q_n-оценки с низкой вычислительной сложностью и адаптация полученной аппроксимации к различным типам распределений.

Постановка задачи

Рассмотрим класс M-оценок $\widehat{S}$ параметра масштаба, заданных решением уравнения [5]:

$$\sum \chi(x_i / \widehat{S}) = 0, \qquad (1)$$

где $\chi(x)$ – оценочная функция, которая обычно является четной и неубывающей для $x > 0$.

Аппроксимация Q_n-оценки

Общий случай. Важным инструментом статистического анализа оценок служит функция влияния $IF(x; S, F)$, которая определяет меру изменения значения функционала оценки $S = S(F)$ на распределении F от «засорения» в точке x [4]. При известной функции влияния асимптотическая дисперсия оценки $\widehat{S}$ имеет вид

$$AV(\widehat{S}, F) = \int IF(x; S, F)^2 dF(x).$$

Класс M-оценок параметра масштаба (1) имеет важное свойство: функция влияния $IF(x; S, F)$ с точностью до коэффициента равна оценочной функции $\chi(x)$:

$$IF(x; S, F) \propto \chi(x).$$

Таким образом, можно построить M-оценку с любой допустимой функцией влияния и, соответственно, эффективностью.

Известно, что функция влияния Q_n-оценки задается следующим выражением [7]:

$$IF(x; Q, F) = c[(1/4) - F(x + c^{-1}) + F(x - c^{-1})] \left[\int f(y + c^{-1}) f(y)\, dy\right]^{-1}. \qquad (2)$$

Поскольку оценочная функция χ в выражении (1) определяется с точностью до произвольного множителя, нормирующий интеграл в выражении (2) можно опустить. Тогда Q_n-оценке соответствует M-оценка, порожденная оценочной функцией

$$\chi_Q(x) = \frac{c}{4} - c \cdot (F(x + c^{-1}) - F(x - c^{-1})), \qquad (3)$$

и, следовательно, функция влияния $IF(x; \chi_Q, F)$ совпадает с $IF(x; Q, F)$, обеспечивая совпадение и производных от нее характеристик.

Преобразуем выражение (3): произведем замену $\alpha = c^{-1}$, при этом не будем фиксировать α, рассматривая эту величину как параметр настройки оценки; далее разложим функцию распределения F в ряд Тейлора, оставив только первые три члена:

$$F(x \pm \alpha) = F(x) \pm \alpha f(x) + \frac{1}{2}\alpha^2 f'(x) \pm \frac{1}{6}\alpha^3 f''(x) + o(\alpha^3). \qquad (4)$$

Объединяя выражения (3) и (4), получим следующий результат.

Определение. *Пусть плотность вероятности $f(x)$ – аналитическая на* **R** *функция. Однопараметрическое семейство M-оценок с оценочными функциями вида*

$$\chi_\alpha(x) = c_\alpha - 2f(x) - \frac{1}{3}\alpha^2 f''(x) \qquad (5)$$

назовем семейством MQ_n-оценок.

Константа c_α в выражении (5) обеспечивает состоятельность MQ_n-оценок.

Распределение Гаусса. Рассмотрим M-оценку в случае гауссовской плотности распределения:

$$f(x) = \varphi(x) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-x^2 / 2).$$

Тогда

$$\varphi''(x) = (x^2 - 1)\varphi(x),$$

и оценочная функция принимает следую-

щий вид:

$$\chi_\alpha(x) = c_\alpha - \frac{1}{3}(6 + \alpha^2(x^2 - 1))\varphi(x),$$

$$c_\alpha = \frac{12 - \alpha^2}{12\sqrt{\pi}}. \qquad (6)$$

В важном частном случае при $\alpha = 0$ выражение (6) принимает вид:

$$\chi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} - 2\varphi(x). \qquad (7)$$

Этот результат напоминает обобщенную оценку Уэлша [3], задаваемую выражением

$$\chi(x) = \sqrt{\frac{d}{d+2}} - \exp\left(-\frac{x^2}{d}\right), \quad d > 0.$$

При $d = 2$ эта оценка совпадает с M-оценкой параметра масштаба, определенной выражением (7). Максимально возможное значение асимптотической дисперсии для оценки, задаваемой выражением (7), равно 95,9 %.

Отсюда мы имеем следующий результат.

Теорема 1. *MQ_n-оценки на гауссовском распределении при $\alpha \in [0; \sqrt{2}]$ являются B-робастными с ограниченной функцией влияния, задаваемой выражением*

$$IF(x; MQ, \Phi) =$$

$$= \frac{2(12 - \alpha^2) - 8\sqrt{\pi}(6 + \alpha^2(x^2 - 1))\varphi(x)}{3(4 - \alpha^2)}.$$

Доказательство теоремы приведено в работе [9]. Оно основано на интегрировании оценочной функции рассматриваемой MQ_n-оценки.

Асимптотическая эффективность подобных MQ_n-оценок с оценочной функцией вида (7) составляет 81 %, что лишь на 1 % меньше асимптотической эффективности Q_n-оценок на гауссовском распределении. При этом достигается существенный выигрыш в скорости вычислений [9].

Распределение Коши. Теперь рассмотрим MQ_n-оценки для распределения Коши, имеющего «тяжелые хвосты», с оценочной функцией вида (5). В этом случае плотность распределения принимает вид

$$f(x) = \frac{1}{\pi(1 + x^2)}.$$

Чтобы получить небольшую сложность алгоритма, рассмотрим MQ_n-оценку в случае $\alpha = 0$. Остальные значения параметра нас не интересуют, так как дают худшие результаты.

Теорема 2. *MQ_n-оценка на распределении Коши, определенная выражением (5), является оценкой максимального правдоподобия для данного распределения и имеет оценочную функцию вида*

$$\chi_0(x) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{x^2 - 1}{x^2 + 1}.$$

Доказательство теоремы также приведено в работе [9].

Максимально возможное значение асимптотической эффективности такой оценки параметра масштаба равно 100 % на распределении Коши, но для гауссовского распределения оно не превосходит 50 %.

Заключение

Для широкого класса распределений предложены робастные MQ_n-оценки параметра масштаба, имеющие небольшую сложность алгоритма и высокую скорость вычислений. Предложенные оценки близки по своей эффективности к высокоэффективной робастной Q_n-оценке.

Важные случаи распределений Гаусса и Коши теоретически изучены в асимптотике.

Предложенный нами подход планируется применить на параметрических семействах t- и экспоненциально-степенных распределений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Balakrishnan N., Cohen A.C.** Order statistics & inference: estimation methods. USA: Elsevier, 2014. 377 p.

2. **Cramér H.** Mathematical methods of statistics (PMS-9). USA: Princeton University Press, 2016. Vol. 9.

3. **Genton M.G.** Asymptotic variance of *M*-estimators for dependent Gaussian random variables // Statistics and Probability Letters. 1998. Vol. 38. No. 3. Pp. 255–261.

4. **Hampel F.R., Ronchetti E.M., Rousseeuw P.J., Stahel W.A.** Robust statistics: the approach

based on influence functions. USA, New Jersey: John Wiley, 1986.

5. **Huber P.J.** Robust statistics, USA, New Jersey: John Wiley, 1981.

6. **Launer R.L., Wilkinson G.N.** (eds.). Robustness in statistics. USA: Academic Press, 2014. 296 p.

7. **Rousseeuw P.J., Croux C.** Alternatives to the median absolute deviation // Journal of the American Statistical Association. 1993. Vol. 88. No. 424. Pp. 1273– 1283.

8. **Shevlyakov G.L., Oja H.** Robust correlation: Theory and applications, USA, New Jersey: John Wiley & Sons, 2016. Vol. 3.

9. **Smirnov P.O., Shevlyakov G.L.** Fast highly efficient and robust one-step *M*-estimators of scale based on Q_n // Computational Statistics and Data Analysis. 2014. Vol. 78. Pp. 153–158.

10. **Tarr G.** Quantile based estimation of scale and dependence // Bulletin of the Australian Mathematical Society. 2015. Vol. 92. No. 01. Pp. 173–175.

Статья поступила в редакцию 29.06.16, принята к публикации 10.05.17.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СМИРНОВ Павел Олегович – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

s.paul@mail.ru

ШИРОКОВ Иван Сергеевич – *аспирант кафедры прикладной математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

summertouch@mail.ru

ШЕВЛЯКОВ Георгий Леонидович – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры прикладной математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

Georgy.Shevlyakov@phmf.spbstu.ru

REFERENCES

[1] **N. Balakrishnan, A.C. Cohen,** Order statistics & inference: estimation methods, Elsevier (2014).

[2] **H. Cramér,** Mathematical methods of statistics (PMS-9), Princeton University Press. (9) (2016).

[3] **M.G. Genton,** Asymptotic variance of *M*-estimators for dependent Gaussian random variables, Statistics and Probability Letters. 38 (3) (1998) 255– 261.

[4] **F.R. Hampel, E.M. Ronchetti, P.J. Rousseeuw, W.A. Stahel,** Robust statistics: the approach based on influence functions, John Wiley (1986).

[5] **P.J. Huber,** Robust statistics, USA, New Jersey, John Wiley (1981).

[6] **R.L. Launer, G.N. Wilkinson** (eds), Robustness in statistics, Academic Press (2014).

[7] **P.J. Rousseeuw, C. Croux,** Alternatives to the median absolute deviation, Journal of the American Statistical Association. 88 (424) (1993) 1273–1283.

[8] **G.L. Shevlyakov, H. Oja,** Robust correlation: Theory and applications, John Wiley & Sons, (3) (2016).

[9] **P.O. Smirnov, G.L. Shevlyakov,** Fast highly efficient and robust one-step *M*-estimators of scale based on Q_n, Computational Statistics and Data Analysis. 78 (2014) 153–158.

[10] **G. Tarr,** Quantile based estimation of scale and dependence, Bulletin of the Australian Mathematical Society. 92 (01) (2015) 173–175.

Received 29.06.2016, accepted 10.05.2017.

THE AUTHORS

SMIRNOV Pavel O.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

s.paul@mail.ru

SHIROKOV Ivan S.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
summertouch@mail.ru

SHEVLYAKOV Georgiy L.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Georgy.Shevlyakov@phmf.spbstu.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

DOI: 10.18721/JPM.10310
UDC 517.923

OPERATIONAL MATRICES TO SOLVE NONLINEAR RICCATI DIFFERENTIAL EQUATIONS OF AN ARBITRARY ORDER

K. Parand, M. Delkhosh

Shahid Beheshti University, G.C., Tehran, Iran

In this paper, an effective numerical method to achieve the numerical solution of nonlinear Riccati differential equations of an arbitrary (integer and fractional) order has been developed. For this purpose, the fractional order of the Chebyshev functions (FCFs) based on the classical Chebyshev polynomials of the first kind have been introduced, that can be used to obtain the solution of these equations. Also, the operational matrices of fractional derivative and product for the FCFs have been constructed. The obtained results illustrated demonstrate that the suggested approaches are applicable and valid.

Key words: fractional order of the Chebyshev functions; operational matrix; Riccati differential equations; Galerkin method; differential equation of arbitrary order.

Citation: K. Parand, M. Delkhosh, Operational matrices to solve nonlinear Riccati differential equations of an arbitrary order, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 100–115. DOI: 10.18721/JPM.10310

ОПЕРАЦИОННЫЕ МАТРИЦЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ РИККАТИ ПРОИЗВОЛЬНОГО ПОРЯДКА

К. Паранд, М. Делхош

Университет имени Шахида Бехешти, г. Тегеран, Иран

В статье предложен эффективный численный метод численного решения нелинейных дифференциальных уравнений Риккати произвольного порядка (как целого, так и дробного). Для этого вводится дробный порядок функций Чебышёва на основе классических полиномов Чебышёва первого рода. Такая мера позволяет получать решение этих уравнений Риккати. Построены также операционная матрица дробных производных от функций и операционная матрица произведений ортогональных функций Чебышёва дробного порядка. Результаты применения метода на ряде примеров доказывают, что предлагаемый подход справедлив и достоин применения.

Ключевые слова: дробный порядок функций Чёбышева; операционная матрица; дифференциальные уравнения Риккати; метод Галёркина; дифференциальное уравнение произвольного порядка.

Ссылка при цитировании: Паранд К., Делхош М. Операционные матрицы для решения нелинейных дифференциальных уравнений Риккати произвольного порядка // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 100–115. DOI: 10.18721/JPM.10310

1. Introduction

The Chebyshev polynomials have frequently been used in the numerical analysis including polynomial approximation, Gauss-quadrature integration, integral and differential equations and spectral methods. Chebyshev polynomials have many properties, for example, orthogonal, recursive, simple real roots, complete in the space of polynomials. For these reasons, many researchers have employed these polynomials in their studies [1 – 3]. One of the attractive concepts in the initial and boundary value

problems is the differentiation and integration of a fractional order [4, 5]. Many researchers extend classical methods in the studies of differential and integral equations of an integer order to fractional type of these problems [6, 7].

Using some transformations, a number of researchers extended Chebyshev polynomials to a semi-infinite or an infinite domain, for example, by taking

$$x = \frac{t - L}{t + L}, L > 0,$$

the rational Chebyshev functions on the semi-infinite domain [8 − 11], by taking

$$x = \frac{t}{\sqrt{t^2 + L}}, L > 0,$$

the rational Chebyshev functions on the infinite domain [12] being introduced.

In this study, by transformation

$$x = 1 - 2t^{\alpha}, \ \alpha > 0,$$

on the Chebyshev polynomials of the first kind, the fractional order of the Chebyshev orthogonal functions in the interval [0, 1] has been introduced. This can be used to solve differential equations of an arbitrary order.

Fractional calculus has a long mathematical history (since 1695 by Hopital [13]), but, for many reasons, it was not used in sciences for many years, for example, the various definitions of the fractional derivative have existed [14] and they have no exact geometrical interpretation [15]. A review of some definition and applications of fractional derivatives are given in Refs. [16] and [17]. In recent years, many physicists and mathematicians have undertaken studies on this subject, and fractional calculus has been employed in various investigations [18, 19]. During the last decades, several methods have been used to solve fractional ordinary/partial differential equations, and fractional integral/integro-differential equations, such as Adomian's decomposition method [20], a fractional order of Legendre functions [21], a fractional order of the Chebyshev functions of the second kind [22], homotopy analysis method [23], the Bessel functions and spectral methods [24], the Legendre and Bernstein polynomials [25], and other methods [26, 27].

One of the most popular differential equations that has been considered mostly in the literature is the Riccati differential equation. There are several applications of this equation in algebraic geometry, theory of conformal mapping, physics and applied problems (see, for example, Ref. [28]). Some researchers have used different methods to solve this type of equations, for examples, Abbasbandy [29] by using homotopy perturbation method, Ranjbar et al. [30] by using enhanced homotopy perturbation method, Cang et al. [31] by using homotopy analysis method, Balaji [32] by using the Legendre wavelet operational matrix method, Parand et al. [33] by using operational matrices method based on the Bernstein polynomials, Li et al. [34] by using the Haar wavelet operational matrix method, Ghomanjani and Khorram [35] by using the Bezier curves method, and Merdan [36] by using the fractional variational iteration method.

The goal of this paper is to present a numerical method (FCF Galerkin method; FCF is the Chebyshev function of a fractional order) to approximate the solution of the nonlinear Riccati differential equation of an arbitrary (integer and fractional) order as follows:

$$D^{\alpha} y(t) + p_1(t) y^2(t) + p_2(t) y(t) = g(t), \quad (1)$$

with n initial conditions:

$$y^{(i)}(t_0) = y_i, i = 0, 1, \ldots, n - 1, \quad (2)$$

where $\alpha = n$; $p_1(t)$, $p_2(t)$, $g(t) \in L^2([0,1))$ are known functions; $y(t)$ is the unknown function, and D^{α} is the Caputo fractional differentiation operator.

The organization of our paper is as follows: in section 2, some basic definitions and theorems of fractional calculus are presented. In section 3, the FCFs and their properties are obtained. Section 4 is devoted to applying the FCFs operational matrices of fractional derivative and product for obtaining the solution of a fractional differential equation. In section 5, the method of the work is explained. Examples of the applications of the proposed method are given in section 6. Finally, a conclusion is provided.

2. Basic definitions

In this section, some basic definitions and

theorems which are useful for our method have been introduced.

Definition 1. *For any real function* $f(t)$, $t > 0$, *if there exists a real number* $p > \mu$, *such that* $f(t) = t^p f_1(t)$, *where* $f_1(t) \in C(0,\infty)$, *is said to be in space* C_μ, $\mu \in \Re$, *and it is in the space* C_μ^n *if and only if* $f^{(n)} \in C_\mu, n \in N$.

Definition 2. *The fractional derivative of* $f(t)$ *in the Caputo sense by the Riemann – Liouville fractional integral operator of an order* $\alpha > 0$ *is defined as follows [37]:*

$$D^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_0^t (t-s)^{m-\alpha-1} D^m f(s) ds,$$

for $m-1 \langle \alpha \le m, m \in N, t \rangle 0$ *and* $f \in C_{-1}^m$.

Some properties of the operator D^a are as follows. For

$$f \in C_\mu, \ \mu \ge -1, \ \alpha, \beta \ge 0, \ \gamma \ge -1,$$

$N_0 = \{0,1,2,...\}$, $c_i \in R$, and constant C:

$$(i) D^\alpha C = 0,$$

$$(ii) D^\alpha D^\beta f(t) = D^{\alpha+\beta} f(t), \tag{3}$$

$$(iii) D^\alpha t^\gamma = \begin{cases} 0, \ \gamma \in N_0 \text{ and } \gamma < \alpha; \\ \dfrac{\Gamma(\gamma+1)}{\Gamma(\gamma-\alpha+1)} t^{\gamma-\alpha}, \text{ Otherwise.} \end{cases} \tag{4}$$

$$(iv) D^\alpha \left(\sum_{i=1}^n c_i f_i(t) \right) = \sum_{i=1}^n c_i D^\alpha f_i(t). \tag{5}$$

Definition 3. *Suppose that* $f, g \in C(0,1]$ *and* $w(t)$ *is a weight function, then*

$$\|f(t)\|_w^2 = \int_0^1 f^2(t) w(t) dt,$$

$$\langle f(t), g(t) \rangle_w = \int_0^1 f(t) g(t) w(t) dt.$$

Theorem 1. (*Generalized Taylor's formula) Suppose that* $f(t) \in C[0,1]$ *and* $D^{k\alpha} f(t) \in C[0,1]$, *where* $k = 0,1, ..., m$, $0 < \alpha \le 1$. *Then we have*

$$f(t) = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{t^{i\alpha}}{\Gamma(i\alpha+1)} D^{i\alpha} f(0^+) + \frac{t^{m\alpha}}{\Gamma(m\alpha+1)} D^{m\alpha} f(\xi), \tag{6}$$

with $0 < \xi \le t$, $\forall t \in [0,1]$.

And thus

$$\left| f(t) - \sum_{i=0}^{m-1} \frac{t^{i\alpha}}{\Gamma(i\alpha+1)} D^{i\alpha} f(0^+) \right| \le M_\alpha \frac{t^{m\alpha}}{\Gamma(m\alpha+1)}, \tag{7}$$

where $M_\alpha \ge \left| D^{m\alpha} f(\xi) \right|$.

Proof: See Ref. [38].

In the case of $\alpha = 1$, the generalized Taylor's formula (6) is reduced to the classical Taylor's formula.

3. Fractional order of the Chebyshev functions (FCFs)

In this section, first, the fractional order of the Chebyshev functions has been defined, and then some properties and convergence of them for our method have been introduced.

3.1. The FCFs definition. By transformation

$$z = 1 - 2t^\alpha, \ \alpha > 0,$$

on the classical Chebyshev polynomials, the FCFs in the interval [0, 1] are defined, that will be denoted by

$$FT_n^\alpha(t) = T_n(1 - 2t^\alpha).$$

By this definition, the singular Sturm – Liouville differential equation of the classical Chebyshev polynomials becomes:

$$\frac{\sqrt{1-t^\alpha}}{t^{\frac{\alpha}{2}-1}} \frac{d}{dt} \left[\frac{\sqrt{1-t^\alpha}}{t^{\frac{\alpha}{2}-1}} \frac{d}{dt} FT_n^\alpha(t) \right] + n^2 \alpha^2 FT_n^\alpha(t) = 0, \tag{8}$$

where $t \in [0,1]$ and the FCFs are the eigenfunctions of Eq. (8).

The $FT_n^\alpha(t)$ can be obtained using the recursive relation, as follows $(n \ge 1)$:

$$FT_0^\alpha(t) = 1, FT_1^\alpha(t) = 1 - 2t^\alpha,$$

$$FT_{n+1}^\alpha(t) = (2 - 4t^\alpha) FT_n^\alpha(t) - FT_{n-1}^\alpha(t).$$

Fig. 1 shows graphs of FCFs for various values of n and α.

The analytical form of $FT_n^\alpha(t)$ of the degree $n\alpha$ is given by

$$FT_n^{\alpha}(t) = \sum_{k=0}^{n}(-1)^k \frac{n2^{2k}(n+k-1)!}{(n-k)!(2k)!} t^{\alpha k} = \sum_{k=0}^{n}\beta_{n,k}\ t^{\alpha k}, \quad (9)$$

where

$$\beta_{n,k} = (-1)^k \frac{n2^{2k}(n+k-1)!}{(n-k)!(2k)!} \text{ and } \beta_{0,k} = 1.$$

Note that $FT_n^{\alpha}(0) = 1$ and $FT_n^{\alpha}(1) = (-1)^n$. The weight function for the FCFs is

$$w(t) = \frac{t^{\frac{\alpha}{2}-1}}{\sqrt{1-t^{\alpha}}},$$

and the FCFs with this weight function are orthogonal in the interval [0, 1] that are satisfied in a following relation:

$$\int_0^1 FT_n^{\alpha}(t) FT_m^{\alpha}(t) w(t) dt = \frac{\pi}{2\alpha} c_n \delta_{mn}, \quad (10)$$

where δ_{mn} is the Kronecker delta, $c_0 = 2$, and $c_n = 1$ for $n \geq 1$.

Eq. (10) is provable using the property of orthogonality in the Chebyshev polynomials.

3.2. Approximation of functions. Any function $y(t) \in C[0,1]$ can be expanded as follows:

$$y(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n FT_n^{\alpha}(t),$$

where the coefficients a_n are obtained by the inner product:

$$\langle y(t), FT_n^{\alpha}(t)\rangle_w = \langle \sum_{n=0}^{\infty} a_n FT_n^{\alpha}(t), FT_n^{\alpha}(t)\rangle_w,$$

and using the property of orthogonality of the FCFs we have

$$a_n = \frac{2\alpha}{\pi c_n} \int_0^1 FT_n^{\alpha}(t) y(t) w(t) dt, n \geq 0.$$

In practice, we have to use the first m terms of FCFs and approximate $y(t)$:

$$y(t) \approx y_m(t) = \sum_{n=0}^{m-1} a_n FT_n^{\alpha}(t) = A^T \Phi(t), \quad (11)$$

with

$$A = [a_0, a_1, \ldots, a_{m-1}]^T, \quad (12)$$

$$\Phi(t) = [FT_0^{\alpha}(t), FT_1^{\alpha}(t), \ldots, FT_{m-1}^{\alpha}(t)]^T. \quad (13)$$

3.3. Convergence of method. The following theorem shows that by increasing m, the approximation solution $f_m(t)$ is convergent to $f(t)$ exponentially.

Theorem 2. *Suppose that*

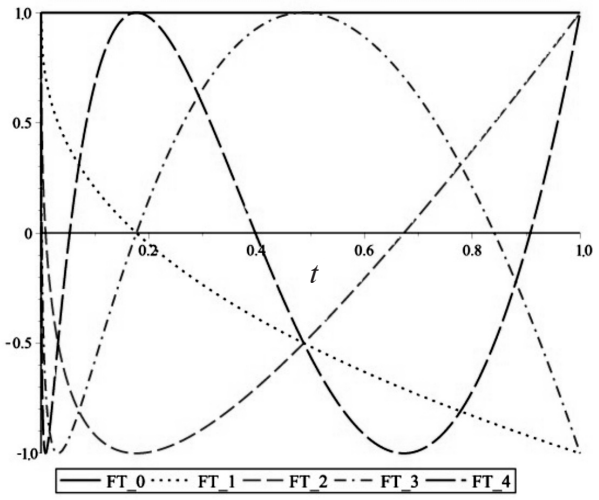
$$D^{ka} f(t) \in C[0,1] \text{ for } k = 0,1, \ldots, m,$$

and E_m^{α} *is the subspace being generated by*

$$\{FT_0^{\alpha}(t), FT_1^{\alpha}(t), \ldots, FT_{m-1}^{\alpha}(t)\}.$$

If $f_m = A^T \Phi$ *is the best approximation to f*

a)



b)

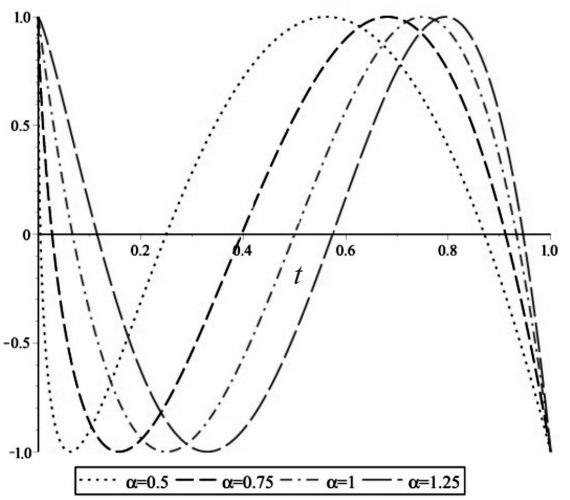


Fig. 1. Graphs of the FCFs with $\alpha = 0.40$ and various values of n (*a*), and with $n = 4$ and various values of α (*b*)

from E_m^α, *then the error bound is presented as follows*:

$$\| f(t) - f_m(t) \|_w \le \frac{M_\alpha}{2^m \Gamma(m\alpha+1)} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha\, m!}},$$

where $M_\alpha \ge \left| D^{m\alpha} f(t) \right|, t \in [0,1]$.

Proof. By Theorem 1, we have

$$y = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{t^{i\alpha}}{\Gamma(i\alpha+1)} D^{i\alpha} f(0^+)$$

and

$$\left| f(t) - y(t) \right| \le M_\alpha \frac{t^{m\alpha}}{\Gamma(m\alpha+1)}.$$

Since the best approximation to f from E_m^α is $A^T \Phi(t)$, and $y \in E_m^\alpha$, thus

$$\left\| f(t) - f_m(t) \right\|_w^2 \le \left\| f(t) - y(t) \right\|_w^2 \le$$

$$\le \frac{M_\alpha^2}{\Gamma(m\alpha+1)^2} \int_0^1 \frac{t^{\frac{\alpha}{2}+2m\alpha-1}}{\sqrt{1-t^\alpha}}\, dt =$$

$$= \frac{M_\alpha^2}{\Gamma(m\alpha+1)^2} \frac{\pi}{2^{2m}\, \alpha\, m!}.$$

The theorem is proved.

4. Operational matrices of FCFs

In this section, operational matrices of fractional derivatives and the product for the FCFs are constructed. These matrices can be used to solve the linear and nonlinear differential equations of an arbitrary order.

4.1. The fractional derivative operational matrix of FCFs. The Caputo fractional derivative operator of an order $\alpha > 0$ of the vector $\Phi(t)$ in the Eq. (13) can be expressed by

$$D^\alpha \Phi(t) = D^{(\alpha)} \Phi(t). \tag{14}$$

In the following theorem, the operational matrix of fractional derivatives of the FCFs is generalized.

Theorem 3. *Let* $\Phi(t)$ *be FCFs vector in the Eq. (13), and* $D^{(\alpha)}$ *be an* $m \times m$ *operational matrix of Caputo fractional derivatives of an order* $\alpha > 0$, *then:*

$$D_{i,j}^{(\alpha)} = \frac{2}{\sqrt{\pi} c_j} \sum_{k=1}^{i} \sum_{s=0}^{j} \beta_{i,k} \beta_{j,s} \times \tag{15}$$

$$\times \frac{\Gamma(\alpha k+1)\Gamma\left(s+k-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(\alpha k-\alpha+1)\Gamma(s+k)}, i \ne 0,$$

$$D_{0,j}^{(\alpha)} = 0, \tag{16}$$

for $i, j = 0, 1, \ldots, m-1$.

Proof. Using Eq. (14), by orthogonality property of FCFs, for $i = 1, 2, \ldots, m-1$ and $j = 0, 1, \ldots, m-1$, we have

$$D_{i,j}^{(\alpha)} = \frac{2\alpha}{\pi c_j} \int_0^1 D^\alpha FT_i^\alpha(t) FT_j^\alpha(t) w(t) dt =$$

$$= \frac{2\alpha}{\pi c_j} \int_0^1 \sum_{k=1}^{i} \beta_{i,k} \frac{\Gamma(\alpha k+1) t^{\alpha k-\alpha}}{\Gamma(\alpha k-\alpha+1)} \times$$

$$\times \sum_{s=0}^{j} \beta_{j,s} t^{\alpha s} \frac{t^{\frac{\alpha}{2}-1}}{\sqrt{1-t^\alpha}} dt = \tag{17}$$

$$= \frac{2\alpha}{\pi c_j} \sum_{k=1}^{i} \sum_{s=0}^{j} \beta_{i,k} \beta_{j,s} \frac{\Gamma(\alpha k+1)}{\Gamma(\alpha k-\alpha+1)} \times$$

$$\times \int_0^1 \frac{t^{\alpha\left(k+s-\frac{1}{2}\right)-1}}{\sqrt{1-t^\alpha}} dt.$$

Now, by integration of the above equation, Eq. (15) can be proved.

And since $D^\alpha FT_0^\alpha(t) = 0$, therefore

$$\int_0^1 D^\alpha FT_0^\alpha(t) FT_j^\alpha(t) w(t) dt = 0,$$

and Eq. (16) can be proved.

The theorem is proved.

Remark 1. The fractional derivative operational matrix of FCFs for $\alpha = 1$ is the same functions as the shifted Chebyshev polynomials [39].

4.2. The product operational matrix of FCFs. The following property of the product of two FCFs vectors will also be applied.

$$\Phi(t) \Phi(t)^T A \approx \widehat{A} \Phi(t), \tag{18}$$

where $\widehat{A}$ is an $m \times m$ product operational matrix for the vector $A = \{a_i\}_{i=0}^{m-1}$.

Theorem 4. *Let* $\Phi(t)$ *be FCFs vector in Eq. (13) and* A *be a vector, then the elements of* $\widehat{A}$ *are obtained as*

$$\widehat{A}_{ij} = \sum_{k=0}^{m-1} a_k \hat{g}_{ijk}, \tag{19}$$

where

$$\hat{g}_{ijk} = \begin{cases} \dfrac{c_k}{2c_j},\ i \neq 0 \text{ and } j \neq 0, \\ \text{and } (k = i + j \text{ or } k = |i - j|); \\ \dfrac{c_k}{c_j}\ (j = 0 \text{ and } k = i) \\ \text{or } (i = 0 \text{ and } k = j); \\ 0, \text{ otherwise.} \end{cases}$$

Proof. Using Eq. (18), by the orthogonal property Eq. (10) the elements $\{\widehat{A}_{ij}\}_{i,j=0}^{m-1}$ can be calculated from

$$\widehat{A}_{ij} = \frac{2\alpha}{\pi c_j} \sum_{k=0}^{m-1} a_k g_{ijk}, \qquad (20)$$

where g_{ijk} is given by

$$g_{ijk} = \int_0^1 FT_i^{\alpha}(t) FT_j^{\alpha}(t) FT_k^{\alpha}(t) w(t) dt.$$

To simplify the g_{ijk}, the following property is used:

$$FT_i^{\alpha}(t) FT_j^{\alpha}(t) = \frac{1}{2}(FT_{i+j}^{\alpha}(t) + FT_{|i-j|}^{\alpha}(t)). \qquad (21)$$

By substituting Eq. (21) in g_{ijk}, we have

$$g_{ijk} = \begin{cases} \dfrac{\pi c_k}{4\alpha},\ i \neq 0 \ \text{ and } j \neq 0, \\ \text{and } (k = i + j \text{ or } k = |i - j|); \\ \dfrac{\pi c_k}{2\alpha}\ (j = 0 \text{ and } k = i) \\ \text{or } (i = 0 \ \text{ and } \ k = j); \\ 0, \text{ otherwise.} \end{cases}$$

Now by using Eq. (20), the theorem can be proved.

The theorem is proved.

Remark 2. The product operational matrix of FCFs is the same function as the shifted Chebyshev polynomials [39]. As a whole, it can be said that the components of $\widehat{A}$ are independent of α values.

5. Application of the method

We expand unknown functions $y(t)$, $D^{\alpha}y(t)$ and known functions $p_1(t), p_2(t), g(t)$ as follows:

$$y(t) \approx y_m(t) = \sum_{n=0}^{m-1} a_n FT_n^{\alpha}(t) = A^T \Phi(t), \qquad (22)$$

$$D^{\alpha}y(t) \approx \sum_{n=0}^{m-1} a_n D^{\alpha} FT_n^{\alpha}(t) = A^T D^{(\alpha)} \Phi(t), \qquad (23)$$

$$p_1(t) \approx \sum_{n=0}^{m-1} p_{1n} FT_n^{\alpha}(t) = B_1^T \Phi(t),$$

$$p_2(t) \approx \sum_{n=0}^{m-1} p_{2n} FT_n^{\alpha}(t) = B_2^T \Phi(t),$$

$$g(t) \approx \sum_{n=0}^{m-1} g_n FT_n^{\alpha}(t) = G^T \Phi(t),$$

and

$$y^2(t) \approx A^T \widehat{A} \Phi(t),$$

$$p_1(t) y^2(t) \approx B_1^T \widehat{A_1} \Phi(t),$$

$$p_2(t) y(t) \approx B_2^T \widehat{A} \Phi(t),$$

where $\widehat{A}_1$ is the product operational matrix of vector $\widehat{A}^T A$.

By substituting the approximations presented above into Eq. (1) we obtain:

$$A^T D^{(\alpha)} \Phi(t) + B_1^T \widehat{A}_1 \Phi(t) + B_2^T \widehat{A} \Phi(t) = G^T \Phi(t). \qquad (24)$$

Now, by multiplying the two sides of Eq. (24) in $\Phi^T(t)$, then integrating in the interval [0, 1], according to orthogonality of FCFs, we get (the Galerkin method):

$$A^T D^{(\alpha)} + B_1^T \widehat{A}_1 + B_2^T \widehat{A} = G^T, \qquad (25)$$

which is a linear or a nonlinear system of algebraic equations.

Now, for satisfying the initial conditions, we replace n equations of these equations (25) with n initial conditions (2), and obtain a linear or a nonlinear system with m equations and m unknowns. By solving this system, the approximate solution of Eq. (1) according to Eq. (22) is obtained.

The residual error function has been defined according to Eqs. (1), (22), and (23) as follows:

$$\text{Res}(t) = A^T D^{(\alpha)} \Phi(t) + p_1(t) y_m^2(t) + p_2(t) y_m(t) - g(t). \qquad (26)$$

6. Illustrative examples

In this section, by using the proposed method, several nonlinear fractional Riccati differential equations are solved to show the efficiency and applicability of the FCFs method based on the spectral method.

Example 1. Consider the following nonlinear Riccati differential equation [21, 40, 41]:

$$D^{\alpha} y(t) + y^2(t) = 1, \ 0 < \alpha, t \le 1, \qquad (27)$$

with the initial condition

$$y(0) = 0. \qquad (28)$$

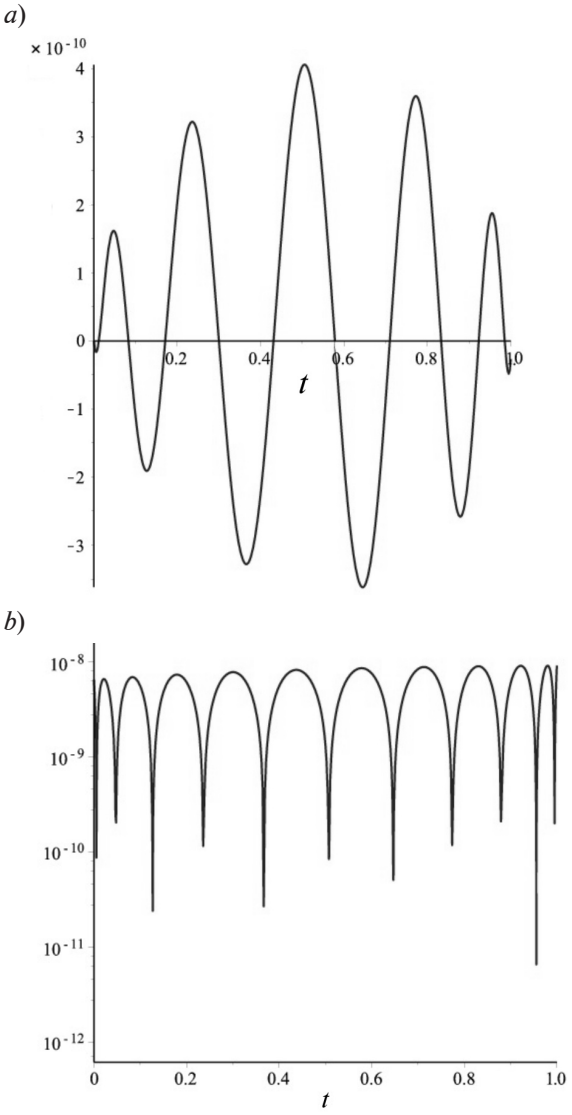


Fig. 2. Obtained graphs of the absolute (*a*) and the residual (*b*) error functions with $m = 12$ and $\alpha = 1$ (for Example 1)

The exact solution, when $\alpha = 1$, is

$$y(t) = \frac{e^{2t} - 1}{e^{2t} + 1}. \qquad (29)$$

By applying the technique described in the last section, the problem can be converted to the following:

$$(A^T D^{(\alpha)} + A^T \widehat{A})\Phi(t) = G^T \Phi(t),$$

where $\widehat{A}$ is obtained from Eq. (19) and $G^T = [1, 0, 0, \ldots, 0]$.

Now, with the replacement of the m-th equation of these equations with the initial condition (28), a set of m nonlinear algebraic equations can be generated, as follows:

$$A^T (D^{(\alpha)} + \widehat{A}) = G^T,$$

$$A^T \Phi(0) = 0.$$

Fig. 2 shows the absolute error of the approximate solution with the exact solution and the residual error for $\alpha = 1$ and $m = 12$.

Fig. 3 shows the approximate solutions for various values α and $m = 10$. Definitely, in Fig. 3, *a*, when α tends to 1, the approximate solutions of $y(t)$ will converge to the exact solution in Eq. (29), and, in Fig. 3, *b*, when α tends to 0, the approximate solutions of $y(t)$ will converge to the exact solution

$$y(t) = \frac{-1 + \sqrt{5}}{2}.$$

Table 1 shows the residual errors and the obtained values of $y(t)$ by the present method for various values α and $m = 12$.

Table 2 shows a comparison of obtained values of $y(t)$ by the present method and HPM (see Ref. [41]) for $\alpha = 1$ and $m = 12$.

In the case with $\alpha = 0.50$ and $m = 12$ in the Riccati differential equation (27), the approximate solution in a series expansion is obtained as:

$$y(t) = 1.1283789766\sqrt{t} + 0.0000436003t - 0.9595868217t^{3/2} + 0.0298952318t^2 + 1.0378491665t^{5/2} + 1.3663547362t^3 - 6.3882854589t^{7/2} + 8.7043955759t^4 - 6.1900399882t^{9/2} + 2.3468978237t^5 - 0.3771636132t^{11/2}.$$

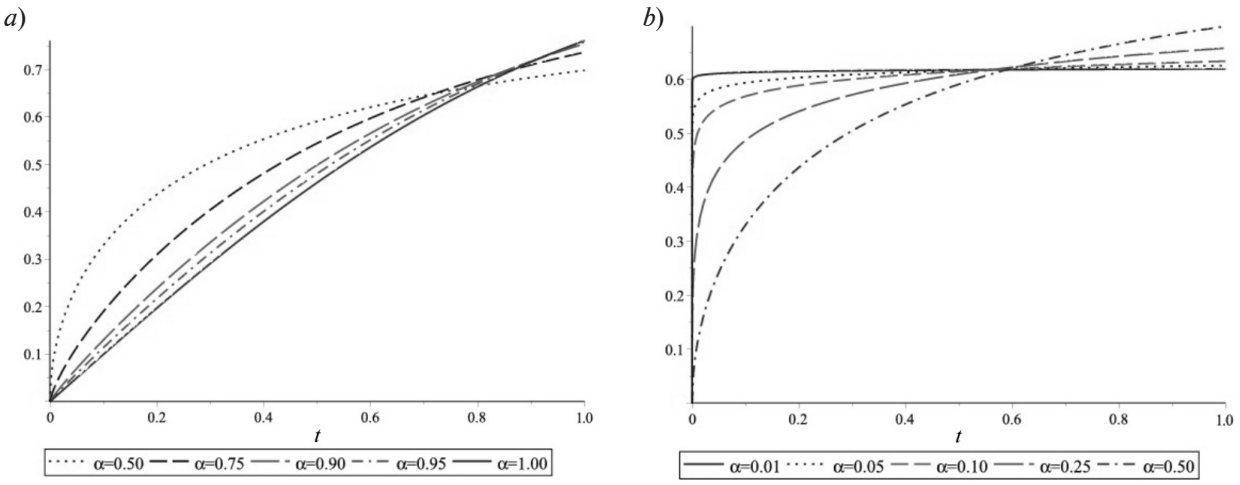


Fig. 3. Obtained graphs of the approximate solutions with $m = 10$ and the various values of α: when α tends to 1 (*a*) and to 0 (*b*) (for Example 1)

Table 1

Values of $y(t)$ obtained by the present method with $m = 12$ (for Example 1)

t	α = 0.50		α = 0.90		α = 1.00		
	Approximate solution	Residual error	Approximate solution	Residual error	Approximate solution	Absolute error	Residual error
0.0	0.00000000	0.00e−0	0.00000000	0.00e−0	0.00000000	0.00e−00	0.00e−0
0.1	0.33010841	4.52e−8	0.13003745	2.44e−9	0.09966799	1.11e−10	5.60e−9
0.2	0.43683875	5.94e−8	0.23878913	2.77e−9	0.19737532	2.04e−10	6.16e−9
0.3	0.50488936	4.06e−8	0.33596217	1.72e−8	0.29131261	2.10e−12	7.85e−9
0.4	0.55378188	1.30e−7	0.42258308	3.40e−8	0.37994896	2.23e−10	5.59e−9
0.5	0.59119411	6.50e−8	0.49913519	2.39e−8	0.46211715	4.03e−10	1.34e−9
0.6	0.62101362	8.59e−8	0.56617156	8.20e−9	0.53704956	1.79e−10	7.61e−9
0.7	0.64548540	1.07e−7	0.62439622	3.18e−8	0.60436777	8.59e−11	8.46e−9
0.8	0.66601875	7.7e−10	0.67462699	3.34e−8	0.66403677	2.70e−10	5.82e−9
0.9	0.68355221	7.44e−8	0.71773475	3.13e−8	0.71629787	1.89e−10	5.96e−9
1.0	0.69873922	1.11e−7	0.75458880	3.44e−8	0.76159415	2.66e−11	9.21e− 9

Table 2

Comparison of obtained values of $y(t)$ with α = 1(for Example 1)

t	HPM [41]	Present method	Exact solution	Absolute error	Residual error
0.1	0.099668	0.0996679945	0.0996679946	1.11e−10	5.60e−9
0.2	0.197375	0.1973753204	0.1973753202	2.04e−10	6.16e−9
0.3	0.291312	0.2913126124	0.2913126124	2.10e−12	7.85e−9
0.4	0.379944	0.3799489620	0.3799489622	2.23e−10	5.59e−9
0.5	0.462078	0.4621171576	0.4621171572	4.03e−10	1.34e−9
0.6	0.536857	0.5370495668	0.5370495669	1.79e−10	7.61e−9
0.7	0.603631	0.6043677770	0.6043677771	8.59e−11	8.46e−9
0.8	0.661706	0.6640367705	0.6640367702	2.70e−10	5.82e−9
0.9	0.709919	0.7162978700	0.7162978701	1.89e−10	5.96e−9
1.0	0.746032	0.7615941559	0.7615941559	2.66e−11	9.21e−9

Note. HPM − the Homotopy Pertubation Method.

Example 2. Consider the following nonlinear Riccati differential equation [21, 40, 41] that has the form

$$D^{\alpha} y(t) + y^2(t) - 2y(t) = 1, \quad 0 < \alpha, t \le 1, \quad (30)$$

with the initial condition

$$y(0) = 0. \quad (31)$$

The exact solution, when $\alpha = 1$, is

$$y(t) = 1 + \sqrt{2}\tanh\left(\sqrt{2}t + \frac{1}{2}\log\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)\right). \quad (32)$$

By applying the technique described in the last section, the problem can be converted to

$$(A^T D^{(\alpha)} + A^T \widehat{A} - 2A^T)\Phi(t) = G^T \Phi(t),$$

where $\widehat{A}$ is obtained from Eq. (19), and

$$G^T = [1, 0, 0, \ldots, 0].$$

Now, with the replacement of the m-th equation of these equations with the initial condition (31), a set of m nonlinear algebraic equations can be generated as follows:

$$A^T (D^{(\alpha)} + \widehat{A} - 2I) = G^T,$$

$$A^T \Phi(0) = 0.$$

Fig. 4 shows the absolute error of the approximate solution with respect to the exact one and the residual error for $\alpha = 1$ and $m = 30$.

Fig. 5 shows the approximate solutions for various values of α and $m = 12$. Definitely, in Fig. 5, *a*, when α tends to 1, the approximate solutions of $y(t)$ will converge to the exact solution of Eq. (32), and, in Fig. 5, *b*, when α tends to 0, the approximate solutions of $y(t)$ will converge to the exact solution

$$y(t) = \frac{1+\sqrt{5}}{2}.$$

Table 3 shows the residual errors and the obtained values of $y(t)$ by the present method for various α values.

Table 4 shows a comparison of obtained values of $y(t)$ by the present method and by HPM (see Ref. [41]) for $\alpha = 1$ and $m = 30$.

Example 3. Consider the following nonlinear Riccati differential equation that has the form

$$D^{\alpha} y(t) - y^2(t) + e^t y(t) = e^t,$$

$$0 < \alpha \le 2, \ 0 \le t \le 1, \quad (33)$$

with initial conditions

$$y(0) = 1, \ y'(0) = 1 \ \ (\text{if } \alpha > 1). \quad (34)$$

The exact solution, when $\alpha = 2$ and $\alpha = 1$, is

$$y(t) = e^t. \quad (35)$$

By applying the technique described in the last section, the problem can be converted to

$$(A^T D^{(\alpha)} - A^T \widehat{A} + B_2^T \widehat{A})\Phi(t) = G^T \Phi(t),$$

where $\widehat{A}$ is obtained from Eq. (19).

Now, with the replacement of the two last

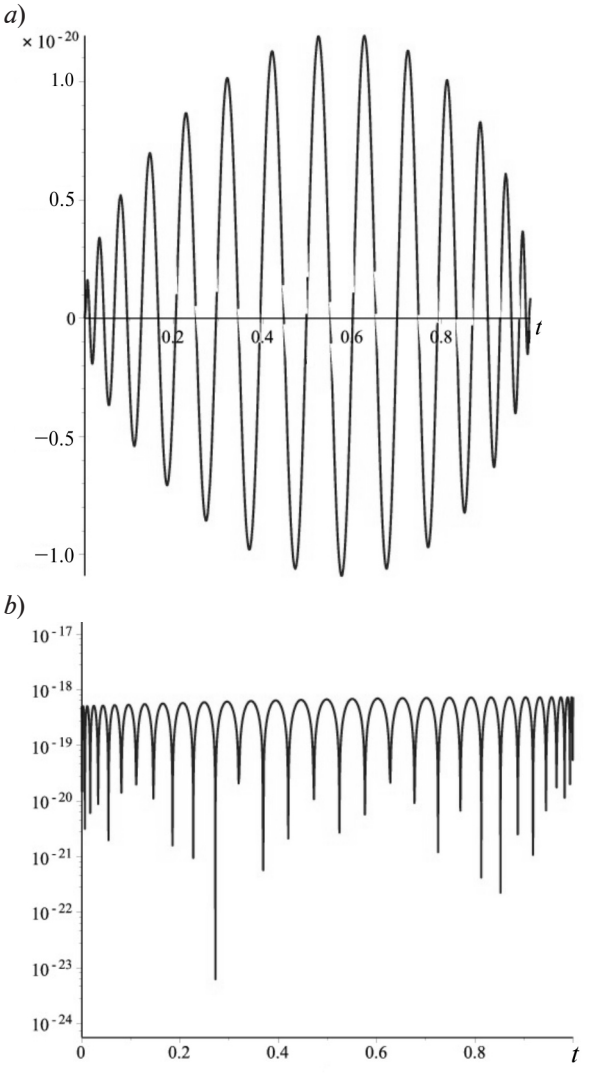


Fig. 4. Obtained graphs of the absolute (*a*) and the residual (*b*) error functions with $m = 30$ and $\alpha = 1$ (for Example 2)

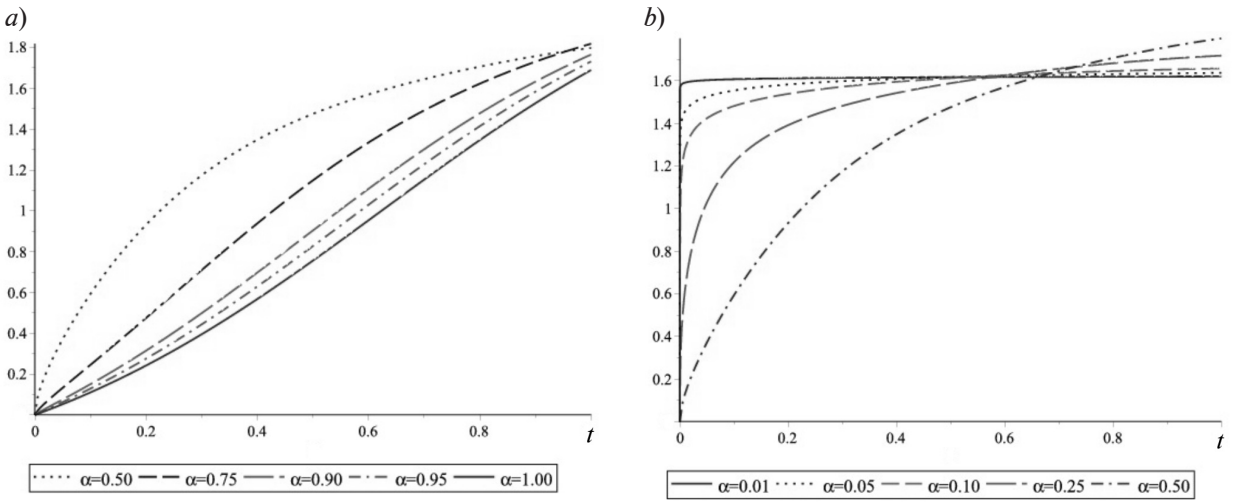


Fig. 5. Obtained graphs of the approximate solutions (*a*) and the residual error functions (*b*) with $m = 12$ and the various values of α: when α tends to 1 (*a*) and to 0 (*b*) (for Example 2)

Table 3

Values of $y(t)$ obtained by the present method (for Example 2)

t	α = 0.75 (m = 15)		α = 0.90 (m = 15)		α = 1.00 (m = 30)		
	Approximate solution	Residual error	Approximate solution	Residual error	Approximate solution	Absolute error	Residual error
0.0	0.00000000	1.82e−5	0.00000000	5.95e−8	0.00000000	0.00e−00	5.07e−19
0.1	0.24543249	9.80e−6	0.15070989	5.93e−8	0.11029519	2.40e−21	4.79e−19
0.2	0.47509479	4.56e−6	0.31486440	1.74e−8	0.24197679	2.51e−21	5.36e−19
0.3	0.71002417	1.20e−5	0.49866532	1.31e−8	0.39510484	3.23e−21	5.90e−19
0.4	0.93853496	1.83e−5	0.69753897	3.40e−8	0.56781216	3.96e−21	6.14e−19
0.5	1.14906032	1.21e−5	0.90366760	6.32e−8	0.75601439	1.69e−21	6.74e−19
0.6	1.33433341	4.40e−6	1.10786162	8.52e−8	0.95356621	9.35e−21	6.95e−19
0.7	1.49192213	1.66e−5	1.30143258	9.38e−8	1.15294896	6.26e−21	7.15e−19
0.8	1.62298951	1.76e−5	1.47770301	9.52e−8	1.34636365	5.69e−21	6.15e−19
0.9	1.73060956	1.67e−5	1.63273978	6.72e−8	1.52691131	3.33e−21	6.89e−19
1.0	1.81851003	1.86e−5	1.76527518	9.64e−8	1.68949839	8.45e−21	7.38e−19

Table 4

Comparison of obtained values of $y(t)$ with $\alpha = 1$ (for Example 2)

t	HPM [41]	Present method	Exact solution	Absolute error	Residual error
0.1	0.110294	0.11029519691696228095	0.11029519691696228096	2.40e−21	4.79e−19
0.2	0.241965	0.24197679962110923224	0.24197679962110923224	2.51e−21	5.36e−19
0.3	0.395106	0.39510484866037839343	0.39510484866037839343	3.23e−21	5.90e−19
0.4	0.568115	0.56781216629293854988	0.56781216629293854987	3.96e−21	6.14e−19
0.5	0.757564	0.75601439343137566624	0.75601439343137566624	1.69e−21	6.74e−19
0.6	0.958259	0.95356621647192273865	0.95356621647192273865	9.35e−21	6.95e−19
0.7	1.163459	1.15294896697962321762	1.15294896697962321762	6.26e−21	7.15e−19
0.8	1.365240	1.34636365536837509274	1.34636365536837509274	5.69e−21	6.15e−19
0.9	1.554960	1.52691131328062418721	1.52691131328062418721	3.33e−21	6.89e−19
1.0	1.723810	1.68949839159438298686	1.68949839159438298686	8.45e−21	7.38e−19

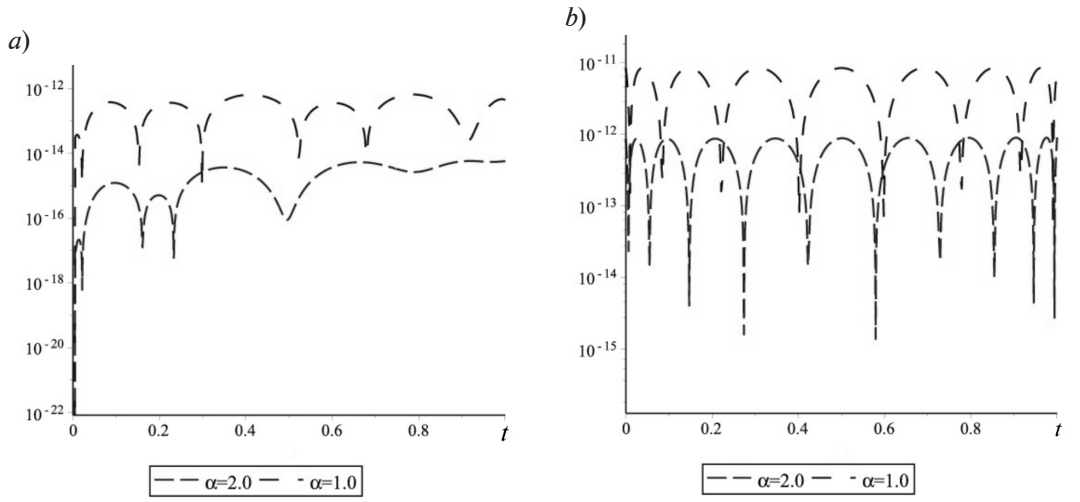


Fig. 6. Obtained graphs of the absolute (*a*) and the residual (*b*) errors with $m = 12$, $\alpha = 1$ and $\alpha = 2$ (for Example 3)

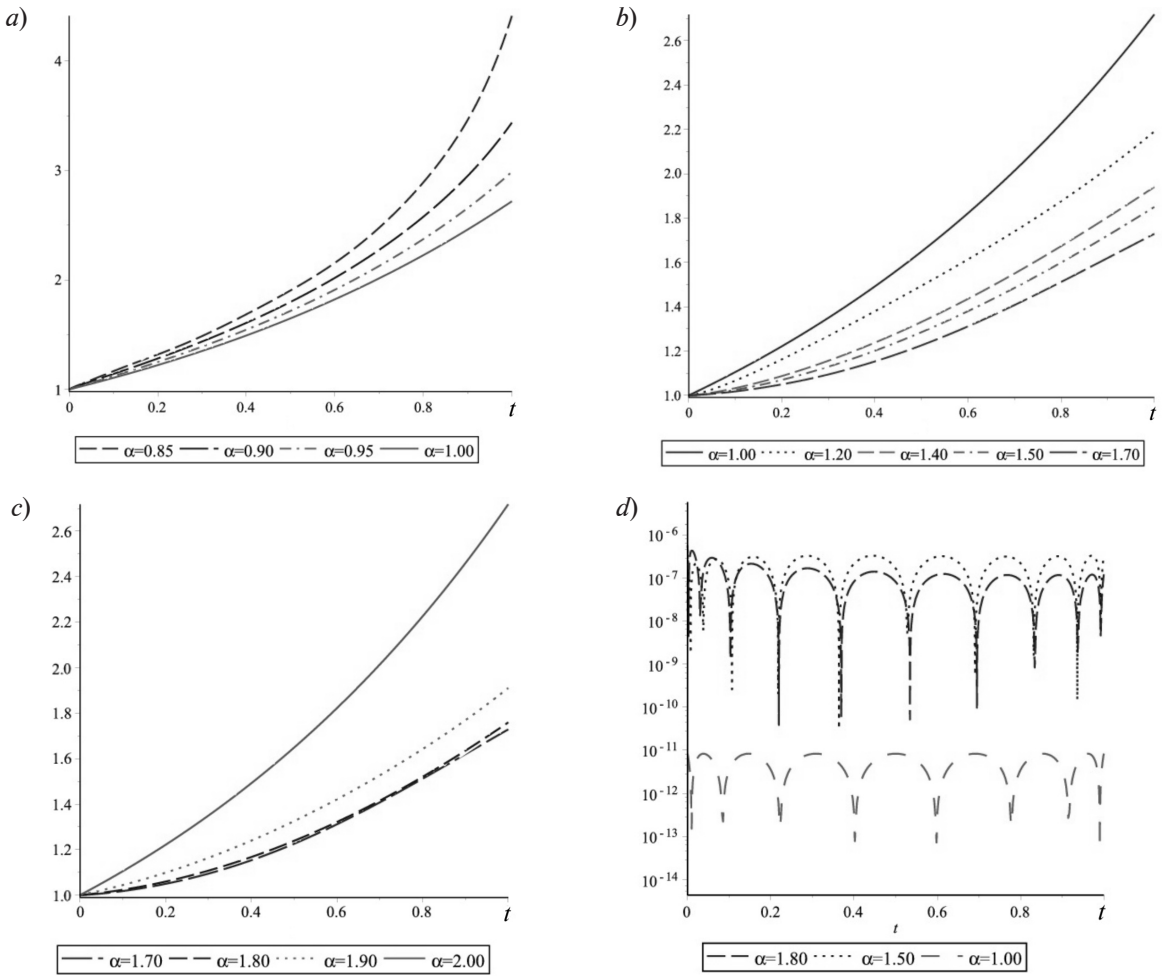


Fig. 7. Obtained graphs of the approximate solutions with $m = 10$ ($a - c$) and the residual errors with $m = 12$ (*d*) for various values of α: $0 \le \alpha \le 1.0$ (*a*), $1.0 \le \alpha \le 1.7$ (*b*), $1.7 \le \alpha \le 2.0$ (*c*), $1.00 \le \alpha \le 1.80$ (*d*) (for Example 3)

Table 5

Values of $y(t)$ with $m = 12$ obtained by the present method (for Example 3)

t	$\alpha = 1.80$		$\alpha = 1.50$		$\alpha = 1.00$	
	Approximate solution	Residual error	Approximate solution	Residual error	Approximate solution	Residual error
0.0	1.0000000000	0.00e−0	1.0000000000	0.00e−0	1.0000000000	0.00e−00
0.1	1.0235085766	2.33e−8	1.0247048727	6.95e−8	1.1051709180	3.51e−12
0.2	1.0595333960	8.59e−8	1.0697960272	1.34e−7	1.2214027581	3.51e−12
0.3	1.1076128039	1.63e−7	1.1293315559	3.17e−7	1.3498588075	8.22e−12
0.4	1.1674004066	8.30e−8	1.2014933888	2.15e−7	1.4918246976	3.31e−12
0.5	1.2387187663	8.14e−8	1.2853141729	1.67e−7	1.6487212707	8.31e−12
0.6	1.3214261255	1.19e−7	1.3800725660	3.14e−7	1.8221188003	3.31e−12
0.7	1.4153208915	1.19e−8	1.4850282438	5.83e−8	2.0137527074	8.22e−12
0.8	1.5200543734	8.75e−8	1.5992421055	2.20e−7	2.2255409284	3.51e−12
0.9	1.6350374400	1.13e−7	1.7214121635	3.04e−7	2.4596031111	3.51e−12
1.0	1.7593322223	1.21e−7	1.8496977803	3.39e−7	2.7182818284	8.31e−12

equations of these equations with the initial conditions (34), a set of m nonlinear algebraic equations can be generated as follows:

$$(A^T D^{(\alpha)} - A^T \widehat{A} + B_2^T \widehat{A}) = G^T,$$

$$A^T \Phi(0) = 1,$$

$$A^T D^{(1)} \Phi(0) = 1, \; if \; \alpha > 1.$$

Fig. 6 shows the absolute errors of the approximate solutions with respect to the exact solution and the residual errors for $\alpha = 1$ and $\alpha = 2$ with $m = 12$.

Fig. 7 shows the approximate solutions for the various values

$$0 \le \alpha \le 1.0, \; 1 \le \alpha \le 1.7, \text{ and } 1.7 \le \alpha \le 2.0$$

with $m = 10$.

Definitely, when α tends to 1, from the left-hand side (Fig. 7, *a*), the approximate solutions of $y(t)$ will converge to the exact one in Eq. (35), and when α tends to 1, from the right-hand side (Fig. 7, *b*), the approximate solutions of $y(t)$ will converge to the exact solution in Eq. (35), and when α tends to 2, from the left-hand side (Fig. 7, *c*), the approximate solutions of $y(t)$ will converge to the exact solution in Eq. (35). As can be seen, for α from 1.0 to about 1.7, the graph of the function is moving from $\alpha = 1.0$ to $\alpha = 1.7$ (Fig. 7, *b*), and then the graph of the function is returning to $\alpha = 2.0$ (Fig. 7, *c*). Fig. 7, *d* shows the residual errors for various values α with $m = 12$.

Table 5 shows the residual errors and the obtained values of $y(t)$ by the present method for various values α and $m = 12$.

7. Conclusion

In this paper, we have introduced the fractional order of the Chebyshev functions of the first kind. Then the operational matrices of fractional derivatives and the product of these orthogonal functions have been obtained. These matrices can be used to solve the linear and nonlinear differential equations, as well as the nonlinear Riccati differential equations of an arbitrary (integer and fractional) order. As it has been shown, the method is converging and has an approximate accuracy and stability. Illustrative examples have shown that this method has good results and suitable accuracy in comparison to other methods.

Acknowledgments

The authors are very grateful to the reviewers and the editor for careful reading of the paper and for their comments and suggestions which have improved it.

REFERENCES

[1] **M.R. Eslahchi, M. Dehghan, S. Amani**, Chebyshev polynomials and best approximation of some classes of functions, J. Numer. Math. 23 (1) (2015) 41 −50.

[2] **A.H. Bhrawy, A.S. Alofi**, The operational matrix of fractional integration for shifted Chebyshev polynomials, Appl. Math. Lett. 26 (1) (2013) 25–31.

[3] **K. Parand, M. Shahini, M. Dehghan**, Solution of a laminar boundary layer flow via a numerical method, Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 15 (2) (2010) 360–367.

[4] **A. Saadatmandi, M. Dehghan**, Numerical solution of hyperbolic telegraph equation using the Chebyshev tau method, Numer. Method. Part. D. E., 26 (1) (2010) 239–252.

[5] **K.S. Miller, B. Ross**, An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations, Wiley, New York, 1993.

[6] **X. Li**, Numerical solution of fractional differential equations using cubic B-spline wavelet collocation method, Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 17 (10) (2012) 3934–3946.

[7] **A. Saadatmandi, M. Dehghan, M.R. Azizi**, The Sinc-Legendre collocation method for a class of fractional convection-diffusion equations with variable coefficients, Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 17 (11) (2012) 4125–4136.

[8] **K. Parand, S. Khaleqi**, The rational Chebyshev of second kind collocation method for solving a class of astrophysics problems, Euro. Phys. J. Plus, 131 (2) (2016) 1–24.

[9] **K. Parand, M. Dehghan, A. Pirkhedri**, The Sinc-collocation method for solving the Thomas–Fermi equation, J. Comput. Appl. Math. 237 (1) (2013) 244–252.

[10] **K. Parand, S. Abbasbandy, S. Kazem, A.R. Rezaei**, An improved numerical method for a class of astrophysics problems based on radial basis functions, Phys. Scripta, 83 (1) (2011) 015011.

[11] **K. Parand, M. Dehghan, A. Taghavi**, Modified generalized Laguerre function Tau method for solving laminar viscous flow: The Blasius equation, Int. J. Numer. Method. H., 20 (7) (2010) 728–743.

[12] **J.P. Boyd**, Chebyshev and Fourier spectral methods, second edition, Dover Publications, Mineola, New York (2000).

[13] **G.W. Leibniz**, Letter from Hanover, Germany, to G.F.A. L'Hopital, September 30; 1695, in Mathematische Schriften, 1849; reprinted 1962, Olms Verlag; Hidesheim, Germany, Vol. 2, pp. 301–302, 1965.

[14] **I. Podlubny**, Fractional differential equations, Academic Press, San Diego, 1999.

[15] **I. Podlubny**, Geometric and physical interpretation of fractional integration and fractional differentiation, Fract. Calc. Appl. Anal. 5 (2002) 367–386.

[16] **K.M. Kolwankar**, Studies of fractal structures and processes using methods of the fractional calculus, arXiv preprint chao-dyn/9811008 (1998).

[17] **M. Delkhosh**, Introduction of derivatives and integrals of fractional order and its applications, Appl. Math. Phys. 1 (4) (2013) 103–119.

[18] **J. He**, Nonlinear oscillation with fractional derivative and its applications, in: International Conference on Vibrating Engineering'98, Dalian, China, 1998, pp. 288–291.

[19] **K. Moaddy, S. Momani, I. Hashim**, The non-standard finite difference scheme for linear fractional PDEs in fluid mechanics, Comput. Math. Appl. 61 (4) (2011) 1209–1216.

[20] **S. Momani, N.T. Shawagfeh**, Decomposition method for solving fractional Riccati differential equations, Appl. Math. Comput. 182 (2) (2006) 1083–1092.

[21] **S. Kazem, S. Abbasbandy, S. Kumar**, Fractional-order Legendre functions for solving fractional-order differential equations, Appl. Math. Modell. 37 (7) (2013) 5498–5510.

[22] **M.A. Darani, M. Nasiri**, A fractional type of the Chebyshev polynomials for approximation of solution of linear fractional differential equations, Comput. Method. Diff. Eq. 1 (2) (2013) 96–107.

[23] **I. Hashim, O. Abdulaziz, S. Momani**, Homotopy analysis method for fractional IVPs, Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 14 (3) (2009) 674–684.

[24] **K. Parand, M. Nikarya**, Application of Bessel functions and spectral methods for solving differential and integro-differential equations of the fractional order, Appl. Math. Modell. 38 (15–16) (2014) 4137–4147.

[25] **J.A. Rad, S. Kazem, M. Shaban, K. Parand, A. Yildirim**, Numerical solution of fractional differential equations with a Tau method based on Legendre and Bernstein polynomials, Math. Method. Appli. Sci. 37 (3) (2014) 329–342.

[26] **K. Parand, M. Delkhosh**, Solving Volterra's population growth model of arbitrary order using the generalized fractional order of the Chebyshev functions, Ricerche Mat. 65 (1) (2016) 1–22.

[27] **S. Kazem**, An integral operational matrix based on Jacobi polynomials for solving fractional-order differential equations, Appl. Math. Model. 37 (3) (2012) 1126–1136.

[28] **W.T. Reid**, Riccati differential equations, New York and London, Academic Press, 1972.

[29] **S. Abbasbandy**, Iterated He's homotopy perturbation method for quadratic Riccati differential equation, Appl. Math. Comput. 175 (1) (2006) 581–589.

[30] **A. Ranjbar, S.H. Hosseinnia, H. Soltani, J. Ghasemi**, A solution of Riccati nonlinear differential equation using enhanced homotopy perturbation

method (EHPM), IJE Transactions B: Appl. 21 (1) (2008) 27–38.

[31] **J. Cang, Y. Tan, H. Xu, S.J. Liao**, Series solutions of nonlinear Riccati differential equations with fractional order, Chaos, Solitons and Fractals, 40 (1) (2009) 1–9.

[32] **S. Balaji**, Legendre wavelet operational matrix method for solution of fractional order Riccati differential equation, J. Egyptian Math. Soc. 23 (2) (2015) 263–270.

[33] **K. Parand, S.A. Hossayni, J.A. Rad**, Operation matrix method based on Bernstein polynomials for the Riccati differential equation and Volterra population model, Appl. Math. Model. 40 (2) (2016) 993–1011.

[34] **Y. Li, N. Sun, B. Zheng, Q. Wang, Y. Zhang**, Wavelet operational matrix method for solving the Riccati differential equation, Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 19 (3) (2014) 483–493.

[35] **F. Ghomanjani, E. Khorram**, Approximate solution for quadratic Riccati differential equation, J. Taibah Uni. Sci. 11 (2) (2015) 1–5.

[36] **M. Merdan**, On the solutions fractional Riccati differential equation with modified Riemann – Liouville derivative, Int. J. Diff. Eq. 2012, Article ID 346089. http://dx.doi.org/10.1155/2012/346089.

[37] **A.A. Kilbas, H.M. Srivastava, J.J. Trujillo**, Theory and applications of fractional differential equations, Elsevier, San Diego, 2006.

[38] **Z. Odibat, S. Momani**, An algorithm for the numerical solution of differential equations of fractional order, J. Appl. Math. Inform. 26 (1–2) (2008) 15–27.

[39] **E.A. Butcher, H. Ma, E. Bueler, V. Averina, Z. Szabo**, Stability of linear time-periodic delay-differential equations via Chebyshev polynomials, Int. J. Numer. Meth. Engng. 59 (7) (2004) 895–922.

[40] **H. Jafari, H. Tajadodi, D. Baleanu**, A numerical approach for fractional order Riccati differential equation using B-spline operational matrix, Fract. Calc. Appl. Anal. 18 (2) (2015) 387–399.

[41] **Z. Odibat, S. Momani**, Modified homotopy perturbation method: application to quadratic Riccati differential equation of fractional order, Chaos Solitons Fract. 36 (1) (2008) 167–174.

Received 05.03.2017, accepted 20.07.2017.

THE AUTHORS

PARAND Kourosh
Department of Computer Sciences, Shahid Beheshti University
Tehran Province, Tehran, District 1, Daneshjou Boulevard, 1983969411, Iran;
Department of Cognitive Modelling, Institute for Cognitive and Brain Sciences, Shahid Beheshti University
Tehran Province, Tehran, District 1, Daneshjou Boulevard, 1983969411, Iran
k_parand@sbu.ac.ir

DELKHOSH Mehdi
Department of Computer Sciences, Shahid Beheshti University
Tehran Province, Tehran, District 1, Daneshjou Boulevard, 1983969411, Iran
k_parand@sbu.ac.ir

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Eslahchi M.R., Dehghan M., Amani S.** Chebyshev polynomials and best approximation of some classes of functions // J. Numer. Math. 2015. Vol. 23. No. 1. Pp. 41 –50.

2. **Bhrawy A.H., Alofi A.S.** The operational matrix of fractional integration for shifted Chebyshev polynomials // Appl. Math. Lett. 2013. Vol. 26. No. 1. Pp. 25–31.

3. **Parand K., Shahini M., Dehghan M.** Solution of a laminar boundary layer flow via a numerical method // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 2010. Vol. 15. No. 2. Pp. 360–367.

4. **Saadatmandi A., Dehghan M.** Numerical solution of hyperbolic telegraph equation using the Chebyshev tau method // Numer. Method. Part. D.E. 2010. Vol. 26. No. 1. Pp. 239–252.

5. **Miller K.S., Ross B.** An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations. New York: Wiley, 1993. 384 p.

6. **Li X.** Numerical solution of fractional differential equations using cubic B-spline wavelet collocation method // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 2012. Vol. 17. No. 10. Pp. 3934–3946.

7. **Saadatmandi A., Dehghan M., Azizi M.R.** The Sinc-Legendre collocation method for a class of fractional convection-diffusion equations with variable coefficients. Commun // Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 2012. Vol. 17. No. 11. Pp. 4125–4136.

8. **Parand K., Khaleqi S.** The rational Chebyshev of second kind collocation method for solving a

class of astrophysics problems // Euro. Phys. J. Plus. 2016. Vol. 131. No. 2. Pp. 1–24.

9. **Parand K., Dehghan M., Pirkhedri A.** The Sinc-collocation method for solving the Thomas – Fermi equation // J. Comput. Appl. Math. 2013. Vol. 237. No. 1. Pp. 244–252.

10. **Parand K., Abbasbandy S., Kazem S., Rezaei A.R.** An improved numerical method for a class of astrophysics problems based on radial basis functions // Phys. Scripta. 2011. Vol. 83. No. 1. P. 015011.

11. **Parand K., Dehghan M., Taghavi A.** Modified generalized Laguerre function Tau method for solving laminar viscous flow: The Blasius equation // Int. J. Numer. Method. H. 2010. Vol. 20. No. 7. Pp. 728–743.

12. **Boyd J.P.** Chebyshev and Fourier spectral methods. Second edition. Mineola, New York: Dover Publications, Mineola, 2000.

13. **Leibniz G.W.** Letter from Hanover, Germany, to G.F.A. L'Hopital, September 30; 1695, in Mathematische Schriften, 1849; reprinted 1962, Olms verlag; Hidesheim, Germany, Vol. 2, Pp. 301–302, 1965.

14. **Podlubny I.** Fractional differential equations. San Diego: Academic Press, 1999.

15. **Podlubny I.** Geometric and physical interpretation of fractional integration and fractional differentiation // Fract. Calc. Appl. Anal. 2002. Vol. 5. Pp. 367–386.

16. **Kolwankar K.M.** Studies of fractal structures and processes using methods of the fractional calculus, arXiv preprint chao-dyn/9811008 (1998).

17. **Delkhosh M.** Introduction of derivatives and integrals of fractional order and its applications // Appl. Math. Phys. 2013. Vol. 1. No. 4. Pp. 103–119.

18. **He J.** Nonlinear oscillation with fractional derivative and its applications, in: International Conference on Vibrating Engineering'98, Dalian, China, 1998, pp. 288–291.

19. **Moaddy K., Momani S., Hashim I.** The non-standard finite difference scheme for linear fractional PDEs in fluid mechanics // Comput. Math. Appl. 2011. Vol. 61. No. 4. Pp. 1209–1216.

20. **Momani S., Shawagfeh N.T.** Decomposition method for solving fractional Riccati differential equations // Appl. Math. Comput. 2006. Vol. 182. No. 2. Pp. 1083–1092.

21. **Kazem S., Abbasbandy S., Kumar S.** Fractional-order Legendre functions for solving fractional-order differential equations // Appl. Math. Modell. 2013. Vol. 37. No. 7. Pp. 5498–5510.

22. **Darani M.A., Nasiri M.** A fractional type of the Chebyshev polynomials for approximation of solution of linear fractional differential equations // Comput. Method. Diff. Eq. 2013. Vol. 1. No. 2. Pp. 96–107.

23. **Hashim I., Abdulaziz O., Momani S.** Homotopy analysis method for fractional IVPs // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 2009. Vol. 14. No. 3. Pp. 674–684.

24. **Parand K., Nikarya M.** Application of Bessel functions and spectral methods for solving differential and integro-differential equations of the fractional order // Appl. Math. Modell. 2014. Vol. 38. No. 15–16. Pp. 4137–4147.

25. **Rad J.A., Kazem S., Shaban M., Parand K., Yildirim A.** Numerical solution of fractional differential equations with a Tau method based on Legendre and Bernstein polynomials // Math. Method. Appl. Sci. 2014. Vol. 37. No. 3. Pp. 329–342.

26. **Parand K., Delkhosh M.** Solving Volterra's population growth model of arbitrary order using the generalized fractional order of the Chebyshev functions. // Ricerche Mat. 2016. Vol. 65. No. 1. Pp. 1–22.

27. **Kazem S.** An integral operational matrix based on Jacobi polynomials for solving fractional-order differential equations // Appl. Math. Model. 2012. Vol. 37. No. 3. Pp. 1126–1136.

28. **Reid W.T.** Riccati differential equations. New York and London: Academic Press, 1972.

29. **Abbasbandy S.** Iterated He's homotopy perturbation method for quadratic Riccati differential equation // Appl. Math. Comput. 2006. Vol. 175. No. 1. Pp. 581–589.

30. **Ranjbar A., Hosseinnia S.H., Soltani H., Ghasemi J.** A solution of Riccati nonlinear differential equation using enhanced homotopy perturbation method (EHPM) // IJE Transactions B: Appl. 2008. Vol. 21. No. 1. Pp. 27–38.

31. **Cang J., Tan Y., Xu H., Liao S.J.** Series solutions of nonlinear Riccati differential equations with fractional order // Chaos, Solitons and Fractals. 2009. Vol. 40. No. 1. Pp. 1–9.

32. **Balaji S.** Legendre wavelet operational matrix method for solution of fractional order Riccati differential equation // J. Egyptian Math. Soc. 2015. Vol. 23. No. 2. Pp. 263–270.

33. **Parand K., Hossayni S.A., Rad J.A.** Operation matrix method based on Bernstein polynomials for the Riccati differential equation and Volterra population model // Appl. Math. Model. 2016. Vol. 40. No. 2. Pp. 993–1011.

34. **Li Y., Sun N., Zheng B., Wang Q., Zhang Y.** Wavelet operational matrix method for solving the Riccati differential equation // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 2014. Vol. 19. No. 3. Pp. 483–493.

35. **Ghomanjani F., Khorram E.** Approximate solution for quadratic Riccati differential equation

// J. Taibah Uni. Sci. 2015. Vol. 11. No. 2. Pp. 1–5.

36. **Merdan M.** On the solutions fractional Riccati differential equation with modified Riemann – Liouville derivative // Int. J. Diff. Eq. 2012. Article ID 346089. http://dx.doi.org/10.1155/2012/346089.

37. **Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J.** Theory and applications of fractional differential equations. San Diego: Elsevier, 2006.

38. **Odibat Z., Momani S.** An algorithm for the numerical solution of differential equations of fractional order // J. Appl. Math. Inform. 2008. Vol. 26. No. 1–2. Pp. 15–27.

39. **Butcher E.A., Ma H., Bueler E., Averina V., Szabo Z.** Stability of linear time-periodic delay-differential equations via Chebyshev polynomials // Int. J. Numer. Meth. Engng. 2004. Vol. 59. No. 7. Pp. 895–922.

40. **Jafari H., Tajadodi H., Baleanu D.** A numerical approach for fractional order Riccati differential equation using B-spline operational matrix // Fract. Calc. Appl. Anal. 2015. Vol. 18. No. 2. Pp. 387–399.

41. **Odibat Z., Momani S.** Modified homotopy perturbation method: application to quadratic Riccati differential equation of fractional order // Chaos Solitons Fract. 2008. Vol. 36. No. 1. Pp. 167–174.

Статья поступила в редакцию 05.03.2017, принята к публикации 20.07.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАРАНД Курош – *сотрудник факультета компьютерных наук и факультета когнитивного моделирования Института когнитивных наук и наук о мозге Университета имени Шахида Бехешти, г. Тегеран, Иран.*

Tehran Province, Tehran, District 1, Daneshjou Boulevard, 1983969411, Iran
k_parand@sbu.ac.ir

ДЕЛХОШ Мехди – *сотрудник факультета компьютерных наук Университета имени Шахида Бехешти, г. Тегеран, Иран.*

Tehran Province, Tehran, District 1, Daneshjou Boulevard, 1983969411, Iran
k_parand@sbu.ac.ir

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

DOI: 10.18721/JPM.10311
УДК: 539.3:534.1

ОСОБЕННОСТИ РАСЩЕПЛЕНИЯ ЧАСТОТНОГО СПЕКТРА ВОЛНОВОГО ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ГИРОСКОПА НА ПРИМЕРЕ ИЗОЛИРОВАННОГО НЕСОВЕРШЕННОГО КОЛЬЦА

С.В. Серёгин

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

На примере более простой расчетной модели кольцевого резонатора волнового твердотельного гироскопа представлены результаты расчета динамических характеристик геометрически несовершенного кольца, деформирующегося в своей плоскости. Показано, что определенные несовершенства формы приводят к расщеплению изгибного частотного спектра таких колец, при этом расстройка спектра частот может возникать в случаях, отличных от представлений современной теории.

Ключевые слова: кольцо; резонатор; волновой твердотельный гироскоп; изгибный частотный спектр; радиальные колебания

Ссылка при цитировании: Серёгин С.В. Особенности расщепления частотного спектра волнового твердотельного гироскопа на примере изолированного несовершенного кольца // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 116–122. DOI: 10.18721/JPM.10311

THE SPLITTING FEATURES OF A FREQUENCY SPECTRUM OF A GYROSCOPE BASED ON ELASTIC WAVES IN SOLIDS: AN ISOLATED IMPERFECT RING AS AN EXAMPLE

S.V. Seregin

Komsomolsk-na-Amure State Technical University, Komsomolsk-on-Amur, Russian Federation

The calculation results on dynamic characteristics of a geometrically imperfect ring turning out of shape in its plane have been exemplified by a simpler computational model for a ring resonator of a gyroscope based on elastic waves in solids. The specific malconformations were shown to be responsible for a splitting of the flexural frequency spectrum of such rings. In so doing the spectral mismatch may appear in cases different from the ideas of modern theory. The splitting of the flexural frequency spectrum was established to occur not only in the cases when the number of formative waves being equal to that of malconformation waves of the ring (as it is commonly believed at present) but in the cases when the number of formative waves being two, three, four and so on times more than that of malconformation waves.

Key words: ring; resonator; wave solid-state gyroscope; bending frequency spectrum; radial oscillation

Citation: S.V. Seregin, The splitting features of a frequency spectrum of a gyroscope based on elastic

waves in solids: an isolated imperfect ring as an example, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 116–122. DOI: 10.18721/JPM.10311

Введение

В настоящее время одним из приоритетных направлений развития космической техники, систем глобальной спутниковой навигации GPS и GLONASS является усовершенствование существующих и создание новых систем навигации и управления движением объектов [1 – 4]. Важный для практики интерес представляют волновые твердотельные гироскопы (ВТГ), на основе которых строятся инерциальные приборы. Чувствительным элементом ВТГ служит тонкий упругий осесимметричный кольцевой резонатор, совершающий изгибные колебания по основной форме [4 – 7]. Погрешность таких приборов обусловлена несовершенством технологии их промышленного изготовления [8 – 15]. К недостаткам этих устройств относятся расщепление частот изгибных колебаний, нежелательные специфические особенности при колебаниях колец [12 – 14], биения и дрейф волновой картины динамических деформаций резонатора [15].

В научной литературе встречаются работы, посвященные изучению динамического поведения тонких колец. Однако результаты этих исследований на сегодняшний день не всегда согласуются с экспериментальными данными.

Так например, в работах [16 – 19] показано, что расщепление изгибного частотного спектра оболочек и колец имеет место только в том случае, когда число волн окружных динамических деформаций равно числу волн несовершенств формы оболочки (кольца), которые совпадают с формой ожидаемого динамического прогиба или повторяют ее.

Однако в работах [20, 21] данный вывод поставлен под сомнение, где в качестве примера рассмотрена более простая (предельная) задача колебаний бесконечно длинной круговой цилиндрической оболочки – кольца, находящегося в условиях плоской деформации. В этих работах показано, что расщепление изгибного частотного спектра происходит не только в случае, когда число волн окружных динамических деформаций равно числу волн несовершенств формы кольца (как это принято считать в настоящее время), но и когда число формообразующих волн вдвое меньше числа волн несовершенств формы.

Настоящая работа посвящена численному исследованию расщепляемых зон изгибного частотного спектра геометрически несовершенного изолированного кольца. Результаты и выводы работ [20, 21] уточнены и дополнены новыми сведениями.

Динамические характеристики несовершенных колец

В программном комплексе MSC “Nastran” смоделирована и решена задача колебаний изолированного кольца со следующими параметрами:

ширина $a = 0{,}005$ м;
толщина $h = 0{,}005$ м;
радиус $R = 1$ м ($R/h = 200$);
модуль Юнга $E = 2 \cdot 10^{11}$ Па;
массовая плотность $\rho = 7800$ кг/м^3;
коэффициент Пуассона $\mu = 0{,}3$.

При моделировании кольца использованы одномерные конечные элементы (КЭ), работающие на растяжение, сжатие, кручение, поперечный сдвиг и изгиб. Количество конечных элементов было подобрано таким образом, чтобы обеспечить высокую точность расчета. Такой точности соответствует сетка с 1257 конечными элементами (табл. 1).

Точность аналитических решений [13, 17] ограничена теми же пределами, что и точность исходных уравнений теории пологих оболочек, которые приводят к удовлетворительным результатам при $n^2 >> 1$ (это условие практически всегда выполняется для оболочек конечной длины).

Для более точной оценки низшей частоты спектра необходимо использовать другие теории и методы их решения [1, 4, 12 и др.].

Оценка сходимости расчетов оценивалась по основной частоте спектра колеба-

Таблица 1

Сравнение расчетных данных для частот, полученных методом конечных элементов, с результатами аналитического решения

Количество окружных волн n	Собственная частота колебаний идеального кольца f_n, Гц					
	Результат расчета МКЭ					Аналитическое решение [13,17]
	0,05*) 126	0,03 209	0,02 314	0,01 628	0,005 1257	
2	3,123	3,122	3,121	3,121	3,121	3,871
3	8,832	8,829	8,829	8,828	8,828	9,623
4	16,935	16,93	16,928	16,927	16,927	17,31
5	27,387	27,378	27,375	27,373	27,373	27,72
6	40,177	40,162	40,158	40,154	40,154	40,64
7	55,292	55,275	55,27	55,265	55,265	55,81
8	72,738	72,716	72,708	72,702	72,702	73,42

*) Верхнее число относится к размеру конечного элемента, нижнее – к их количеству.

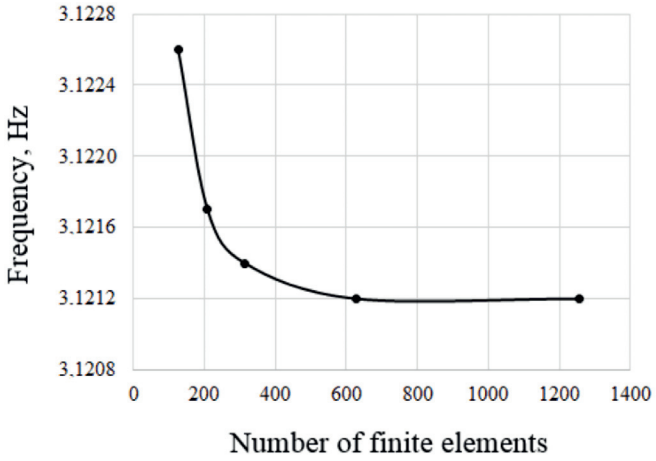


Рис. 1. Оценка сходимости расчетов собственной частоты колебаний идеального кольца методом конечных элементов для значения $n = 2$ (основная частота спектра, см. табл. 1)

ний идеального кольца. Результаты этой оценки представлены на рис. 1.

Как и в работах [16 – 21], будем рассматривать кольцо, совершающее малые изгибные колебания в своей плоскости и имеющее начальные отклонения $w_0(y)$ от идеальной круговой формы, изменяющиеся по закону:

$$w_0(y) = ha_0 \sin(\beta_0 y + \varphi_0), \qquad (1)$$

где a_0 – безразмерная амплитуда, y – круговая координата, φ_0 – начальный угол, $\beta_0 = n_0/R$ (n_0 – число волн окружных несовершенств формы, R – радиус кольца) (рис. 2).

Пусть кольцо имеет по окружности восемь волн начальных несовершенств, $n_0 = 8$. В табл. 2 представлены значения расщепленных собственных частот колебаний несовершенного кольца при различных значениях n – числа окружных волн динамических деформаций.

Анализ данных табл. 2 приводит к заключению, что расщепление изгибного частотного спектра происходит не только в случаях, когда число волн окружных

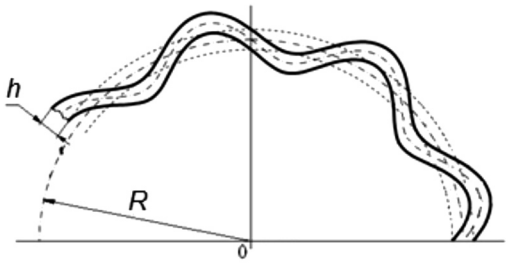


Рис. 2. Схематическое изображение рассматриваемых несовершенств кольца (h, R – соответственно толщина и радиус изолированного кольца)

динамических деформаций равно числу волн несовершенств формы кольца, т. е. когда $n = n_0$ (в рассматриваемом примере $n = n_0 = 8$), как это принято считать на основе данных работ [16 – 19], но и в том случае, когда число формообразующих волн вдвое меньше числа волн несовершенств формы $n = n_0/2 = 4$, что подтверждает выводы работ [20, 21]. При этом во втором случае расстройка частотного спектра составляет 0,59%, что практически на сорок процентов больше, чем в известном случае $n = n_0$, где расщепление спектра частот составляет 0,41 %.

Стоит отметить, что в работе [22] исследовалось динамическое поведение изолированного кольца переменной толщины, смоделированного трехмерными конечными элементами. Результаты этой работы аналогичны результатам работ [20, 21], полученным для кольца с отклонениями от идеальной круговой формы вида (1).

Из полученных данных (см. табл. 2), видно, что расщепление изгибного частотного спектра имеет место и на частотах высших осцилляций, однако расстройка спектра в этих местах менее существенна, чем в случаях $n = n_0$ и $n = n_0/2$. Так, в зоне

Таблица 2

Результаты расчета расщепленных собственных частот колебаний несовершенного кольца при $n_0 = 8$

Число волн n	Расщепленные частоты колебаний несовершенного кольца, Гц		Расстройка, Гц	Величина расщепления, %
	f_{n1}	f_{n2}		
2	3,13	3,13	0	0
3	8,84	8,84	0	0
4	**16,90**	**17,00**	**0,10**	**0,59**
5	27,41	27,41	0	0
6	40,2	40,2	0	0
7	55,3	55,3	0	0
8	**72,5**	**72,8**	**0,30**	**0,41**
9	92,5	92,5	0	0
10	114,7	114,7	0	0
11	139,1	139,1	0	0
12	**165,7**	**165,9**	**0,20**	**0,12**
13	194,9	194,9	0	0
14	226,3	226,3	0	0
15	259,9	259,9	0	0
16	**295,1**	**296,1**	**1,0**	**0,34**
17	334,2	334,2	0	0

Примечание. Жирным шрифтом выделены расчетные данные для случаев, когда расстройка и величина расщепления отличны от нуля.

при $n = n_0 + n_0/2 = 12$ расщепление Δ изгибного частотного спектра составляет порядка 0,12 %. При $n = 2n_0 = 16$ значение Δ есть 0,34 % и т. д. по выявленной закономерности.

Дополнительное исследование показывает, что если кольцо по окружности имеет нечетное количество волн несовершенств формы, то расщепление частотного спектра имеет место только в случаях $n = n_0$, $n = 2n_0$, $n = 3n_0$, $n = 4n_0$ и так далее.

Заключение

Проведенное исследование показало, что расщепление изгибного частотного спектра геометрически несовершенных колец имеет место не только в случае, когда число волн окружных динамических деформаций равно числу волн несовершенств формы кольца $n = n_0$, как это принято считать в настоящее время [16 – 19], но и в том числе в случаях, когда число формообразующих волн в два, три, четыре и так далее раза больше волн несовершенств формы ($n = 2n_0$, $3n_0$, $4n_0$, ...). Если число волн несовершенств кольца четное, то расщепление изгибного частотного спектра имеет место в том числе и в случае, когда число формообразующих волн в два раза меньше волн несовершенств формы ($n_0 = n/2$), а также когда число формообразующих волн в полтора, в два с половиной, в три с половиной и так далее раза больше числа волн несовершенств формы ($n_0 = 1{,}5\ n$, $n_0 = 2{,}5n$, $n_0 = 3{,}5n$, ...).

Описанное в статье поведение несовершенных колец может привести к сложным видам динамических деформаций и специфическим явлениям при изгибных колебаниях. Стоит отметить, что аналогичные эффекты обнаружены и на оболочках конечной длины, см. работы [23].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-31-00045 мол_а)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Басараб М.А., Лунин Б.С., Матвеев В.А., Фомичев А.В., Чуманкин Е.А., Юрин А.В.** Миниатюрные волновые твердотельные гироскопы для малых космических аппаратов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение. 2014. № 4. С. 80–96.

2. **Джанджгава Г.И., Бахонин К.А., Виноградов Г.М., Требухов А.В.** Бесплатформенная инерциальная навигационная система на базе твердотельного волнового гироскопа // Гироскопия и навигация. 2008. № 1. С. 22–33.

3. **Трутнев Г.А.** Модель твердотельного волнового гироскопа в медленных переменных // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2015. Т. 25. № 3. С. 421–429.

4. **Мартыненко Ю.Г., Меркурьев И.В., Подалков В.В.** Динамика кольцевого микромеханического гироскопа в режиме вынужденных колебаний // Гироскопия и навигация. 2009. № 3 (66). С. 10–22.

5. **Ayazi F., Najafi K.** A HARPSS polysilicon vibrating ring gyroscope // IEEE. Journal of Microelectromechanical Systems. 2001. Vol.10. No. 2. Pp.169–179.

6. **Меркурьев И.В., Подалков В.В.** Динамика микромеханического и волнового твердотельного гироскопов. М.: Физматлит, 2009. 228 с.

7. **Лысов А.Н. Виниченко Н.Т., Лысова А.А.** Прикладная теория гироскопов. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2009. 254 с.

8. **Козубняк С.А.** Расщепление собственных частот колебаний цилиндрического резонатора волнового твердотельного гироскопа, вызванное возмущением формы // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение. 2015. № 3. С. 39–49.

9. **Маслов А.А., Маслов Д.А., Меркурьев И.В.** Идентификация параметров волнового твердотельного гироскопа с учетом нелинейности колебаний резонатора // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. 2014. № 5. С. 24–29.

10. **Мартыненко Ю.Г., Меркурьев И.В., Подалков В.В**. Управление нелинейными колебаниями вибрационного кольцевого микрогироскопа // Известия РАН. Механика твердого тела. 2008. № 3. С. 77–89.

11. **Меркурьев И.В., Подалков В.В.** Влияние малой анизотропии материала резонатора на собственные частоты и уходы волнового твердотельного гироскопа // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. 2005. № 10. С. 33–36.

12. **Матвеев В.А., Лунин Б.С., Басараб М.А., Чуманкин Е.А.** Балансировка металлических резонаторов волновых твердотельных гироскопов низкой и средней точности // Наука и образование. Электрон. издание. 2013. № 6. DOI http://dx.doi.org/10.7463/0613.0579179.

13. **Серёгин С.В.** Динамика тонких цилиндрических оболочек с присоединенной массой. Комсомольск-на-Амуре: ФГБОУ ВО «КнАГТУ», 2016. 175 с.

14. **Серёгин С.В.** Качественные эффекты при колебаниях кольцевых подкрепляющих элементов с присоединенной массой как частный случай тонкой, бесконечно длинной круговой цилиндрической оболочки // Известия вузов. Машиностроение. 2017. № 1 (682). С. 31–43.

15. **Журавлев В.Ф.** Дрейф несовершенного ВТГ // Известия РАН. Механика твердого тела. 2004. № 4. С. 19–23.

16. **Leizerovich G.S.** Nonlinear modes of motion of thin circular cylindrical shells // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. 2001. Vol. 42. No. 4. Pp. 701–703.

17. **Тарануха Н.А., Лейзерович Г.С.** Динамика «неправильных» оболочек. Владивосток: Дальнаука, 2005. 423 с.

18. **Amabili M.** Nonlinear vibrations and stability of shells and plates. New York, USA: Cambridge University Press, 2008.

19. **Кубенко В.Д., Ковальчук П.С., Краснопольская Т.С.** Нелинейное взаимодействие форм изгибных колебаний цилиндрических оболочек. Киев: Наукова думка, 1984. 220 с.

20. **Лейзерович Г.С., Приходько Н.Б. Серёгин С.В.** О влиянии малой присоединенной массы на расщепление частотного спектра кругового кольца с начальными неправильностями // Строительная механика и расчет сооружений. 2013. № 6. С. 49–51.

21. **Серёгин С.В. Лейзерович Г.С.** Свободные колебания бесконечно длинной круговой цилиндрической оболочки с начальными неправильностями и малой присоединенной массой // Ученые записки Комсомольского-на-Амуре государственного технического университета. 2014. Т. 1. № 4 (20). С. 36–43.

22. **Лейзерович Г.С., Приходько Н.Б., Серёгин С.В.** О влиянии малой присоединенной массы на колебания разнотолщинного кругового кольца // Строительство и реконструкция. 2013. № 4. С. 38–41.

23. **Серёгин С.В.** Влияние асимметричных начальных несовершенств формы на свободные колебания тонких оболочек // Вестник Самарского университета. Аэрокосмическая техника, технологии и машиностроение. 2016. Т. 15. № 3. С. 209–222.

Статья поступила в редакцию 03.05.2017, принята к публикации 23.06.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

СЕРЁГИН Сергей Валерьевич – *кандидат технических наук, старший научный сотрудник ФГБОУ высшего образования «Комсомольский-на-Амуре государственный технический университет», г. Комсомольск-на-Амуре, Российская Федерация.*

681013, Российская Федерация, Хабаровский край, г. Комсомольск-на-Амуре, пр. Ленина, 27

Seregin-komshome@yandex.ru

REFERENCES

[1] **M.A. Basarab, B.S. Lunin, V.A. Matveyev, et al.,** Miniatyurnyye volnovyye tverdotelnyye giroskopy dlya malykh kosmicheskikh apparatov [Miniature gyroscopes based on elastic waves in solids for small space vehicles], Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Priborostroyeniye. (4) (2014) 80–96.

[2] **G.I. Dzhandzhgava, K.A. Bakhonin, G.M. Vinogradov, A.V. Trebukhov,** Besplatformennaya inertsialnaya navigatsionnaya sistema na baze tverdotelnogo volnovogo giroskopa [A strapdown inertial navigation system on a basis of a gyroscope based on elastic waves in solids], Giroskopiya i navigatsiya. (1) (2008) 22–33.

[3] **G.A. Trutnev,** Model tverdotelnogo volnovogo giroskopa v medlennykh peremennykh [A slow-variable model of a gyroscope based on elastic waves in solids], Vestnik Udmurtskogo Universiteta, Matematika, Mekhanika, Kompyuternyye Nauki. 25 (3) (2015) 421–429.

[4] **Martynenko Yu.G., Merkuryev I.V., Podalkov V.V.** Dinamika koltsevogo mikromekhanicheskogo giroskopa v rezhime vynuzhdennykh kolebaniy [Dynamics of a ring micromechanical gyroscope in the forced oscillation regime], Giroskopiya i navigatsiya. No. 3 (66) (2009) 10–22.

[5] **F. Ayazi, K. Najafi,** A HARPSS polysilicon vibrating ring gyroscope, IEEE, Journal of Microelectromechanical Systems. 10 (2) (2001) 169–179.

[6] **I.V. Merkuryev, V.V. Podalkov,** Dinamika mikromekhanicheskogo i volnovogo tverdotelnogo giroskopov [Dynamics of a micromechanical and a wave solid-state gyroscopes], Moscow, Fizmatlit, 2009.

[7] **A.N. Lysov, N.T. Vinichenko, A.A. Lysova,** Prikladnaya teoriya giroskopov: uchebnoye posobiye [Applied theory of gyroscopes], Chelyabinsk, Izdatelskiy tsentr YuUrGU, 2009.

[8] **S.A. Kozubnyak,** Rasshchepleniye sobstvennykh chastot kolebaniy tsilindricheskogo rezonatora volnovogo tverdotelnogo giroskopa, vyzvannoye vozmushcheniyem formy [The splitting

of natural vibration frequencies of a cylindrical resonator of a wave solid-state gyroscope, caused by a perturbation of the shape], Vestnik MGTU im. N.E. Baumana, Ser. Priborostroyeniye. (3) (2015) 39–49.

[9] **A.A. Maslov, D.A. Maslov, I.V. Merkuryev,** Identifikatsiya parametrov volnovogo tverdotelnogo giroskopa s uchetom nelineynosti kolebaniy rezonatora [Identification of the parameters of a wave solid-state gyroscope with regard to the nonlinearity of cavity oscillations], Pribory i Sistemy. Upravleniye, Kontrol, Diagnostika. (5) (2014) 24–29.

[10] **Yu.G. Martynenko, I.V. Merkuryev, V.V. Podalkov,** Upravleniye nelineynymi kolebaniyami vibratsionnogo koltsevogo mikrogiroskopa [The control of nonlinear vibrations of a vibratory ring microgyroscope], Izv. RAN. MTT. (3) (2008) 77–89.

[11] **I.V. Merkuryev, V.V. Podalkov,** Vliyaniye maloy anizotropii materiala rezonatora na sobstvennyye chastoty i ukhody volnovogo tverdotelnogo giroskopa [The effect of the resonator material's small anisotropy on natural frequencies and drift rates of a wave solid-state gyroscope], Pribory i Sistemy. Upravleniye, Kontrol, Diagnostika. (10) (2005) 33–36.

[12] **V.A. Matveyev, B.S. Lunin, M.A. Basarab, E.A. Chumankin,** Balansirovka metallicheskikh rezonatorov volnovykh tverdotelnykh giroskopov nizkoy i sredney tochnosti [Balancing the metal resonators of wave solid-state gyroscopes of low and medium accuracy]. Nauka i Obrazovaniye. Elektron. izdaniye. (6) (2013). http://dx.doi.org/10.7463/0613.0579179

[13] **S.V. Seregin,** Dinamika tonkikh tsilindricheskikh obolochek s prisoyedinennoy massoy [The dynamics of thin cylindrical shells with an attached mass], Komsomolsk-na-Amure: FGBOU VO «KnAGTU», 2016.

[14] **S.V. Seregin,** Kachestvennyye effekty pri kolebaniyakh koltsevykh podkreplyayushchikh elementov s prisoyedinennoy massoy, kak chastnyy sluchay tonkoy beskonechno dlinnoy krugovoy tsilindricheskoy obolochki [Qualitative effects of vibrations of reinforcing ring elements with attached mass as a special case of an infinitely long thin circular cylindrical shell], Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy, Mashinostroyeniye. 2017. No. 1 (682) (2017) 31–43.

[15] **V.F. Zhuravlev,** Dreyf nesovershennogo VTG [The drift of an imperfect VTG], Izv. RAN. MTT. (4) (2004) 19–23.

[16] **G.S. Leizerovich,** Nonlinear modes of motion of thin circular cylindrical shells , Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. 2001. 42 (4) (2001) 701–703.

[17] **N.A. Taranukha, G.S. Leyzerovich,** Dinamika "nepravilnykh" obolochek [Dynamics of "irregular" shells], Vladivostok, Dalnauka, 2005.

[18] **M. Amabili,** Nonlinear vibrations and stability of shells and plates, New York, USA Cambridge University Press, 2008.

[19] **V.D. Kubenko, P.S. Kovalchuk, T.S. Krasnopolskaya,** Nelineynoye vzaimodeystviye form izgibnykh kolebaniy tsilindricheskikh obolochek [Nonlinear interaction of the flexural vibration forms of cylindrical shells], Kiev, Naukova dumka, 1984.

[20] **G.S. Leyzerovich, N.B. Prikhodko, S.V. Seregin,** O vliyanii maloy prisoyedinennoy massy na rasshchepleniye chastotnogo spektra krugovogo koltsa s nachalnymi nepravilnostyami [On the influence of a small added mass on the splitting of the frequency spectrum of a circular ring with initial irregularities], Stroitelnaya Mekhanika i Raschet Sooruzheniy. (6) (2013) 49–51.

[21] **S.V. Seryogin, G.S. Leyzerovich,** Svobodnyye kolebaniya beskonechno dlinnoy krugovoy tsilindricheskoy obolochki s nachal'nymi nepravil'nostyami i maloy prisoyedinennoy massoy [Free vibrations of an infinitely long circular cylindrical shell with initial irregularities and a small attached mass], Uchenyye Zapiski Komsomol'skogo-na-Amure Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta. 1 (4 (20)) (2014) 36–43.

[22] **G.S. Leyzerovich, N.B. Prikhod'ko, S.V. Seregin,** O vliyanii maloy prisoyedinennoy massy na kolebaniya raznotolshchinnogo krugovogo kol'tsa [On the influence of a small attached mass on the oscillations of a multilayer circular ring], Stroitel'stvo i Rekonstruktsiya. (4) (2013) 38–41.

[23] **S.V. Seryogin,** Vliyaniye asimmetrichnykh nachal'nykh nesovershenstv formy na svobodnyye kolebaniya tonkikh obolochek [Influence of asymmetric initial shape imperfections on free vibrations of thin shells], Vestnik Samarskogo Universiteta, Aerokosmicheskaya Tekhnika, Tekhnologii i Mashinostroyeniye, 2016. 15 (3) (2016) 209–222.

Received 03.05.2017, accepted 23.06.2017.

THE AUTHOR

SEREGIN Sergey V.
Komsomolsk-na-Amure State Technical University
27 Lenin Ave., Komsomolsk-on-Amur, Khabarovsk Krai, 681013, Russian Federation
Seregin-komshome@yandex.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

DOI: 10.18721/JPM.10312
УДК 519.6:533.6.011

ТЕСТИРОВАНИЕ РАЗЛИЧНЫХ СХЕМ С КВАЗИОДНОМЕРНОЙ РЕКОНСТРУКЦИЕЙ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПЕРЕМЕННЫХ ПРИ РАСЧЕТАХ НА НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ

Е.В. Колесник, Е.М. Смирнов

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

Изложен ряд схем второго порядка аппроксимации, разработанных для расчета газодинамических течений на неструктурированных сетках. Конвективные потоки на гранях контрольных объемов вычислены по схеме Роу. Для повышения порядка точности использован MUSCL-подход с применением различных квазиодномерных схем реконструкции газодинамических переменных и ограничителей, которые делают решение монотонным. Сопоставительный анализ работоспособности рассмотренных схем проведен на двух задачах о течении невязкого газа, а именно трансзвукового обтекания крылового профиля NACA-0012 и сверхзвукового течения в канале с центральным клином. Выполнена оценка гладкости решений, полученных по разным схемам, диссипативность схем и устойчивость процесса вычислений.

Ключевые слова: сжимаемое течение; численное моделирование; MUSCL-подход; неструктурированная сетка; квазиодномерная реконструкция

Ссылка при цитировании: Колесник Е.В., Смирнов Е. М. Тестирование различных схем с квазиодномерной реконструкцией газодинамических переменных при расчетах на неструктурированных сетках // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 123–139. DOI: 10.18721/JPM.10312

TESTING OF VARIOUS SCHEMES WITH QUASI-ONE-DIMENSIONAL RECONSTRUCTION OF GASDYNAMIC VARIABLES IN THE CASE OF UNSTRUCTURED-GRID CALCULATIONS

E.V. Kolesnik, E.M. Smirnov

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

Several schemes of the second-order approximation worked out in the literature for unstructured-grid-based computations of gasdynamic flows are described. The convective fluxes on the control-volume's faces are evaluated using the Roe's approximate Riemann solver. The MUSCL approach with the use of various quasi-one-dimensional schemes of reconstruction of gasdynamic variables and limiters making the solution monotonic is applied in order to improve the approximation accuracy. Comparative analysis of the working capacity of the schemes under consideration has been carried out through solving two problems of inviscid gas flow. Namely, the transonic NACA-0012 airfoil flow and the superpersonic flow in the duct with the central ramp were computed. The smoothness of solution, obtained with different schemes, dissipativity features of the schemes and computational process stability were evaluated.

Key words: compressible flow; numerical simulation; MUSCL approach; unstructured grid; quasi-one-dimensional reconstruction

Citation: E.V. Kolesnik, E.M. Smirnov, Testing of various schemes with quasi-one-dimensional

reconstruction of gasdynamic variables in the case of unstructured-grid calculations, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 123–139. DOI: 10.18721/JPM.10312

Введение

Сверхзвуковые течения могут содержать газодинамические разрывы, что существенно осложняет их численное моделирование. Привлекательная для практики схема аппроксимации конвективных потоков должна обеспечивать возможность достаточно точного разрешения газодинамических разрывов на небольшом числе внутренних точек при отсутствии осцилляций поля течения в окрестности разрывов. В работе С.К. Годунова [1] была предложена схема с использованием точного решения задачи Римана о распаде разрыва, исходно обладающая указанными свойствами. Эта схема получила широкое распространение и стала основой для развития многих других схем, где применяются различные приближенные методы решения задачи Римана [2]. Среди таких методов особо широко используется схема Роу [3].

Схема Годунова и основанные на ней схемы данного типа, в своем первоначальном варианте, являются методами первого порядка точности. Для уточнения решения как в области разрывов, так и в областях гладкого изменения газодинамических переменных, применяются схемы повышенного порядка точности, разработка которых началась с работ В.П. Колгана [4] и продолжается до настоящего времени. Основываясь на принципе минимальных значений производной, В.П. Колган, чтобы повысить порядок точности, предложил формировать линейное распределение переменных внутри каждой расчетной ячейки (контрольного объема) и использовать полученные значения на грани при решении задачи о распаде разрыва. В развитие этой идеи возник обобщенный подход, согласно которому повышение порядка точности схемы достигается путем замены постоянного распределения газодинамических величин в каждой расчетной ячейке линейным [5, 6] или параболическим [7]. При этом потоки вычисляются с использованием уточненных (реконструированных) значений переменных на гранях ячейки. В литературе данный способ известен как MUSCL-подход (MUSCL – Monotonic Upstream-Centered Scheme). При реализации схем повышенного порядка аппроксимации требуется, однако, решить проблему подавления нефизических осцилляций, возникающих в численном решении (как правило) в окрестности ударных волн. Для этого в процедуру построения кусочно-полиномиальных распределений вводятся специальные функции-ограничители (limiters), которые модифицируют наклоны распределений переменных в ячейках.

Концептуально, большинство методов контроля осцилляций основано на анализе одномерного скалярного уравнения переноса. Для решения этого уравнения разработана надежная теория неосциллирующих схем. В работе [1] впервые было введено понятие монотонных схем, т. е. таких, которые не приводят к возникновению осцилляций в численном решении. При этом было показано, что такие схемы могут быть только первого порядка точности. На практике используется более широкий класс схем, приводящих, как и монотонные схемы, к неосциллирующим решениям.

А. Хартен в работе [8] ввел понятие полной вариации, которое характеризует меру «негладкости» решения, и рассмотрел класс TVD-схем (Total Variation Diminishing), для которых выполняется условие невозрастания полной вариации любого физически допустимого решения. Выполнение этого условия приводит к классу схем, сохраняющих монотонность. Недостаток TVD-схем заключается в том, что применение ограничителей вносит значительную численную вязкость и порядок точности схемы уменьшается до первого на каждом экстремуме решения.

В работе [9] предложены схемы на основе LED-принципа (LED – Local Extremum Diminishing) [10], согласно которому возникший локальный максимум не должен увеличиваться; примером является SLIP-схема, где использование мягкого ограничи-

теля позволяет повысить порядок точности на гладких экстремумах [11]. Существуют схемы повышенного порядка точности, не использующие ограничители, например схемы ENO [12] и WENO [13]. Здесь подавление осцилляций достигается за счет использования «плавающего» шаблона в окрестности рассматриваемой ячейки, и они сохраняют базовый порядок точности на гладких экстремумах решения.

При решении многомерных задач с использованием структурированных (регулярных) сеток, схемы повышенного порядка, разработанные для одномерного случая, можно обобщить путем применения квазиодномерного подхода вдоль каждого координатного направления. Такой подход успешно применяется и получил широкое распространение [14 – 19].

В случае неструктурированных сеток выделяются два основных направления в конструировании схем повышенного порядка точности с применением ограничителей.

Одно из них связано с применением квазиодномерных вычислений при локальном выделении для каждой грани некоего подходящего направления (аналогичного координатному направлению, исходно присутствующему в структурированной сетке). Данный подход называют квазиодномерным (в англоязычной литературе используются термины one-dimensional, face-based, multislope). Его реализация имеет свои особенности в каждом из двух основных подходов к построению контрольных объемов: вокруг узла расчетной сетки (vertex-based arrangement) или же непосредственно формируемых элементами (ячейками) исходной сетки (cell-centered arrangement) [20, 21].

Другое направление охватывает подходы, исходно предназначенные для многомерного случая. В них значение единого для расчетной ячейки скалярного ограничителя вычисляется с использованием информации из всех соседних ячеек (в англоязычной литературе используются термины multidimensional, scalar, monoslope). Вычисленное значение ограничителя применяется при реконструкции переменных для всех граней, в отличие от квазиодномерного подхода, при котором для каждой грани вычисляется индивидуальное значение ограничителя.

В работе А. Джемесона [11], где предлагается SLIP-схема для структурированных сеток, дается и ее обобщение на случай неструктурированных сеток в рамках квазиодномерного подхода. Однако это обобщение ограничено только случаем сеток, состоящих из треугольных элементов, причем лишь в рамках «вершинно-центрированного» подхода (vertex-based). В работе [22] для такого же случая предложено обобщение TVD-схемы и показано, что эффективность работы ограничителя сильно зависит от расчетной сетки, а в некоторых случаях вообще не удается устранить осцилляции.

При использовании квазиодномерного подхода в случае неструктурированных сеток, состоящих из произвольных элементов, для каждой грани восстанавливаются значения переменных в нескольких точках вдоль направления, пересекающего грань контрольного объема. Эти значения используются для вычисления ограничителя для данной грани. Впервые такой подход был предложен в работе [23].

Существуют различные варианты восстановления точек. Наиболее простыми и, благодаря этому, часто используемыми являются способы, предложенные в работах [23, 24]. Некоторые методы требуют более сложных вычислений, например алгоритм, предложенный в работе [25]. В работе [26] предложен метод, позволяющий учесть неравномерность сетки, а в работе [27] алгоритм восстановления точек учитывает скошенность элементов сетки. Во всех этих работах для восстановления точек используется значение градиента, вычисленное в центрах контрольных объемов.

Для некоторых методов не требуется значение градиента при восстановлении точек [28 – 30], однако в этом случае алгоритм реконструкции требует большого объема вычислений, особенно при решении трехмерных задач.

Существуют обобщения ENO- и WENO-схем на случай неструктурированных сеток [31 – 34]. Однако повышенная сложность

алгоритма реконструкции для этих схем приводит при их реализации к сильному росту вычислительных затрат.

Практика последних десятилетий позволяет заключить, что в случае неструктурированных сеток использование схем второго порядка точности, основанных на линейной реконструкции с применением ограничителей, является в большинстве случаев разумным компромиссом. Последний обеспечивает, с одной стороны, умеренную сложность и затратность вычислительного алгоритма, а с другой – достаточное качество численного решения широкого круга газодинамических задач (не включающих, однако, задачи аэроакустики, требующие для своего решения схем более высокого порядка точности [21]). Но даже в случае аппроксимации второго порядка различные подходы к квазиодномерной реконструкции переменных, включающей применение того или иного ограничителя, формируют большое разнообразие численных схем. В связи с этим возникает потребность в проведении сопоставительных тестовых расчетов, направленных на выявление достоинств и недостатков конкретных формулировок.

В настоящей работе представлены результаты расчетов данной направленности с применением различных схем, разработанных для расчетов газодинамических течений на неструктурированных сетках в рамках квазиодномерного подхода к реконструкции переменных. Расчеты выполнены с использованием гидрогазодинамического кода внутреннего пользования. Для вычисления конвективных потоков на гранях контрольных объемов применялась схема Роу.

Численный метод

Общая формулировка метода конечных объемов. Запишем балансовые соотношения для динамики невязкого сжимаемого газа в конечно-объемной формулировке. При этом для поиска стационарных решений будем использовать метод установления по псевдовремени τ:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \tau} d\Omega + \sum_{M} \int_{S_m} \mathbf{F} dS = 0, \qquad (1)$$

где Ω – контрольный объем, M – число граней контрольного объема, S_m – площадь текущей грани, $m = \overline{1, M}$,

$$\mathbf{w} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho H]$$

– вектор консервативных переменных (ρ – плотность; H – энтальпия; u, v, w – компоненты вектора скорости),

$$\mathbf{F} = [\rho V_n, \rho u V_n + p n_x, \rho v V_n + p n_y, \rho w V_n + p n_z, \rho H V_n]$$

– вектор потоков (V_n – нормальная составляющая скорости; p – давление; n_x, n_y, n_z – компоненты нормали к грани).

Схема Роу. Изложение указанной схемы первого порядка точности представим в предположении равномерности расчетной сетки. Величина потока $\mathbf{F}_f$ на грани контрольного объема складывается из основной части ‹**F**› и диссипативной **D**:

$$\mathbf{F}_f = \langle \mathbf{F} \rangle - \mathbf{D}. \qquad (2)$$

Основная часть потоков вычисляется с использованием значений $\mathbf{w}^R$ и $\mathbf{w}^L$ консервативных переменных в центрах ячеек («правой» и «левой»), прилегающих к грани:

$$\langle \mathbf{F} \rangle = \frac{1}{2}(\mathbf{F}(\mathbf{w}^R) + \mathbf{F}(\mathbf{w}^L)). \qquad (3)$$

Диссипация вычисляется по схеме Роу [3]:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}\left|\tilde{A}(\mathbf{w}^R, \mathbf{w}^L)\right|(\mathbf{w}^R - \mathbf{w}^L). \qquad (4)$$

Матрица Якоби $\tilde{\mathrm{A}} = (\partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{w})$ на грани вычисляется по значениям переменных, полученным путем осреднения по Роу значений переменных в центрах прилегающих ячеек:

$$\tilde{\rho} = \sqrt{\rho^R \rho^L}, \qquad (5)$$

$$\tilde{\mathbf{V}} = (\sqrt{\rho^R}\mathbf{V}^R + \sqrt{\rho^L}\mathbf{V}^L) / (\sqrt{\rho^R} + \sqrt{\rho^L}), \qquad (6)$$

$$\tilde{\mathrm{H}} = (\sqrt{\rho^R} H^R + \sqrt{\rho^L} H^L) / (\sqrt{\rho^R} + \sqrt{\rho^L}). \qquad (7)$$

Модуль Якобиана вычисляется как произведение

$$\left|\tilde{\mathrm{A}}\right| = \mathrm{R}\left|\tilde{\Lambda}\right|\mathrm{L},$$

где $\left|\tilde{\Lambda}\right|$ – диагональная матрица, составленная из модулей собственных значений матрицы $\tilde{\mathrm{A}}$; R – матрица, составленная из

правых собственных векторов как столбцов; L – обратная ей матрица.

Для предотвращения возникновения ударных волн разрежения абсолютные значения собственных чисел модифицируются следующим образом [35]:

$$\tilde{\lambda} = \begin{cases} \left|\tilde{\lambda}\right|, & \text{если } \left|\tilde{\lambda}\right| > \varepsilon; \\ \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\left|\tilde{\lambda}\right|^2}{\varepsilon} + \varepsilon\right), & \text{если } \left|\tilde{\lambda}\right| < \varepsilon, \end{cases} \quad (8)$$

где ε – положительный порог, пропорциональный скорости звука.

Реконструкция решения и ограничители. Для повышения порядка точности с использованием MUSCL-подхода, кусочно-постоянное распределение переменных заменяется кусочно-полиномиальным, в частности кусочно-линейным в случае схемы второго порядка точности. Перед вычислением потока на грани проводится процедура реконструкции, которая позволяет вычислить «левые» и «правые» значения консервативных переменных $\mathbf{w}_f^{L/R}$ на грани, в соответствии с распределением переменных в контрольном объеме. Соответственно, потоки на грани вычисляются с использованием этих значений.

Рассмотрим сначала процедуру линейной реконструкции решения для случая структурированных сеток (рис. 1, *a*).

Для TVD-схем [8] значения переменных слева и справа на грани f вычисляются в соответствии с линейной односторонней экстраполяцией [36]:

$$u_f^L = u_i + \frac{1}{2}\psi(r_i)(u_i - u_{i-1}), \quad (9)$$

$$u_f^R = u_{i+1} - \frac{1}{2}\psi\left(\frac{1}{r_{i+1}}\right)(u_{i+2} - u_{i+1}), \quad (10)$$

где u – любая из реконструируемых переменных; $\psi(r)$ – ограничитель, введенный для контроля осцилляций (в случае $\psi = 0$ схема переходит в схему первого порядка точности).

Ограничитель вычисляется как функция отношения двух разностей:

$$r_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{u_i - u_{i-1}}. \quad (11)$$

В работе [37] получены условия, которым должна подчиняться функция ограничителя ψ, с тем чтобы для схемы выполнялось условие невозрастания полной вариации (TVD-условие):

$$\psi(r) = 0 \text{ при } r < 0, \quad (12)$$

$$0 < \left(\frac{\psi(r)}{r}, \psi(r)\right) < 2. \quad (13)$$

В представленных ниже расчетах использовались ограничители minmod, van Leer и van Albada (см. таблицу):

$$\psi_{MM}(r) = \max[0, \min(1, r)], \quad (14)$$

$$\psi_{VL}(r) = \frac{|r| + r}{r + 1}, \quad (15)$$

$$\psi_{VA}(r) = \frac{r^2 + r}{r^2 + 1}. \quad (16)$$

В работе [9] на основе LED-концепции была предложена SLIP-схема, согласно которой значения переменных слева и справа на грани f вычисляются по следующим формулам:

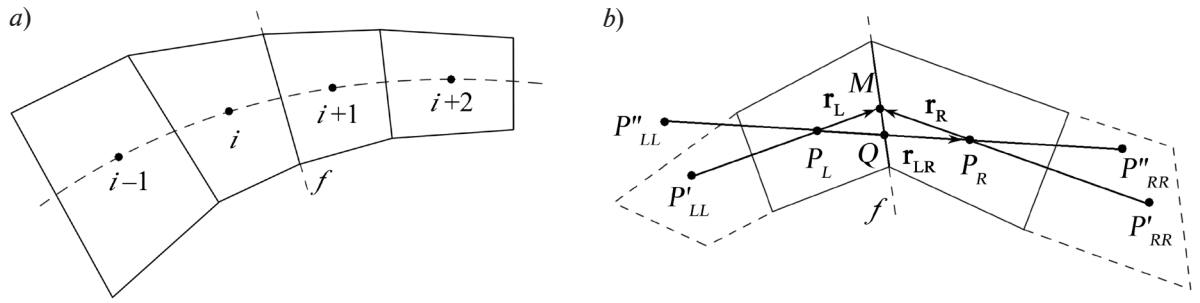


Рис. 1. Реконструкция решения в случаях структурированной (*a*) и неструктурированной (*b*) сеток; f – грань; P, Q, M – обозначения точек; $\mathbf{r}$ – радиус-векторы

$$u_f^L = u_i + \frac{1}{2} D(\Delta_{i-1/2}, \Delta_{i+3/2}) \times \times \left(\frac{\Delta_{i-1/2} + \Delta_{i+3/2}}{2} \right), \quad (17)$$

$$u_f^R = u_{i+1} - \frac{1}{2} D(\Delta_{i-1/2}, \Delta_{i+3/2}) \times \times \left(\frac{\Delta_{i-1/2} + \Delta_{i+3/2}}{2} \right), \quad (18)$$

где $\Delta_{i-1/2} = u_i - u_{i-1}$, $\Delta_{i+3/2} = u_{i+2} - u_{i+1}$.

Функция $D(u, v)$ – это ограничитель, введенный в работе [11]:

$$D(u, v) = 1 - \left| \frac{u - v}{\max(|u| + |v|, \varepsilon \Delta x^r)} \right|^q, \quad (19)$$

где $r = 3/2$, $q \geq 2$; Δx – характерный размер контрольного объема; ε – положительный порог, позволяющий ослабить действие ограничителя на гладких экстремумах.

Отметим, что значения на грани, оцениваемые по формулам (17) и (18), не соответствуют какому-либо полиномиальному распределению переменных в ячейке; в этом состоит отличие SLIP-схемы от MUSCL-подхода.

В случае неструктурированных сеток при использовании квазиодномерного подхода для построения ограничителей требуется восстановить значения переменных в двух виртуальных точках, одна из которых расположена слева, а другая – справа от грани (точки P_{LL} и P_{RR} на рис. 1, *b*): они будут дополнять известные значения в ближайших к грани точках P_L и P_R.

Заметим, что в явном виде значения переменных в виртуальных точках P_{LL} и P_{RR} не нужны, необходимо определить только разности

$$\Delta^- = u^L - u^{LL}, \; \Delta^+ = u^{RR} - u^R,$$

где верхними индексами LL и RR обозначены значения переменной в восстановленных точках P_{LL} и P_{RR}.

Если Δ^- и Δ^+ определены, то при введении разности $\Delta = u^R - u^L$ TVD-схема (см. формулы (20), (21)) и SLIP-схема (см. формулы (22), (23)) записываются в следующем виде:

$$u_f^L = u^L + \frac{1}{2} \psi \left(\frac{\Delta}{\Delta^-} \right) \Delta^-, \quad (20)$$

$$u_f^R = u^R - \frac{1}{2} \psi \left(\frac{\Delta}{\Delta^+} \right) \Delta^+, \quad (21)$$

$$u_f^L = u^L + \frac{1}{2} D(\Delta^+, \Delta^-) \frac{\Delta^+ + \Delta^-}{2}, \quad (22)$$

$$u_f^R = u^R - \frac{1}{2} D(\Delta^+, \Delta^-) \frac{\Delta^+ + \Delta^-}{2}. \quad (23)$$

В представленных ниже расчетах использовались два варианта восстановления точек, которые были предложены в работах [23] и [24] (далее они именуются как мето-

Таблица

Использованные методы и схемы расчета с обозначениями

Наименование	Источник/конкретизация	Формула	Обозначение
Способ восстановления точек	Bruner – Walters [23]	(24), (25)	BW
	Darwish – Moukalled [24]	(26), (27)	DM
	Структурированная сетка		STR
Схема вычисления потока (схема Роу)	Без пересчета	(28), (30)	R1
	С пересчетом	(29), (30)	R2
Ограничитель	Minmod [38]	(14)	MM
	van Leer [39]	(15)	VL
	van Albada [40]	(16)	VA
	Jameson [11]	(19)	J

Примечания. Первые три ограничителя используются при реконструкции переменных по TVD-схеме (см. формулы (9), (10), (20), (21)), ограничитель Jameson используется в сочетании со SLIP-схемой (см. формулы (17), (18), (22), (23)).

ды BW и DM соответственно).

Согласно методу BW,

$$\Delta^- = 2(\nabla u)_L \cdot \mathbf{r}_L, \qquad (24)$$

$$\Delta^+ = -2(\nabla u)_R \cdot \mathbf{r}_R. \qquad (25)$$

Согласно методу DM,

$$\Delta^- = 2(\nabla u)_L \cdot \mathbf{r}_{LR} - \Delta, \qquad (26)$$

$$\Delta^+ = 2(\nabla u)_R \cdot \mathbf{r}_{LR} - \Delta. \qquad (27)$$

В случае метода DM восстановленные значения (точки P''_{LL} и P''_{RR} на рис. 1, *b*) находятся на прямой, соединяющей центры контрольных объемов; реконструированные значения переменных определяются в точке Q на этой прямой.

Для метода **BW** восстановленные значения (точки P'_{LL} и P'_{RR} на рис. 1, *b*) располагаются на прямых, соединяющих центр грани и центры левого и правого контрольных объемов, а реконструированные значения определяются в центре грани – точке M.

Варианты реализации схемы Роу второго порядка точности

Для построения схем второго порядка точности вычисляются реконструированные и ограниченные значения переменных $\mathbf{w}_f^L$ и $\mathbf{w}_f^R$, при этом в случае неравномерных сеток используется описанный выше алгоритм для равномерных сеток, что обычно приемлемо для сеток умеренной неравномерности. Здесь следует отметить, что при восстановлении виртуальных точек по методу **BW** неравномерность сетки учитывается непосредственно.

Возможны два варианта расчета основной части потоков. В первом из них, исходящем из формулировки SLIP-схемы [9], для случая равномерных сеток используется формула (3), а в случае неравномерных сеток она заменяется выражением, определяющим процедуру линейной интерполяции значений в центрах контрольных объемов, прилегающих к грани:

$$\langle \mathbf{F} \rangle = \mathbf{F}(\mathbf{w}^L) + \beta(\mathbf{F}(\mathbf{w}^R) - \mathbf{F}(\mathbf{w}^L)), \qquad (28)$$

где $\beta = \Delta_L/(\Delta_L + \Delta_R)$ ($\Delta_{L/R}$ – расстояние от центра контрольного объема, расположенного слева (L) либо справа (R) от грани до ее центра).

Во втором варианте основная часть потоков вычисляются с использованием реконструированных значений переменных на грани, что является общеупотребительным для TVD-схем [14, 15]:

$$\langle \mathbf{F} \rangle = 0,5(\mathbf{F}(\mathbf{w}_f^L) + \mathbf{F}(\mathbf{w}_f^R)). \qquad (29)$$

Диссипативная часть потока на грани для обоих вариантов расчета основной части вычисляется с использованием реконструированных значений переменных:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}\left|\tilde{\mathrm{A}}(\mathbf{w}_f^R, \mathbf{w}_f^L)\right|(\mathbf{w}_f^R - \mathbf{w}_f^L). \qquad (30)$$

Итак, для проведения представленных ниже тестовых расчетов было реализовано два варианта схемы Роу номинально второго порядка точности: в первом из них, обозначенном как R1 (схема без пересчета), вычисления проведены по формулам (28), (30), во втором варианте (схема с пересчетом), обозначенном как R2, используются формулы (29), (30).

В формулах (17), (18), определяющих варианты процедуры восстановления значений переменных в виртуальных точках, используется значение градиента консервативных переменных в центрах контрольных объемов.

В настоящей работе для расчета градиента произвольной скалярной величины используется формула метода Грина – Гаусса:

$$(\nabla\phi)_C = \frac{1}{V}\sum_f \phi_f \mathbf{S}_f, \qquad (31)$$

где $\mathbf{S}_f$ – вектор площади грани; ϕ_f – значение переменной в центре текущей грани, которое оценивается посредством линейной интерполяции значений из центров контрольных объемов.

Результаты расчетов и их обсуждение

Для тестовых вычислений использовался код SINF [41], исходно оперирующий со структурированными сетками (разработан на кафедре гидроаэродинамики, горения и теплообмена СПбПУ). В рамках этого конечно-объемного кода были реализованы описанные выше методы повы-

шения порядка точности схемы Роу, которые можно непосредственно перенести на случай их использования в коде, оперирующем неструктурированными сетками. Реконструированные значения вычисляются с использованием TVD-схемы (см. формулы (20), (21)) и SLIP-схемы (см. формулы (22), (23)); восстановление точек проводится с помощью методов BW и DM (см. формулы (24), (25) и (26), (27) соответственно).

Расчеты проводились по неявной схеме метода установления (в приращениях) с дискретизацией стабилизирующего оператора по схеме расщепления матрицы коэффициентов первого порядка.

Тестирование рассматриваемых схем проведено на двумерных задачах о течении невязкого газа, а именно – на задаче трансзвукового обтекания крылового профиля NACA-0012 и сверхзвукового течения в канале с центральным клином.

Трансзвуковое обтекание крылового профиля NACA-0012. Рассматривается трансзвуковое невязкое обтекание указанного профиля потоком, с числом Маха на бесконечности $M_\infty = 0{,}8$, под углом атаки $\alpha_\infty = 1{,}25°$. Эта задача широко используется в литературе для оценки работоспособности различных численных схем [11, 42 – 46]. Для указанных условий реализуется течение, при котором на верхней стороне профиля «садится» относительно сильный скачок уплотнения, а на нижней – слабый (см. рис. 2, *a*).

Тестовые расчеты проведены для области, внешней границей которой служила окружность радиуса R; последний в 100 раз превышал линейный масштаб L_s; при этом хорда профиля составляла 1,018 L_s. Эталонное решение было получено по алгоритму, исходно предполагающему структурированность сетки. Конкретнее, использовалась SLIP-схема (17), (18) с параметрами ограничителя Jameson (19), имеющими значения $q = 3$, $\varepsilon = 0$. Сеточная сходимость исследовалась посредством проведения расчетов на трех O-сетках, симметричных относительно хорды профиля; размеры сеток составляли 42 × 161, 84 × 321 и 168 × 641 узлов.

На рис. 2, *a* показано распределение коэффициента давления, полученное на трех сетках, и приведены значения коэффициентов подъемной силы и сопротивления. По мере измельчения сетки коэффициент подъемной силы увеличивается, а коэффициент сопротивления уменьшается. Сетка, содержащая 84 × 321 узлов, обеспечивает решение, практически сошедшееся по сетке, поскольку отличие от данных, полученных на сетке 168 × 641 узлов, составляет всего 1,0 % для коэффициента подъемной силы и 3,8 % для коэффициента сопротивления. Полученные значения C_L и C_D хорошо согласуются с результатами работы [43], где расчеты по CUSP-схеме второго порядка точности на сетке 168 × 641 узлов дали значения $C_L = 0{,}3569$, $C_D = 0{,}02224$, а также с данными других авторов [47]. Поскольку решения на сетках 84 × 321 и 168 × 641 узлов практически не отличаются, решение на сетке 168 × 641 можно считать эталонным. Изолинии числа Маха для эталонного решения показаны на рис. 2, *b*.

Сопоставительные расчеты по различным схемам второго порядка точности проведены на сетке 42 × 161. Выбор такой (достаточно грубой) сетки обусловлен тем, что в этом случае наиболее ярко заметны различия в решениях по разным схемам. Основное внимание было уделено тестированию схем, пригодных для применения на неструктурированных сетках. С целью более полного анализа проводились также расчеты по схемам, исходно предполагающим структурированность сетки и не требующим применения процедуры восстановления значений переменных в точках сеточного шаблона.

Результаты сопоставительных расчетов представлены на рис. 3 и 4, где приведены распределения коэффициента давления и изолинии числа Маха для разных схем. Распределения коэффициента давления были получены в окрестности скачка на верхней стороне профиля (рис. 3, *a*, *c*, *e*) и около передней кромки профиля (рис. 3, *b*, *d*, *f*). Полученные распределения сравнивались с эталонным решением.

Восстановление точек по методу BW приводит к возникновению осцилляций в численном решении около скачка, причем

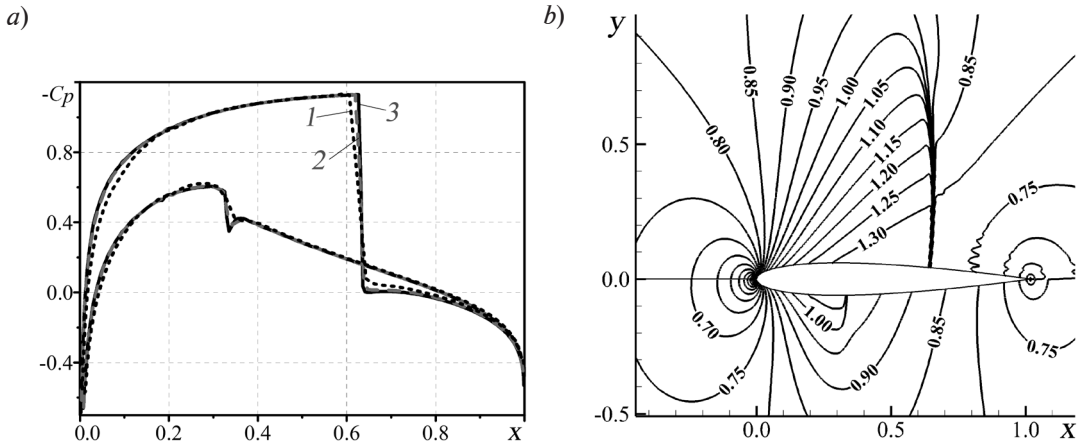


Рис. 2. Распределения коэффициента давления для трех сеток (*a*)
и изолинии числа Маха для эталонного решения (*b*).
Коэффициенты сопротивления и подъемной силы для сетки 42 × 161 узлов были соответственно
$C_D = 0{,}02903$, $C_L = 0{,}3329$ (кривая *1*), для сетки 84 × 321 – $C_D = 0{,}02296$, $C_L = 0{,}3501$ (*2*),
для сетки 168 × 641 – $C_D = 0{,}02212$, $C_L = 0{,}3537$ (*3*)

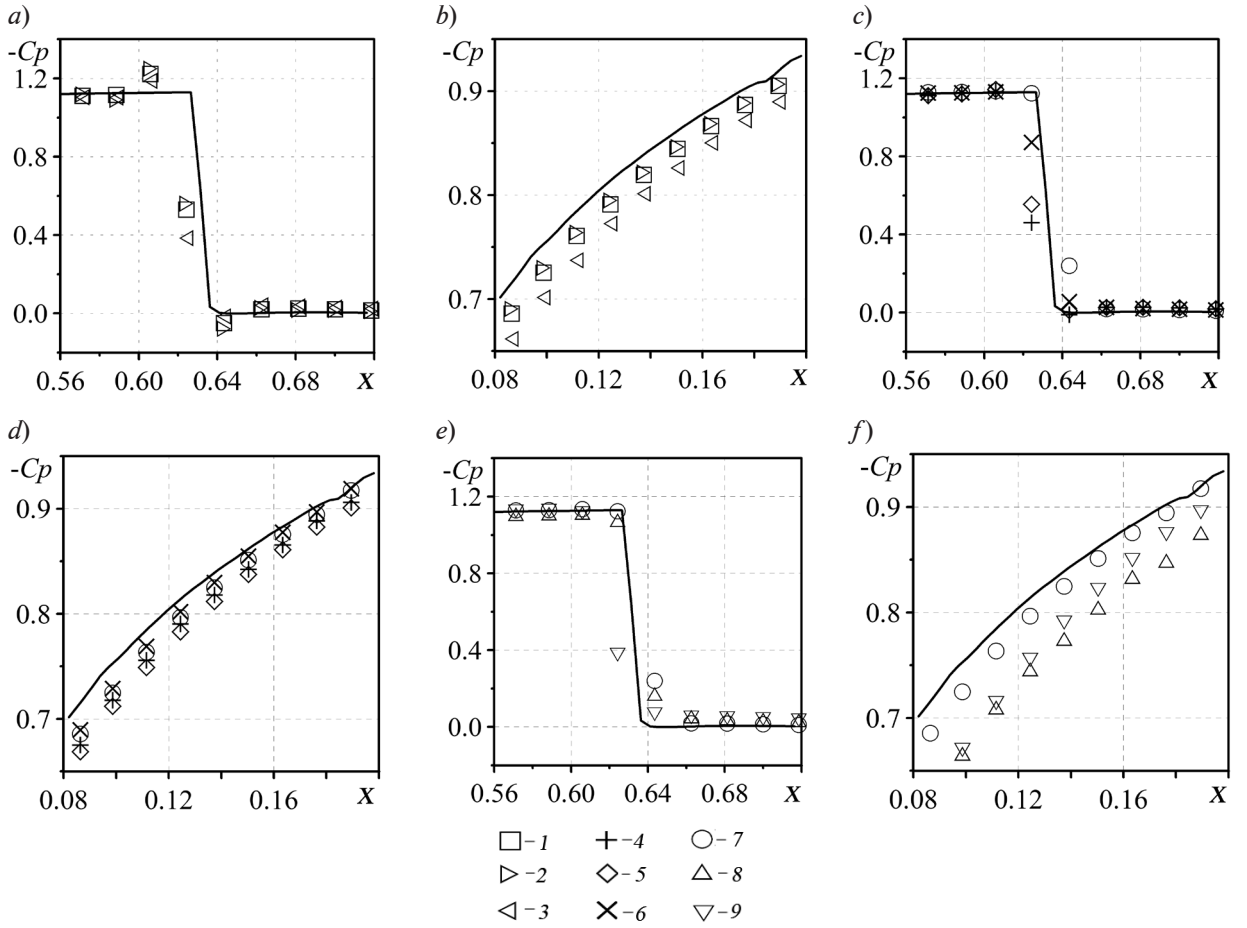


Рис. 3. Распределения коэффициента давления, рассчитанные по схемам
R1/BW/J (*1*), R1/BW/VL (*2*), R1/BW/MM (*3*), R1/STR/VL (*4*), R1/DM/VL (*5*), R2/STR/VL (*6*),
R2/DM/VL (*7*), R2/DM/MM (*8*), R2/DM/J (*9*);
распределения получены в окрестности скачка на верхней стороне профиля (*a*, *c*, *e*)
и около передней кромки профиля (*b*, *d*, *f*)

как при использовании TVD-схем, так и при использовании SLIP-схемы (рис. 3,*a*). Для некоторых вариантов, например R2/BR/VL, R2/BR/VA, возникающие осцилляции оказались настолько сильными, что это привело к неустойчивости схемы и невозможности получить сошедшееся решение.

Расчеты, проведенные по схеме для структурированной сетки и по схеме для неструктурированной сетки, использующей процедуру восстановления точек по методу DM, дали решения, которые практически не отличаются в области скачка; при этом вдали от скачка (около передней кромки) решение на структурированной сетке лежит ближе к эталонному (рис. 3, *d*).

Анализ результатов, полученных по схеме для неструктурированной сетки при разных подходах к расчету основной составляющей потоков показывает, что в случае TVD-схем использование схемы с пересчетом (R2) приводит к более гладкому решению, по сравнению со случаем схемы без пересчета (R1); это отчетливо видно по изолиниям числа Маха (рис. 4). Вместе с тем, осцилляций около скачка не наблюдается в обоих случаях (рис. 3, *c*). Кроме того, применение схемы с пересчетом приводит к менее диссипативной схеме: решение около передней кромки лежит ближе к эталонному, по сравнению со схемой без пересчета. Особым образом ведет себя SLIP-схема: при расчете основной составляющей потоков по схеме с пересчетом она оказывается неустойчивой.

Выбор TVD-ограничителя существенно влияет на диссипативность схемы, в частности, использование ограничителя minmod приводит к более диссипативной схеме, чем ограничителя van Leer. При этом решение около скачка отличается незначительно (рис. 3, *e*). Данные вычислений по SLIP-схеме, с расчетом основной составляющей потоков по схеме без пересчета, позволяют заключить, что SLIP-схема сравнима по диссипативности с TVD-схемой, где применяется схема с пересчетом и ограничитель minmod (рис. 3, *f*).

Сверхзвуковое течение в канале с центральным клином. Рассмотрим вслед за работой [44] двумерное невязкое сверхзвуковое течение в канале с центральным клином, тангенс угла α которого составляет 1/3. В канал входит сверхзвуковой поток с числом Маха $M_{in} = 3{,}0$, на выходе поток является также сверхзвуковым.

Эталонное решение, как и в случае задачи обтекания профиля, было найдено в результате вычислений на структурированных сетках с использованием SLIP-схемы. Для исследования сеточной сходимости ис-

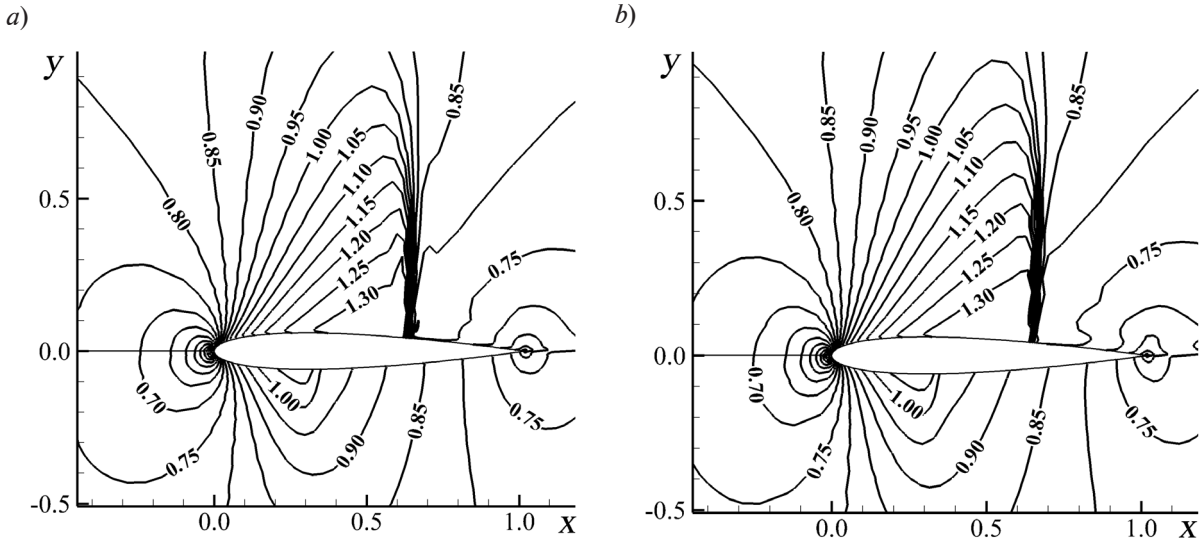


Рис. 4. Изолинии числа Маха рассчитанные по схемам R1/DM/VL (*a*) и R2/DM/VL (*b*) (см. обозначения в таблице)

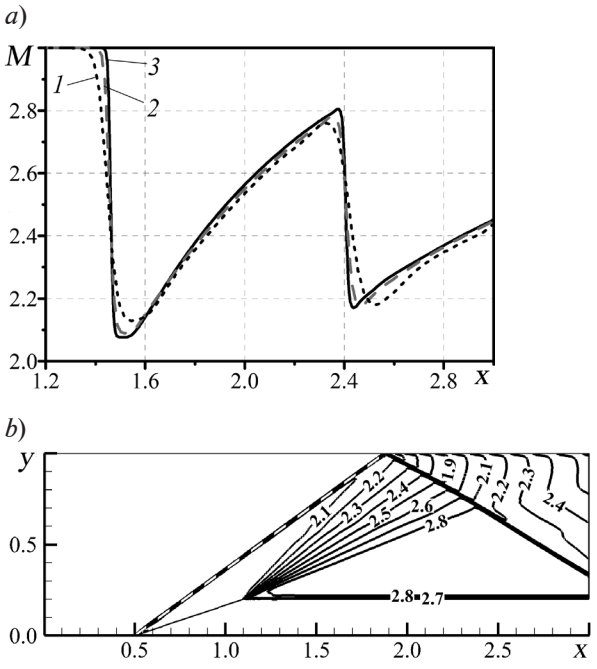


Рис. 5. Изменение числа Маха вдоль линии $y = 0{,}7$ для трех сеток (*a*) и изолинии числа Маха для эталонного решения (*b*)
В расчетах использованы сетки 41×121 узлов (*1*), 81×239 (*2*) и 161×477 (*3*)

пользовали три сетки: 41 × 121, 81 × 239 и 161 × 477 узлов.

На рис. 5,*a* для трех сеток приведены распределения числа Маха вдоль линии $y = 0{,}7$. Решение, полученное на сетке 81 × 239 узлов, практически не отличается от такового на сетке 161 × 477 узлов; это позволяет считать второе из этих решений эталонным.

Изолинии числа Маха для эталонного решения представлены на рис. 5, *b*, где также нанесена штриховая линия, определяющая положение косого скачка, согласно хорошо известному аналитическому решению.

Сопоставительные расчеты по различным схемам проводились с использованием сетки 41 × 121 узлов. Их результаты приведены на рис. 6 и 7, где для разных вычислительных схем представлены распределения числа Маха вдоль линии $y = 0{,}7$ и изолинии числа Маха в расчетной области.

Как и для задачи обтекания профиля NACA-0012, при расчете течения в канале с клином восстановление точек по методу BW приводит к возникновению осцилляций в численном решении около скачка. Однако, в отличие от предыдущей задачи, сошедшееся решение удалось получить в том числе и для схем R2/BR/VL, R2/BR/VA.

Расчеты, проведенные по схеме для неструктурированной сетки, приводят к решению, хорошо совпадающему с таковым по схеме для структурированной, если в первом случае используется процедура восстановления точек по методу DM (на рисунках результаты не приведены).

Аналогично задаче обтекания профиля, в случае TVD-формулировок использова-

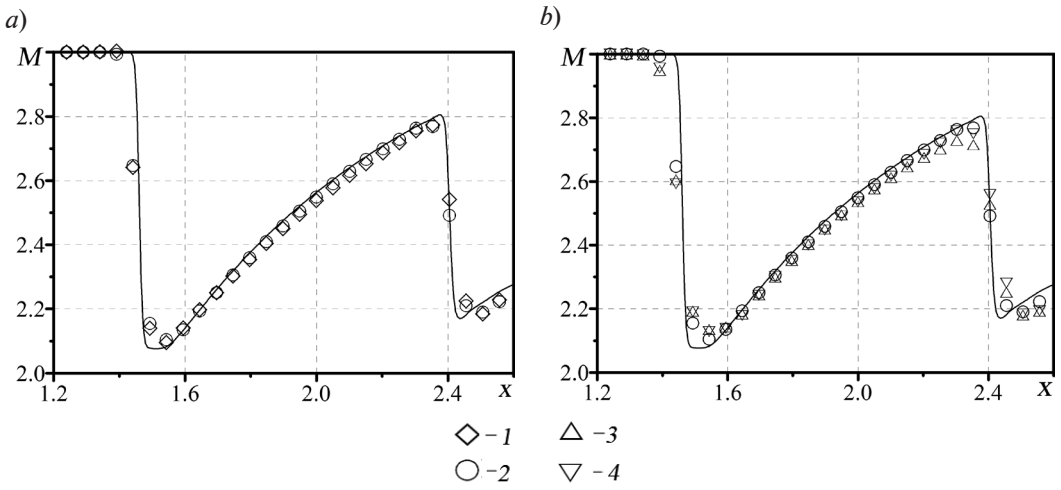


Рис. 6. Распределения числа Маха вдоль линии $y = 0{,}7$, рассчитанные по схемам R1/DM/VL (*1*), R2/DM/VL (*2*), R2/DM/MM (*3*), R2/DM/J (*4*)

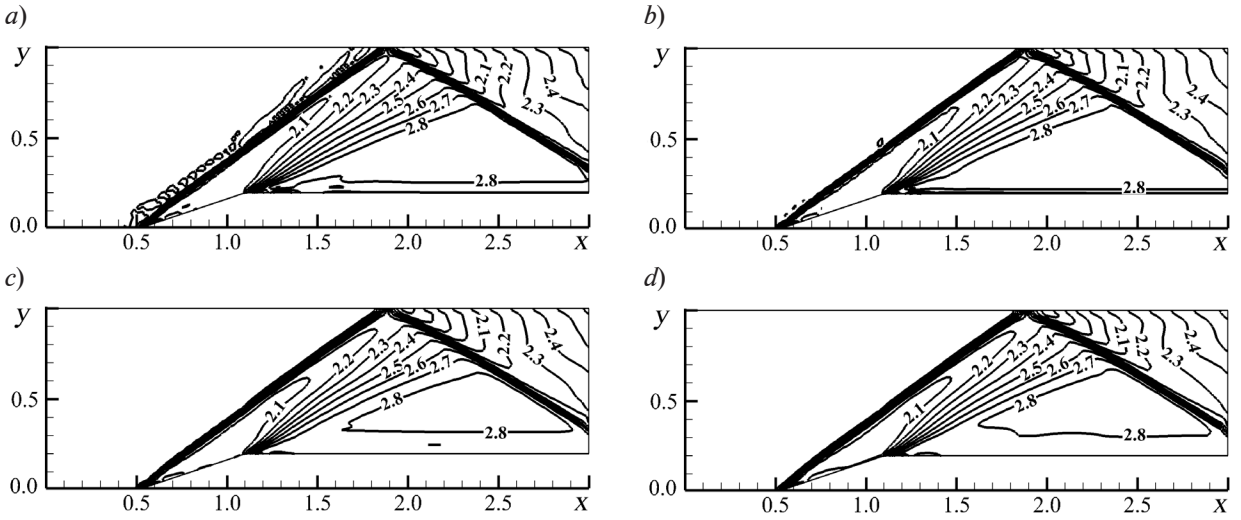


Рис. 7. Поля чисел Маха, рассчитанные с использованием разных схем: R1/DM/VL (*a*), R2/DM/VL (*b*), R2/DM/MM (*c*) и R1/DM/J (*d*)

ние схемы с пересчетом приводит к более гладкому решению, чем применение таковой без пересчета (см. рис. 7, *a*, *b*), и, кроме того, приводит к менее диссипативной схеме: решение вдали от скачка лежит ближе к эталонному. Как и ранее, SLIP-схема при расчете основной составляющей потоков по схеме с пересчетом оказалась неустойчивой.

Ограничитель minmod более диссипативен, по сравнению с ограничителем van Leer. Это проявляется как в области гладкого решения (см. рис. 7, *b*, *c*), так и около скачков (см. рис. 6, *b*). Такое заключение не противоречит представленным в литературе расчетным данным (см., например, работу [27]). Результаты наших расчетов с использованием ограничителя van Albada показали, что по диссипативным свойствам он находится между ограничителями minmod и van Leer (результаты не приводятся).

Заключение

Выполнена обширная серия тестовых расчетов с применением различных схем повышенного (второго) порядка точности, разработанных и опубликованных различными исследователями для расчета газодинамических течений на неструктурированных сетках в рамках квазиодномерного подхода к реконструкции переменных на гранях контрольных объемов с применением монотонизирующих ограничителей. Для вычисления потоков на гранях контрольных объемов применялась схема Роу.

Предложенный в работе [23] метод восстановления значений переменных в виртуальных точках, необходимых для реализации схем повышенного порядка (метод BW), приводит к возникновению осцилляций в области скачков уплотнения. В случае «искривленных» сеток данный способ восстановления может приводить к неустойчивости вычислений. Большей устойчивостью обладают вычисления, если для восстановления используется метод DM [24]. В случае «искривленных» сеток указанный метод вносит дополнительную диссипацию.

На гладкость решения существенно влияет способ расчета основной составляющей конвективного потока: для получения более гладкого решения основную составляющую потоков, так же, как и численную диссипацию, необходимо рассчитывать с использованием реконструированных значений (по схеме с пересчетом). Кроме того, такой способ расчета основной составляющей конвективного потока приводит к менее диссипативной схеме. В целом, однако, выбор ограничителя влияет на диссипативность схемы сильнее, чем способ расчета основной части потоков.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Годунов С.К.** Разностный метод численного расчета разрывных решений гидромеханики // Математический сборник. 1959. Т. 47 (89). № 3. С. 271–306.

2. **Toro E.F.** Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. 724 p.

3. **Roe P.L.** Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes // J. Comput. Phys. 1981. Vol. 43. No. 2. Pp. 357–372.

4. **Колган В.П.** Применение принципа минимальных значений производных к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ. 1972. Т. 3. № 6. С. 68–77.

5. **Колган В.П.** Конечно-разностная схема для расчета разрывных решений нестационарной газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ. 1975. Т. 6. № 1. С. 9–14.

6. **Van Leer B.** Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second order sequel to Godunov's method // J. Comput. Phys. 1979. Vol. 32. No. 1. Pp. 101–136.

7. **Colella P., Woodward P.R.** The piecewise parabolic method (PPM) for gasdynamical simulations // J. Comput. Phys. 1984. Vol. 54. No. 1. Pp. 174–201.

8. **Harten A.** High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // J. Comput. Phys. 1983. Vol. 49. No. 3. Pp. 357–393.

9. **Jameson A.** Artificial diffusion, upwind biasing, limiters and their effect on accuracy and multigrid convergence in transonic and hypersonic flows // AIAA Paper. 1993. No. 93-3359.

10. **Boris J., Book D.L.** Flux corrected transport, 1 SHASTA, a fluid transport algorithm that works // J. Comput. Phys. 1973. Vol. 11. No. 1. Pp. 38–69.

11. **Jameson A.** Positive schemes and shock modeling for compressible flow // International Journal for Numerical Methods in Fluids. 1995. Vol. 20. No. 8-9. Pp. 743–776.

12. **Harten A., Engquist B., Osher S, Chakravarthy S.** Uniformly high order essentially nonoscillatory schemes. III // J. Comput.Phys. 1987. Vol. 71. No. 2. Pp. 231–303.

13. **Liu X.-D., Osher S., Chan T.** Weighted essentially nonoscillatory scheme // J. Comput. Phys. 1994. Vol. 115. No. 1. Pp. 202–212.

14. **Yee H.C.** A class of high-resolution explicit and implicit shock-capturing methods //von Karman Institute for Fluid Dynamics. Lecture Series. 1989-04 (NASA TM-101088). 1989 (https://ntrs.nasa.gov/search.jsp?R=19890016281).

15. **Hirsch C.** Numerical computation of internal and external flows. Vol. 2. Computational methods for inviscid and viscous flows. New York: John Wiley & Sons, 1990. 691 p.

16. **Егоров И.В., Иванов Д.В.** Применение полностью неявных монотонных схем для моделирования плоских внутренних течений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1996. Т. 36. № 12. С. 91–107.

17. **Волков К.Н.** Разностные схемы расчета потоков повышенной разрешающей способности и их применение для решения задач газовой динамики // Вычислительные методы и программирование. 2005. Т. 6. № 1. С. 146–167.

18. **Кудрявцев А.Н., Поплавская Т.В., Хотяновский Д.В.** Применение схем высокого порядка точности при моделировании нестационарных сверхзвуковых течений // Математическое моделирование. 2007. Т. 19. № 7. С. 39–55.

19. **Жалнин Р.В., Веселова Е.А., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К., Козелков А.С., Стручков А.В.** Пакет программ ЛОГОС. Методика повышенного порядка точности на блочно-структурированных сетках с использованием реконструкции типа WENO // Современные проблемы науки и образования. 2012. № 6. С. 583–583.

20. **Волков К.Н., Дерюгин Ю.Н., Емельянов В.Н., Козелков А.С., Тетерина И.В.** Разностные схемы в задачах газовой динамики на неструктурированных сетках. М.: Физматлит, 2015. 416 с.

21. **Бахвалов П.А., Козубская Т.К.** Схема с квазиодномерной реконструкцией переменных, определенных в центрах элементов трехмерной неструктурированной сетки // Матем. моделирование. 2016. Т. 28. № 3. С. 79–95

22. **Cabello J., Morgan K., Lohner R.** A comparison of higher order schemes used in a finite volume solver for unstructured grids // AIAA Paper. 1994. No. 94-2293.

23. **Bruner C., Walters R.** Parallelization of the Euler equations on unstructured grids // AIAA Paper. 1997. No. 97-1894.

24. **Darwish M., Moukalled F.** TVD schemes for unstructured grids // Int. J. Heat Mass Transfer. 2003. Vol. 46. No. 4. Pp. 599–611.

25. **Li L.-X., Liao H.-S., Qi L.-J.** An improved *r*-factor algorithm for TVD schemes // Int. J. Heat Mass Transf. 2008. Vol. 51. No. 3-4. Pp. 610–617.

26. **Hou J., Simons F., Hinkelmann R.** Improved total variation diminishing schemes for advection simulation on arbitrary grids // Int. J. Numer. Methods Fluids. 2012. Vol. 70. No. 3. Pp. 359–382.

27. **Denner F., van Wachem G.M.B.** TVD differencing on three-dimensional unstructured meshes with monotonicity-preserving correction of

mesh skewness // J. Comput. Phys. 2015. Vol. 229. Pp. 466–479.

28. **Buffard T., Clain S.** Monoslope and multislope MUSCL methods for unstructured meshes // J. Comput. Phys. 2010. Vol. 229. No. 10. Pp. 3745–3776.

29. **Бахвалов П.А., Козубская Т.К.** Экономичная формулировка схем с квазиодномерной реконструкцией переменных // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2013. № 89. 16 с.

30. **Le Touze C., Murrone A., Guillard H.** Multislope MUSCL method for general unstructured meshes // J. Comput. Phys. 2015. Vol. 284. Pp. 389–418.

31. **Abgrall R.** On essentially nonoscillatory schemes on unstructured meshes: analysis and implementation // J. Comput. Phys. 1994. Vol. 114. No. 1. Pp. 45–58.

32. **Friedrich O.** Weighted essentially non-oscillatory schemes for the interpolation of mean values on unstructured grids // J. Comp. Phys. 1998. Vol. 144. No. 1. Pp. 194–212.

33. **Hu C.Q., Shu C.W.** Weighted essentially nonoscillatory schemes on triangular meshes // J. Comp. Phys. 1999. Vol. 150. No. 1. Pp. 97–127.

34. **Tsoutsanis P., Titarev V.A., Drikakis D.** WENO schemes on arbitrary mixed-element unstructured meshes in three space dimensions // J. Comput. Phys. 2011. Vol. 230. No. 4. Pp. 1585–1601.

35. **Harten A., Hyman J.M.** Self-adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws // J. Comput. Phys. 1983. Vol. 50. No. 2. Pp. 235–269.

36. **Spekreijse S.P.** Multigrid solution of monotone second order discretizations of hypersonic conservations laws // Math. Comput. 1987. Vol. 49. No. 179. Pp. 135–155.

37. **Sweby P.K.** High-resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws // SIAM J. Numer. Anal. 1984. Vol. 21. No. 5. Pp. 995–1011.

38. **Roe P.L.** Characteristic based schemes for the Euler equations // Ann. Rev. Fluid Mech. 1986. Vol. 18. No. 1. Pp. 337–365.

39. **Van Leer B.** Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second order scheme // J. Comput. Phys. 1974. Vol. 14. No. 4. Pp. 361–370.

40. **Van Albada G.D., Van Leer B., Roberts W.W.** A comparative study of computational methods in cosmic gasdynamics // Astron. Astrophysics. 1982. Vol. 108. No. 1. Pp. 76–84.

41. **Смирнов Е.М., Зайцев Д.К.** Метод конечных объемов в приложении к задачам гидрогазодинамики и теплообмена в областях сложной геометрии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2004. № 2 (36). С. 70–81.

42. **Jawahar P., Kamath H.** A high resolution procedure for Euler and Navier – Stokes computations on unstructured grids // J. Comput. Phys. 2000. Vol. 164. No. 1. Pp. 165–203.

43. **Николаев М.А.** Сочетание CUSP схемы с методом масштабирования сжимаемости при расчете трансзвуковых течений в областях сложной геометрии // Труды XIII Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством акад. РАН А.И. Леонтьева. М.: Изд-во МЭИ, 2001. Том 1. С. 108–111.

44. **Michalak K., Ollivier-Gooch C.** Limiters for unstructured higher-order accurate solutions of the Euler equations // Proceedings of the AIAA Forty-Sixth Aerospace Sciences Meeting. 2008.

45. **Michalak K., Ollivier-Gooch C.** Accuracy preserving limiter for the high-order accurate solution of the Euler equations // J. Comput. Phys. 2009. Vol. 228. No. 3. Pp. 8693–8711.

46. **Park J.S., Yoon S.H., Kim C.** Multi-dimensional limiting process for hyperbolic conservation laws on unstructured grids // J. Comput. Phys. 2010. Vol. 229. No. 3. Pp. 788–812.

47. **Swanson R., Radespiel R., Turkel E.** Comparison of several dissipation algorithms for central difference schemes // AIAA Paper 97-1945. 1997. Pp. 580 –598.

Статья поступила в редакцию 16.05.2017, принята к публикации 25.05.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОЛЕСНИК Елизавета Владимировна – *инженер кафедры гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

СМИРНОВ Евгений Михайлович – *доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

REFERENCES

[1] **S.K. Godunov,** Raznostnyy metod chislennogo rascheta razryvnykh resheniy gidromekhaniki [A difference method of numerical calculations of discontinuous solutions in hydromechanics], Math. Sbornik. 47 (3) (1959) 271–306.

[2] **E.F. Toro,** Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics, Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2009.

[3] **P.L. Roe,** Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes, J. Comput. Phys. 43 (2) (1981) 357–372.

[4] **V.P. Kolgan,** Primeneniye printsipa minimalnykh znacheniy proizvodnykh k postroyeniyu konechno-raznostnykh skhem dlya rascheta razryvnykh resheniy gazovoy dinamiki [Application of the principle of minimum values of derivatives to the construction of finite-difference schemes for discontinuous gasdynamic flow computations], Uchenyye Zap. TSAGI. 3 (6) (1972) 68–77.

[5] **V.P. Kolgan,** Konechno-raznostnaya skhema dlya rascheta razryvnykh resheniy nestatsionarnoy gazovoy dinamiki [Finite-difference scheme for unsteady discontinuous gasdynamic flow computations], Uchenyye Zap. TSAGI. 6(1) (1975) 9–14.

[6] **B. van Leer,** Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second order sequel to Godunov's method, J. Comput. Phys. 32 (1) (1979) 101–136.

[7] **P. Colella, P.R. Woodward,** The piecewise parabolic method (PPM) for gasdynamical simulations, J. Comput. Phys. 54 (1) (1984) 174–201.

[8] **A. Harten,** High resolution schemes for hyperbolic conservation laws, J. Comput. Phys. 49 (3) (1983) 357–393.

[9] **A. Jameson,** Artificial diffusion, upwind biasing, limiters and their effect on accuracy and multigrid convergence in transonic and hypersonic flow, AIAA Paper. 1993. No. 93-3359.

[10] **J. Boris, D.L. Book,** Flux corrected transport, 1 SHASTA, a fluid transport algorithm that work, J. Comput. Phys. 11 (1) (1973) 38–69.

[11] **A. Jameson,** Positive schemes and shock modeling for compressible flow, Intern. J. Num. Meth. Fluids. 20 (8-9) (1995) 743–776.

[12] **A. Harten, B. Engquist, S. Osher, S. Chakravarthy,** Uniformly high order essentially nonoscillatory schemes, III, J. Comput. Phys. 71 (2) (1987) 231–303.

[13] **X.-D. Liu, S. Osher, T. Chan,** Weighted essentially nonoscillatory scheme, J. Comput. Phys. 115 (1) (1994) 202–212.

[14] **H.C. Yee,** A class of high-resolution explicit and implicit shock-capturing methods, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lecture Series, 1989-04 (NASA TM-101088). (1989). (https://ntrs.nasa.gov/search.jsp?R=19890016281)

[15] **C. Hirsch,** Numerical computation of internal and external flows. Vol. 2, Computational methods for inviscid and viscous flows, N.Y., John Wiley & Sons, 1990.

[16] **I.V. Egorov, D.V. Ivanov,** Primeneniye polnostyu neyavnykh monotonnykh skhem dlya modelirovaniya ploskikh vnutrennikh techeniy [The application of completely implicit monotone scheme for plane internal flow simulations], Zh. Vychisl. Matem. i Matem. Fiz. 36 (12) (1996) 91–107.

[17] **K.N. Volkov,** Raznostnyye skhemy rascheta potokov povyshennoy razreshayushchey sposobnosti i ikh primeneniye dlya resheniya zadach gazovoy dinamiki [High resolution difference scheme for flux calculation and their applications for gasdynamic problems], Vychislitelnyye Metody i Programmirovaniye. 6 (1) (2005) 146–167.

[18] **A.N. Kudryavtsev, T.V. Poplavskaya, D.V. Khotyanovskiy,** Primeneniye skhem vysokogo poryadka tochnosti pri modelirovanii nestatsionarnykh sverkhzvukovykh techeniy [Application of high-order accuracy schemes to numerical simulation of unsteady supersonic flows], Matematicheskoye Modelirovaniye. 19 (7) (2007) 39–55.

[19] **R.V. Zhalnin, E.A. Veselova, Yu.N. Deryugin, et al.,** Paket programm LOGOS. Metodika povyshennogo poryadka tochnosti na blochno-strukturirovannykh setkakh s ispolzovaniyem rekonstruktsii tipa WENO [Software package LOGOS. The high order of accuracy method on block-structured meshes with WENO reconstruction], Sovremennyye Problemy Nauki i Obrazovaniya. (6) (2012) 583–583.

[20] **R.N. Volkov, Yu. N. Deryugin, V.N. Emelyanov, et al.,** Raznostnyye skhemy v zadachakh gazovoy dinamiki na nestrukturirovannykh setkakh [High-resolution difference schemes for gasdynamic problems on unstructured meshes], Moscow, Fizmatlit, 2015.

[21] **P.A. Bakhvalov, T.K. Kozubskaya,** Skhema s kvaziodnomernoy rekonstruktsiyey peremennykh, opredelennykh v tsentrakh elementov trekhmernoy nestrukturirovannoy setki [Cell-centered quasi one-dimensional reconstruction scheme on 3D hybrid meshes], Matem. Model. 28 (3) (2016) 79–95.

[22] **J. Cabello, K. Morgan, R. Lohner,** A comparison of higher order schemes used in a finite volume solver for unstructured grids, AIAA Paper.

1994. No. 94-2293.

[23] **C. Bruner, R. Walters,** Parallelization of the Euler equations on unstructured grids, AIAA Paper. 1997. No. 97-1894.

[24] **M. Darwish, F. Moukalled,** TVD schemes for unstructured grids, Int. J. Heat Mass Transfer. 46 (4) (2003) 599–611.

[25] **L.-X. Li, H.-S Liao, L.-J Qi,** An improved *r*-factor algorithm for TVD schemes, Int. J. Heat Mass Transf. 51 (3-4) (2008) 610–617.

[26] **J. Hou, F. Simons, R. Hinkelmann,** Improved total variation diminishing schemes for advection simulation on arbitrary grids, Int. J. Numer. Methods Fluids. 70 (3) (2012) 359–382.

[27] **F. Denner, G.M.B. van Wachem,** TVD differencing on three-dimensional unstructured meshes with monotonicity-preserving correction of mesh skewness, J. Comput. Phys. 229 (2015) 466–479.

[28] **T. Buffard, S. Clain,** Monoslope and multislope MUSCL methods for unstructured meshes, J. Comput. Phys. 229 (10) (2010) 3745–3776.

[29] **P.A. Bakhvalov, T.K. Kozubskaya**, Ekonomichnaya formulirovka skhem s kvaziodnomernoy rekonstruktsiyey peremennykh [Efficient formulation for schemes with quasi-one-dimensional reconstruction of variables], Preprint IPM im. M.V. Keldysha. (89) (2013).

[30] **S. Le Touze, A. Murrone, H. Guillard,** Multislope MUSCL method for general unstructured meshes, J. Comput. Phys. 284 (2015) 389–418.

[31] **R. Abgrall,** On essentially nonoscillatory schemes on unstructured meshes: analysis and implementation, J. Comput. Phys. 114 (1) (1994) 45–58.

[32] **O. Friedrich,** Weighted essentially non-oscillatory schemes for the interpolation of mean values on unstructured grids, J. Comp. Phys. 44 (1) (1998) 194–212.

[33] **C.Q. Hu, C.W. Shu,** Weighted essentially nonoscillatory schemes on triangular meshes, J. Comp. Phys. 150 (1) (1999) 97–127.

[34] **P. Tsoutsanis, V.A. Titarev, D. Drikakis,** WENO schemes on arbitrary mixed-element unstructured meshes in three space dimensions, J. Comput. Phys. 230 (4) (2011) 1585–1601.

[35] **A. Harten, J.M. Hyman,** Self-adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws, J. Comput. Phys. 50 (2) (1983) 235–269.

[36] **S.P. Spekreijse,** Multigrid solution of monotone second order discretizations of hypersonic conservations laws, Math. Comput. 49 (179) (1987) 135–155.

[37] **P.K. Sweby,** High-resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws, SIAM J. Numer. Anal. 21 (5) (1984) 995–1011.

[38] **P.L. Roe,** Characteristic based schemes for the Euler equations, Ann. Rev. Fluid Mech. 18 (1) (1986) 337–365.

[39] **B. van Leer,** Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second order scheme, J. Comput. Phys. 14 (4) (1974) 361–370.

[40] **G.D. van Albada, B. van Leer, W.W. Roberts,** A comparative study of computational methods in cosmic gasdynamics, Astron. Astrophysics. 108 (1) (1982) 76–84.

[41] **E.M. Smirnov, D.K. Zaytsev**, Finite volume method as applied to hydro-and gas dynamics and heat transfer problems in complex geometry domains, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. No. 2 (36) (2004) 70–81.

[42] **P. Jawahar, H. Kamath,** A high resolution procedure for Euler and Navier–Stokes computations on unstructured grids, J. Comput. Phys. 164 (1) (2000) 165–203.

[43] **M.A. Nikolayev,** Sochetaniye CUSP skhemy s metodom masshtabirovaniya szhimayemosti pri raschete transzvukovykh techeniy v oblastyakh slozhnoy geometrii [CUSP scheme with methods of scaling the compressibility in calculating transonic flow in complex geometry domains], Trudy XIII Shkoly-seminara molodykh uchenykh i spetsialistov pod rukovodstvom akad. RAN A.I. Leontyeva. Moscow, Izd-vo. MEI. Vol. 1 (2001) 108–111.

[44] **K. Michalak, C. Ollivier-Gooch,** Limiters for unstructured higher-order accurate solutions of the Euler equations, In: Proceedings of the AIAA 46th Aerospace Sciences Meeting (2008).

[45] **K. Michalak, C. Ollivier-Gooch,** Accuracy preserving limiter for the high-order accurate solution of the Euler equations, J. Comput. Phys. 228 (3) (2009) 8693–8711.

[46] **J.S. Park, S.H. Yoon, C. Kim,** Multi-dimensional limiting process for hyperbolic conservation laws on unstructured grids, J. Comput. Phys. 2010. 229 (3) (2010) 788–812.

[47] **R. Swanson, R. Radespiel, E. Turkel,** Comparison of several dissipation algorithms for central difference schemes, AIAA-Paper 97-1945. (1997) 580–598.

Received 16.05.2017, accepted 25.05.2017.

THE AUTHORS

KOLESNIK Elizaveta V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
kolesnik_ev@mail.ru

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

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

АСТРОФИЗИКА

DOI: 10.18721/JPM.10313
УДК 523.985.3

ВКЛАД АЛЬБЕДО ФОТОНОВ В ИНТЕНСИВНОСТЬ ЖЕСТКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ СОЛНЕЧНЫХ ВСПЫШЕК

Е.П. Овчинникова, Ю.Е. Чариков, А.Н. Шабалин, Г.И. Васильев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Рассмотрена задача учета вклада отраженных фотонов в общую интенсивность жесткого рентгеновского излучения солнечных вспышек. Сначала рассчитаны распределения ускоренных электронов на основе уравнения Фоккера – Планка, затем распределения первичных фотонов, локализованных в различных областях вспышечной петли, и, наконец, методом Монте-Карло вычислены поток, энергетический спектр и угловое распределение фотонов, рассеянных в результате эффекта Комптона. Показано, что вклад альбедо фотонов в общий поток рентгеновского излучения имеет место в диапазоне энергий от 30 до 100 кэВ; величина потока отраженных квантов зависит от положения вспышечной петли и локализации источника первичного излучения в магнитной петле. Для изотропного распределения первичных квантов вклад отраженных фотонов в суммарный поток максимален для петли в центре диска и уменьшается при ее смещении к лимбу. В случае анизотропного источника, угол наблюдения, под которым вклад отраженной составляющей максимален, равен 60 град (согласно одной из моделей), но зависит от степени анизотропии и направленности излучения в источнике.

Ключевые слова: солнечная вспышка; рентгеновское излучение; кинетика электронов; комптоновское рассеяние

Ссылка при цитировании: Овчинникова Е.П., Чариков Ю.Е., Шабалин А.Н., Васильев Г.И. Вклад альбедо фотонов в интенсивность жесткого рентгеновского излучения солнечных вспышек // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 140–151. DOI: 10.18721/JPM.10313

THE CONTRIBUTION OF THE ALBEDO FOR PHOTONS TO THE INTENSITY OF THE HARD X-RAY EMISSION OF SOLAR FLARES

E.P. Ovchinnikova, Yu.E. Charikov, A.N. Shabalin, G.I. Vasilyev

The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences,
St. Petersburg, Russian Federation

The albedo contribution to the total hard X-ray solar-flare emission has been considered. First, the distribution of primary hard X-ray photons localized along the flare loop was found, and finally, the Monte Carlo calculations of the Compton scattered hard X-ray photons were obtained. The albedo for photons was shown to contribute to the total X-ray flux only in the energy range from 30 to 100 keV.

Backscattered photons flux depends on the loop's position and on the localization of the source of primary radiation along the loop. For an isotropic distribution of primary photons, the backscattered photons' contribution to the total flux is maximal for the loop in the center of the Sun and reduces when shifting to a limb. In the case of an anisotropic source the angle at which the contribution being maximal depends on the degree of anisotropy and on X-ray directivity in the source.

Key words: solar flare; hard X-ray; electron kinetics; Compton scattering

Citation: E.P. Ovchinnikova, Yu.E. Charikov, A.N. Shabalin, G.I. Vasilyev, The contribution of the albedo for photons to the intensity of the hard X-ray emission of solar flares, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 140–151. DOI: 10.18721/JPM.10313

Введение

Анализ жесткого рентгеновского излучения (ЖРИ) является одним из информативных способов изучения электронов, ускоренных в процессе солнечных вспышек, и эффективным методом диагностики вспышечной плазмы. Современные данные регистрации рентгеновских фотонов во время солнечных вспышек позволяют определять энергетический спектр с точностью до нескольких килоэлектронвольт с пространственным разрешением до двух угловых секунд [1].

Общепринято, что спектр фотонов в диапазоне энергий 20 – 100 кэВ формируется в результате тормозного механизма и может быть аппроксимирован степенной функцией, а спектр ускоренных электронов, в свою очередь, восстанавливается в приближении толстой (тонкой) мишени с показателем спектра, отличным от фотонного на ±1 [2]. Для оценки энергии излучения чрезвычайно важно знать нижнюю границу спектра [3].

Энергетический спектр тормозного рентгеновского излучения во время солнечных вспышек определяется энергетическим, временным и пространственным распределениями ускоренных электронов и параметрами плазмы и магнитного поля в источнике излучения. Кроме того, следует иметь в виду возможный вклад отраженных рентгеновских фотонов при комптоновском рассеянии в плазме фотосферы.

Таким образом, для определения параметров спектра необходимо полностью учитывать все процессы, приводящие к его возможным изменениям. Одной из причин изменения энергетического спектра фотонов является комптоновское рассеяние первичных (испущенных при торможении ускоренных электронов в плазме во время вспышки) рентгеновских квантов в плотных слоях хромосферы – фотосферы.

Фотоны ЖРИ, попадая в фотосферу, испытывают комптоновское рассеяние, в результате чего изменяют свое направление движения и энергию. Отраженное излучение формирует поток альбедо. В первых работах по расчету вклада альбедо рентгеновских фотонов в солнечные вспышке было показано [4], что измеримый вклад отраженный поток вносит в интервале 10 – 100 кэВ с максимумом в области 30 – 40 кэВ. Фотоны с энергиями менее 10 кэВ испытывают фотопоглощение, а фотоны с энергиями более (либо равными) 100 кэВ теряют энергию и поглощаются, распространяясь в более глубокие слои фотосферы.

Вклад отраженных фотонов в наблюдаемый поток зависит не только от энергии, но и от положения первичного источника (вспышки) на диске Солнца. В работе [5] был рассмотрен способ определения компонента альбедо через функцию Грина для неизвестного энергетического распределения первичного источника фотонов, а также исследовано изменение размера источника ЖРИ при смещении его положения на диске Солнца [6]. Но в указанных работах [4 – 6] распределение первичных фотонов ЖРИ не ассоциировалось с конкретным распределением во время вспышек, задавалось произвольно, без учета динамики ускоренных электронов в плазме вспышечных магнитных петель.

Цель настоящей работы – определить роль эффекта альбедо вследствие комптоновского рассеяния в изменении показателя рентгеновского спектра для различных

моделей ускоренных электронов и оценить вклад альбедо в ЖРИ вспышки, произошедшей 11 ноября 2002 года.

Угловое и энергетическое распределения первичного ЖРИ рассчитывались в модели физической кинетики электронов во вспышечной петле, в которой начальными параметрами являлись функция распределения ускоренных электронов в источнике, а также распределения концентрации плазмы и магнитного поля [7 – 9]. Чтобы получить поправки на альбедо для показателя наблюдаемого спектра, среди возможных моделей пучка и плазмы (включающих различные функции распределения электронов) была выбрана такая, которая наиболее точно описывает наблюдаемое распределение яркости ЖРИ вспышки 11 ноября 2002 года; затем для выбранной модели была рассчитана картина интенсивности ЖРИ с учетом фотонов альбедо.

Физическая кинетика пучка ускоренных электронов

Нестационарное релятивистское уравнение Фоккера – Планка для описания ускоренных электронов в магнитной петле запишем в следующем виде [10]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -c\beta\mu\frac{\partial f}{\partial s} + c\beta\frac{\partial \ln(B)}{\partial s}\frac{\partial}{\partial\mu}\left[\frac{(1-\mu^2)}{2}f\right] + C_1\frac{c}{\lambda_0}\frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{f}{\beta}\right) + C_2\frac{c}{\lambda_0\beta^3\gamma^2}\frac{\partial}{\partial\mu}\left[(1-\mu^2)\frac{\partial f}{\partial\mu}\right] + S(E,\theta,s,t), \quad (1)$$

где $f(E, \theta, s, t)$ – функция распределения ускоренных электронов; $\mu = \cos\theta$ (θ – питч-угол электрона); E – кинетическая энергия электронов (в единицах энергии покоя электрона); γ – Лоренц-фактор ($\gamma = E + 1$); s – расстояние вдоль силовой линии (отсчитывается от вершины петли); t – текущее время; c – скорость света; Для случая полной ионизации вспышечной плазмы $C_1 = 1$ и $C_2 = (3 + \gamma)/4$ [10];

$$\lambda_0(s) = 10^{24} / (n(s)\ln\Lambda),$$

($\ln\Lambda$ – кулоновский логарифм).

В уравнении (1) учитывается перенос электронов в плазме вдоль магнитной петли, отражение в сходящемся магнитном поле, столкновительные потери энергии и кулоновское рассеяние в плазме. Последний член справа, $S(E, \theta, s, t)$, определяет функцию распределения электронов в момент инжекции (рассматривается одномерная по координате задача). Функция источника электронов представлена в факторизованном виде:

$$S(E,\theta,s,t) = S_1(E)S_2(\theta)S_3(s)S_4(t). \quad (2)$$

Конкретный вид функций $S_1 - S_4$ приводится ниже. Функцию распределения ускоренных электронов мы численно рассчитываем с использованием метода суммарной аппроксимации для решения многомерных задач, а интенсивность рентгеновского излучения ускоренных электронов – по формулам релятивистского тормозного излучения [4].

Моделирование комптоновского рассеяния

Для моделирования вероятностных процессов, в том числе комптоновского рассеяния, широко используется метод Монте-Карло. В данной работе при моделировании нами был совершен переход от функции распределения первичного ЖРИ к рассмотрению взаимодействий (фотоэффект, комптоновское рассеяние) отдельных фотонов при их распространении в солнечной атмосфере. Для каждого кванта с учетом сечения процесса при данной энергии фотона были сгенерированы углы рассеяния, и, соответственно, энергии после рассеяния.

Считалось, что для каждого источника число вылетающих первичных фотонов превышает (либо равно) 10^8. Для расчета траектории фотонов при прохождении через фотосферу использовался инструментарий GEANT4 [11], основанный на применении метода Монте-Карло. Область Солнца (фотосфера, хромосфера), где происходят интересующие нас взаимодействия, представлялась в виде 54 концентрических сферических слоев с постоянной плотностью в каждом слое, в интервале значений

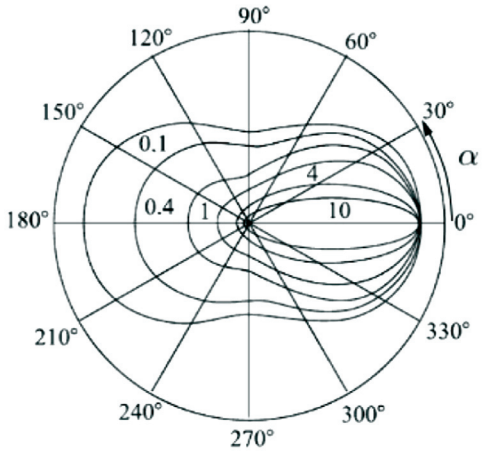


Рис. 1. Диаграмма пространственного распределения дифференциального сечения комптоновского рассеяния для различных значений энергии фотона E_{ph}/mc^2 (числа около кривых); α – угол рассеяния фотонов относительно направления распространения первичного фотона [12]

от $1{,}9\cdot10^{-12}$ до $5{,}2\cdot10^{-6}$ г·см$^{-3}$.

При уменьшении угла между направлением фотона и нормалью к поверхности Солнца вероятность многократного рассеяния увеличивается за счет увеличения проходимой фотоном толщи атмосферы Солнца. При уменьшении энергии фотона в результате комптоновского рассеяния увеличивается вероятность фотоэффекта. Первичные фотоны рассматривались с энергиями выше 28 кэВ, так как для таких энергий отсутствует вклад тепловых электронов плазмы в жесткое рентгеновское излучение.

При увеличении энергии фотонов направленность отраженного рентгеновского излучения становится более выраженной (рис. 1), а рассеяние в противоположном направлении оказывается менее вероятным.

Расчет эффекта альбедо для различных моделей

Источники жесткого рентгеновского излучения солнечных вспышек локализуются в основаниях и вершине петли [13]. В данной работе нами были рассмотрены три модели:

М1. Три источника, при этом два в основаниях и один в вершине;

М2. Два источника в основаниях петли;

М3. Один источник в вершине.

Для рассмотренных моделей магнитное поле петли представлялось в параболическом виде [9]:

$$\frac{B(s)}{B_0} = 1 + \frac{(s - b_1)^2}{b_2^2},$$

при следующих значениях величин: $B_0 = 200$ Гс, $b_1 = 0$ см, $b_2 = 3\cdot10^9$ см.

Выбор параметров пучка и плазмы подробно обсуждался в нашей статье [9]. Отношение величины магнитного поля в основании петли к минимуму той же величины, который расположен в геометрической вершине петли, в данных моделях принималось равным $B_{max} / B_0 = 2$, а радиус петли – $R = 2\cdot10^8$ см.

Энергетический спектр электронов имеет вид степенной функции:

$$S_1(E) = K\left(\frac{E}{E_0}\right)^{-\nu}, \ \nu = 5.$$

Функция распределения по времени и координате выбрана в Гауссовом виде:

$$S_3(s) = \exp\left(-\frac{(s - s_1)^2}{s_0^2}\right),$$

$$S_4(t) = \exp\left(-\frac{(t - t_1)^2}{t_0^2}\right),$$

где $s_0 = 2\cdot10^8$ см, $s_1 = 0$ см, $t_1 = 2{,}6$ с, $t_0 = 1{,}4$ с.

Для М1 и М3 считалось, что распределение электронов по питч-углу изотропное:

$$S_2(\theta) = 1.$$

Согласно модели М2, электроны инжектируются в узком пучке:

$$S_2(\theta) = \cos^{12}\theta.$$

Согласно модели М3, единственный источник в вершине петли возникает в связи с дополнительным рассеянием ускоренных электронов на ионно-звуковой турбулентности со стационарным спектром; диффузионный член выглядит следующим образом [14]:

$$D^s = \left(\frac{v}{\overline{v_{is}}} \right)^2 \frac{15\sqrt{\pi}}{8\sqrt{2}} Z^2 m_e^2 v_{T_e}^5 \left(\frac{m_e}{m_i} \right)^{\frac{3}{2}} \times$$

$$\times \frac{T_e}{T_i} k_g v_{T_e} \left(\frac{1}{2Ec^2} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\sqrt{\frac{Q}{Q_*^s}} + e^{-\sqrt{\frac{Q}{Q_*^s}}} - 1 \right],$$

где T_i, T_e – температуры ионной и электронной компонент плазмы; m_e – масса электрона; m_i – средняя масса ионов плазмы; Z – среднее зарядовое число ионов плазмы; v_{Te} – тепловая скорость электронов плазмы; v – скорость ускоренных электронов,

$$\frac{Q}{Q_*^s} = \frac{T_i}{T_e} \sqrt{\frac{m_i}{m_e}} \frac{W^s}{nk_B T_e};$$

$$k_g d_e \approx 0,1; \; v_{is}^2 = \frac{T_e}{m_i}.$$

Здесь W^s – плотность энергии ионно-звуковых волн; n – концентрация частиц плазмы, k_B – постоянная Больцмана, d_e – дебаевский радиус.

На рис. 2 представлены результаты расчета распределений яркости ЖРИ для рассмотренных моделей. Видно, что степень

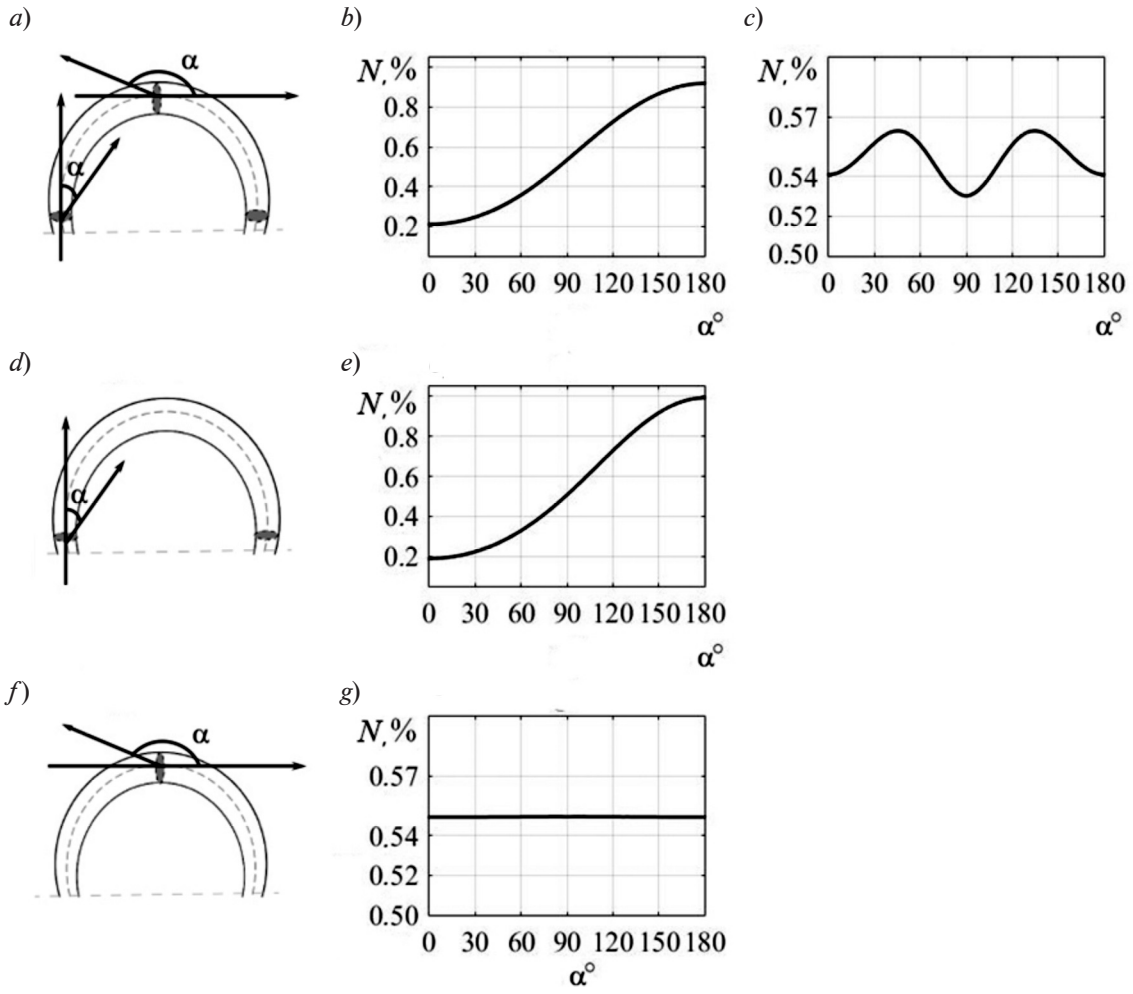


Рис. 2. Схемы расположения источников в петле магнитного поля для моделей М1 (*a*), М2 (*d*), М3 (*f*) и результаты расчета начальных угловых распределений яркости ЖРИ $N(\alpha)$ с использованием трех моделей. М1: источники расположены в основании (*b*) и вершине (*c*) петли; М2, М3: источники расположены соответственно в основании (*e*) и вершине (*g*) петли. α – угол между центральной линией магнитного поля петли и направлением фотона; N – доля фотонов (в процентах), вылетающих под углом α к линии магнитного поля, от их общего числа

угловой анизотропии модельных источников ЖРИ различна. Так, в случае источника в основании петли (рис. 2, *b*, *e*) число фотонов, вылетающих по направлению на фотосферу, больше числа фотонов, распространяющихся в обратном направлении. Для источников, расположенных в вершине петли (рис. 2, *c*, *g*), распределения яркости ЖРИ близки к изотропным.

Расчетные результаты рассеянного потока рентгеновского излучения будут зависеть от позиции наблюдателя относительно источника ЖРИ, другими словами – от положения источника на диске Солнца. В данной работе мы варьировали положение источника, смещая его от центра диска к лимбу (гелиоцентрический угол $\varphi = [0^\circ, 90^\circ]$). Для каждой модели и положения петли на диске, были построены спектры яркости первичного ЖРИ, отраженного излучения, а также суммарного наблюдаемого потока. Значение изменения показателя спектра было определено как

$$\delta = \gamma_1 - \gamma_2,$$

где γ_1 – модуль показателя первичного спектра, γ_2 – модуль показателя суммарного спектра.

В целом трансформация первичного спектра в результате учета комптоновского рассеяния приводит к его смягчению. Значение δ для рассмотренных моделей не превышало 0,24.

Для М3 (изотропный источник находится в вершине петли) вклад в суммарный спектр и, соответственно, изменение показателя спектра максимальны (рис. 3, *a*) при расположении петли в центре диска Солнца, когда $\varphi = 0^\circ$, и монотонно убывает при смещении положения петли к лимбу, когда $\varphi = 90^\circ$ (расположение петли показано на рис. 3, *b*). Для М2, когда два источника лежат в основаниях петли и характеризуются анизотропным угловым распределением (см. рис. 2, *d*, *e*), зависимость параметра δ иная: с увеличением гелиоцентрического угла φ от 0 до 60° параметр δ возрастает, принимая значения от 0,13 до 0,23; при дальнейшем увеличении угла φ параметр δ убывает до значения 0,16. Другими словами, для данной модели максимальное различие показателей спектров первичного и суммарного рентгеновского излучения достигается не в центре диска Солнца, а при гелиоцентрическом угле $\varphi = 60^\circ$. Это можно объяснить совокупностью двух фак-

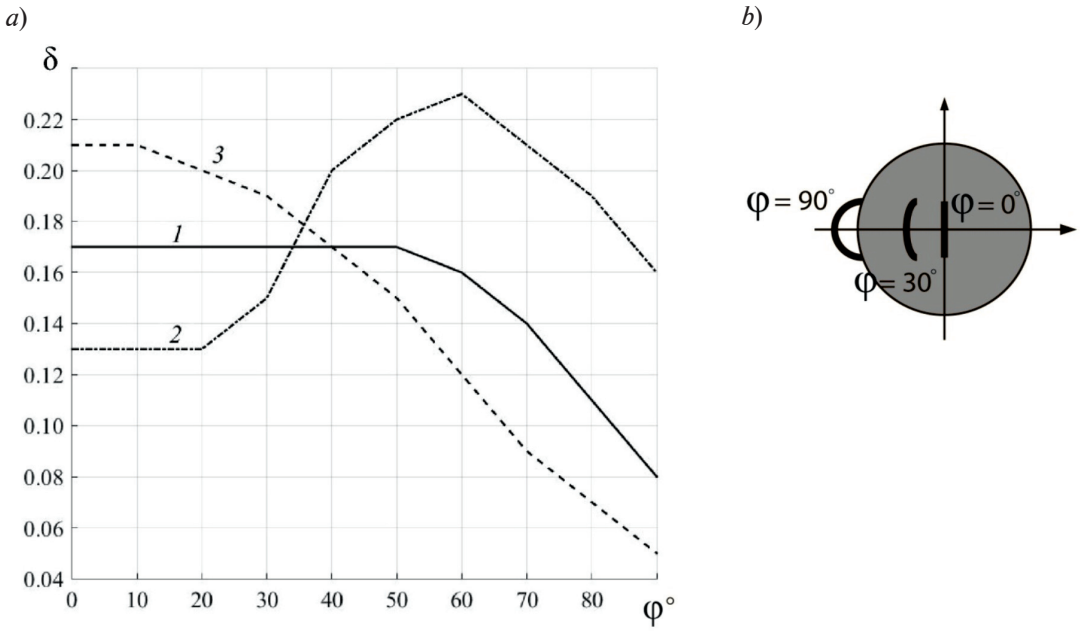


Рис. 3. Угловые зависимости параметра δ (*a*) при смещении положения петли магнитного поля от центра солнечного диска к лимбу (*b*), полученные с использованием моделей М1 – М3 (кривые *1* – *3* соответственно)

торов: анизотропией источника рентгеновских квантов и направленностью комптоновского рассеяния. Для М1 (совокупность источников в вершине и основаниях) зависимость параметра δ определяется суперпозицией параметров моделей М2 и М3, при этом наименьшее значение параметр принимает при расположении петли на лимбе (см. рис. 3, *а*).

Еще одним важным параметром, характеризующим комптоновское рассеяние фотонов, является дифференциальная отражательная способность атмосферы Солнца, а именно – отношение потока отраженного излучения F_{Comp} к потоку первичного F_{prim} на том же энергетическом промежутке:

$$\text{DR} = F_{\text{Comp}} / F_{prim}.$$

Величина DR для рассмотренного интервала энергий имеет наибольшее значение в диапазоне 30 – 40 кэВ (табл. 1); как следствие, вклад отраженной составляющей в общий поток при этих энергиях также наибольший.

Вспышка 10 ноября 2002 года

Изложенный выше подход совместно с рассмотрением наблюдательных данных позволяет делать выводы о характеристиках электронов, ускоренных во время вспышки.

Вспышка, произошедшая на Солнце 10 ноября 2002 года, в 03:06:30 UT (Universal Time – всемирное время), по классификации GOES (Geostationary Operation Environmental Satellites) М2,6, наблюдалась на спутнике RHESSI в жестком рентгеновском диапазоне (рис. 4) и радиогелиографе Nobeyama в микроволновом диапазоне. На указанном рисунке фоновое изображение соответствует диапазону энергий 6 – 12 кэВ; сплошные контурные линии соответствуют уровням различной интенсивности, а именно 20, 50 и 80 % (от внешних колец к внутренним) в диапазоне энергий 28 – 58 кэВ; штриховые контурные линии – уровням интенсивности 30, 70 и 90 % в диапазоне 70 – 130 кэВ.

Указанные сведения об этой вспышке, а также данные измерений магнитного поля аппаратом SOHO MDI дают возможность провести сравнительный анализ данных наблюдений и результатов моделирования. На основе этих данных были определены характеристики вспышки (табл. 2).

Таблица 1

Дифференциальная отражательная способность атмосферы Солнца

Диапазон энергий, кэВ	DR, %			
	M1		M2	M3
	FP	LT		
28,5 – 31,6	31,4	10,5	31,7	9,5
31,6 – 39,8	30,0	9,9	30,2	8,8
39,8 – 50,1	25,4	8,8	25,6	7,5
50,1 – 63,1	20,7	7,5	20,8	6,4
63,1 – 79,4	15,8	6,1	15,7	5,1
79,4 – 100,0	11,3	4,8	11,4	4,1
100,0 – 125,9	7,8	3,4	7,6	3,0
125,9 – 158,5	5,2	2,5	4,7	2,2
158,5 – 199,5	3,2	1,6	2,5	1,7
199,5 – 251,2	1,8	1,0	1,2	0,9
251,2 – 316,2	1,4	0,5	0,7	0,3

Обозначения: DR – дифференциальная отражательная способность; М1 – М3 – использованные расчетные модели; источники ЖРИ расположены в основании (FootPoint) и вершине (LoopTop) петли.

Таблица 2

Характеристика вспышки, полученная из наблюдательных данных

Параметр	Значение в диапазоне энергий	
	28 – 58 кэВ	70 – 130 кэВ
Показатель фотонного спектра	2,5	–
Соотношение яркости источников	2,25 – 2,50	2,50 – 2,70
Поток энергии нетепловых электронов в максимуме, эрг·с$^{-1}$	$6 \cdot 10^{27}$	
Объем вспышечной петли, см^3	$6 \cdot 10^{27}$ [3]	
Длина вспышечной петли, см	$5{,}51 \cdot 10^9$	

По данным SOHO MDI (магнитное поле восстановлено в программе GX Simulator [15, 16] методом LFFF), получено модельное распределение магнитного поля вдоль петли; оценена длина вспышечной петли (см. табл. 2); получены также углы наблюдения для расчета рентгеновского и радиоизлучений.

При моделировании, помимо кулоновского рассеяния и магнитного отражения, учитывалось влияние обратного тока [17], а также питч-угловая диффузия ускоренных электронов на ионно-звуковой турбулентности и магнитных флуктуациях [14].

Путем варьирования параметров электронов в момент инжекции нами была подобрана модель, наиболее адекватно описывающая наблюдаемое излучение в радио- и рентгеновском диапазонах.

Параметры данной модели следующие:

показатель спектра ускоренных электронов в фазе максимума до переходной обла-

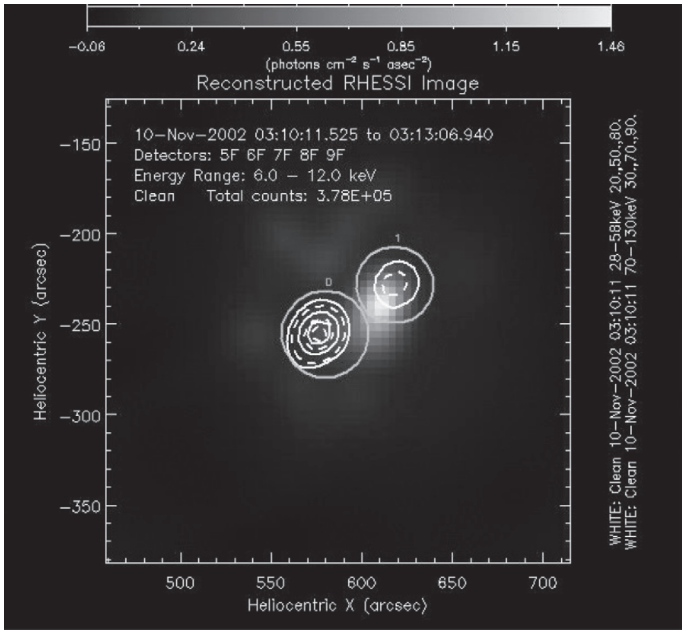


Рис. 4. Данные наблюдений вспышки на Солнце 10.11.2002 г. [1]; представлены области источников ЖРИ в основаниях петли (боксы 0 и 1), а также уровни интенсивности.
Сплошные и пунктирные контурные кольца соответствуют уровням различной интенсивности в диапазонах энергий 28 – 58 и 70 – 130 кэВ, соответственно (фон соответствует диапазону энергий 6 – 12 кэВ)

сти составляет $\delta_1 = 2{,}7 - 2{,}9$;

распределение источника ускоренных электронов по питч-углу имеет вид $S_2(\theta) = \cos^8\theta$ (сильно анизотропное);

значение плотности энергии ионно-звуковых волн ограничено сверху

$$W^s/n_e k_B T_e << 10^{-4}$$

(n_e – концентрация электронов вспышечной плазмы);

длина магнитной петли $L \sim 5{,}5 \cdot 10^9$ см;

значение индукции магнитного поля в вершине петли составляет 66 Гс, в ее южном основании – 400 Гс, в северном – 1000 Гс.

Для источников в основаниях петли данной вспышки, в рамках описанной выше модели были рассчитаны энергетические спектры ЖРИ для первичного, отраженного и суммарного потоков двух оснований (рис. 5). Параметр δ ($\delta = \gamma_1 - \gamma_2$) вычислялся путем аппроксимации полученных спектров степенной зависимостью в диапазоне энергий 30 – 100 кэВ. Для двух оснований петли получены значения $\delta_1 = 0{,}23$, $\delta_2 = 0{,}32$ (см. рис. 5), что составляет соответственно 9 и 13 % от величины показателя наблюдаемого спектра. Отметим, что вклад в суммарный поток наиболее существен для энергий фотонов менее 100 кэВ (см. рис. 5).

Обсуждение результатов

В данной работе были произведены расчеты изменения показателя спектра вследствие комптоновского рассеяния фотонов ЖРИ в атмосфере Солнца. Были рассмотрены три модели с разной локализацией источника излучения вдоль петли и разным числом дискретных источников.

Было установлено, что для изотропных источников ЖРИ вклад отраженных фотонов в их суммарный поток максимален при позиции петли в центре диска и уменьшается при ее смещении к лимбу. Для анизотропного источника ЖРИ угловое распределение отраженного потока может быть различным и зависит от угла наблюдения и степени анизотропии.

Так, для модели 2 (М2) вклад оказался максимальным не в случае положения петли в центре диска Солнца, а при гелиоцентрическом угле $\varphi = 60°$. Параметр δ, характеризующий изменение показателя суммарного спектра, для рассмотренных моделей принимает значения, лежащие в интервале 0,1 – 0,3. В целом вклад отраженных от фо-

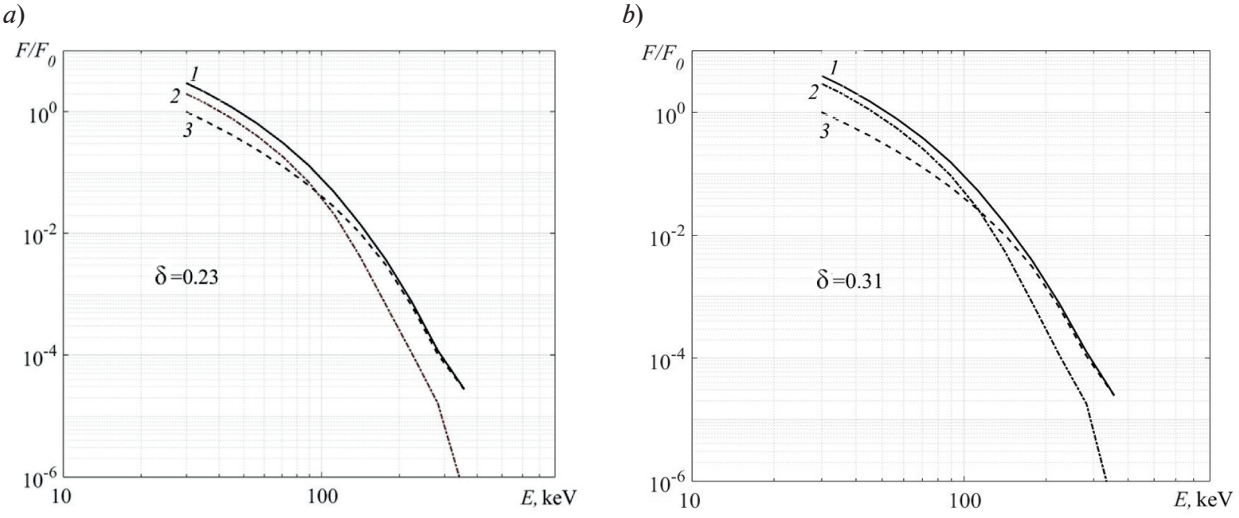


Рис. 5. Расчетные энергетические спектры для вспышки 10.11. 2002 г. в момент максимума потока для южного (*a*) и северного (*b*) оснований (боксы 0 и 1, соответственно, см. рис. 4). Параметр δ характеризует изменение показателя суммарного спектра.

Представлены результаты для суммарного потока ЖРИ (*1*), его отраженной составляющей (*2*) и для первичного потока рентгеновского излучения (*3*). Величины потоков нормированы на значения потока первичного излучения F_0

тосферы фотонов в суммарный поток приводит к смягчению наблюдаемого спектра ЖРИ.

Для использованных нами моделей наибольшее значение дифференциальной отражательной способности атмосферы Солнца получено для фотонов с энергиями 30 – 40 кэВ, что согласуется с результатами, полученными в работах [4, 5]. По разработанной методике можно рассчитывать поправки к показателю спектра для наблюдательных данных, связанные с комптоновским рассеянием и тем самым уточнять характеристики спектра фотонов и электронов.

Такой подход был продемонстрирован на примере вспышки 10 ноября 2002 года. Для источников ЖРИ в основаниях петли магнитного поля получены значения $\delta_1 = 0{,}23$, $\delta_2 = 0{,}32$. Отметим, что, несмотря на близкое расположение оснований вспышечной петли, вклад альбедо оказался различным: в северном основании (ввиду более высокого значения отношения B_{max}/B_0) область пика излучения пришлась на слои хромосферы, более удаленные от областей, отражающих первичный поток фотонов, по сравнению с южным источником ЖРИ. Более того, ввиду несимметричности распределения магнитного поля, угловое и энергетическое распределения излучающих электронов в основаниях петли различны, вследствие более эффективного магнитного отражения в северной части петли. В итоге вклад альбедо оказался более существенным для северного основания, что сказалось на значительном изменении спектра первичного потока. Изменение составило $\delta_2 = 0{,}31$ для северного основания и $\delta_1 = 0{,}23$ для южного. Различие в полученных значениях показателя энергетического спектра рентгеновских квантов, равное примерно 0,1, находится в пределах возможностей прибора RHESSI по детектированию с учетом приборных и методологических ошибок.

Таким образом, предложенный метод учета вклада альбедо оказывается важным инструментом при анализе и моделировании кинетики электронов во вспышечных событиях на Солнце.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Lin R.P., Dennis B.R., Hurford G.J.** The Reuven Ramaty high-energy solar spectroscopic imager (RHESSI) // Solar Physics. 2002. Vol. 210. No. 1. Pp. 3–32.

2. **Brown J.C.** The deduction of energy spectra of non-thermal electrons in flares from the observed dynamics spectra of hard X-ray burst // Solar Physics. 1971. Vol. 18. No. 3. Pp. 489–502.

3. **Saint-Hilaire P., Benz A.O.** Thermal and non-thermal energies in solar flares // Astronomy & Astrophysics. 2005. Vol. 435. No. 2. Pp. 743–752.

4. **Bai T., Ramaty R.** Backscatter, anisotropy, and polarization of solar hard X-rays // The Astrophysical Journal. 1978. Vol. 219. No.1. Pp. 705–726.

5. **Kontar E.P., MacKinnon A.L., Schwartz R.A., Brown J.C.** Compton backscattered and primary X-rays from solar flares: angle dependent Green's function correction for photospheric albedo //Astronomy & Astrophysics. 2006. Vol. 446. No. 3. Pp. 1157–1163.

6. **Kontar E.P., Jeffrey N.L.S.** Positions and sizes of X-ray solar flare sources //Astronomy & Astrophysics. 2010. Vol. 513. No. L2. Pp. 1–4.

7. **Hamilton R.J., Lu E.T., Petrosian V.** Numerical solution of the time-dependent kinetic equation for electrons in magnetized plasma //The Astrophysical Journal. 1990. Vol. 354. No. 2. Pp. 726–734.

8. **Горбиков С.П., Мельников В.Ф.** Численное решение уравнения Фоккера – Планка в задачах моделирования распределения частиц в солнечных магнитных ловушках // Математическое моделирование. 2007. Т. 19. № 2. С. 112–122.

9. **Чариков Ю.Е., Шабалин А.Н., Кудрявцев И.В.** Жесткое рентгеновское излучение ускоренных электронов в петельной структуре магнитного поля во время солнечных вспышек // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 1 (182). С. 154–165.

10. **Leach J., Petrosian V.** Impulsive phase of solar flares, characteristics of high energy electrons // The Astrophysical Journal. 1981. Vol. 251 (15 December) Pp. 781–791.

11. **Allison J., Amako K., Apostolakis J., Arce P., Asai M.** Recent developments in Geant4 // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Sec. A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2016. Vol. 835 (1 November). Pp. 186–225.

12. **Фетисов Г.В.** Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. М.: Litres, 2017.

13. **Krucker S., Battaglia M., Cargill P.J., Fletcher L., Hudson H.S.,** Hard X-ray emission from the solar corona //The Astronomy and Astrophysics Review. 2008. Vol. 16. No. 3-4. Pp. 155–208.

14. **Charikov Y.E., Shabalin A.N.,** Hard X-ray generation in the turbulent plasma of solar flares // Geomagnetism and Aeronomy. 2016. Vol. 56. No. 8. Pp. 1068–1074.

15. **Fleishman G.D., Kuznetsov A.A.** Fast gyrosynchrotron codes// The Astrophysical Journal. 2010. Vol. 721. No. 2. Pp. 1127–1141.

16. **Nita G.M., Fleishman G.D., Kuznetsov A.A., Kontar E.P., Gary D.E.** Three-dimensional radio and X-ray modeling and data analysis software: Revealing flare complexity //The Astrophysical Journal. 2015. Vol. 799. No. 2. Pp. 236–251.

17. **Zharkova V.V., Kuznetsov A.A., Siversky T.V.** Diagnostics of energetic electrons with anisotropic distributions in solar flares I. Hard X-rays bremsstrahlung emission // Astronomy & Astrophysics. 2010. Vol. 512 (March-April). Pp. 1–18 (A8).

Статья поступила в редакцию 02.04.2017, принята к публикации 17.06.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ОВЧИННИКОВА Евгения Петровна – *стажер-исследователь лаборатории космических лучей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
elfimovaevgeniya@gmail.com

ЧАРИКОВ Юрий Евгеньевич – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории космических лучей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Yuri.Charikov@mail.ioffe.ru

ШАБАЛИН Александр Николаевич – *аспирант лаборатории космических лучей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
taoastronomer@gmail.com

ВАСИЛЬЕВ Геннадий Иванович – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории космических лучей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
gennadyivas@gmail.com

REFERENCES

[1] **R.P. Lin, B.R. Dennis, G.J. Hurford,** The Reuven Ramaty high-energy solar spectroscopic imager (RHESSI), Solar Physics. 210 (1) (2002) 3–32.

[2] **J.C. Brown,** The deduction of energy spectra of non-thermal electrons in flares from the observed dynamics spectra of hard X-ray burst, Solar Physics.18 (3) (1971) 489–502.

[3] **P. Saint-Hilaire, A.O. Benz,** Thermal and non-thermal energies in solar flares, Astronomy & Astrophysics. 435 (2) (2005) 743–752.

[4] **T. Bai, R.Ramaty,** Backscatter, anisotropy, and polarization of solar hard X-rays, Astrophysical Journal. 219 (1) (1978) 705–726.

[5] **E.P. Kontar, A.L. MacKinnon, R.A. Schwartz, J.C. Brown,** Compton backscattered and primary X-rays from solar flares: angle dependent Green's function correction for photospheric albedo, Astronomy & Astrophysics. 466(3) (2006) 1157–1163.

[6] **E.P. Kontar, N.L.S. Jeffrey,** Positions and sizes of X-ray solar flare sources, Astronomy & Astrophysics. 513 (L2) (2010).

[7] **R.J. Hamilton, E.T. Lu, V. Petrosian,** Numerical solution of the time-dependent kinetic equation for electrons in magnetized plasma, The Astrophysical Journal. 354 (2) (1990) 726–734.

[8] **S.P. Gorbikov ,V.F. Melnikov,** The numerical solution of the Fokker–Planck equation for modeling of particle distribution in solar magnetic traps, Matematicheskoe Modelirovanie. 19(2) (2007) 112–122.

[9] **Yu.E. Charikov, A.N. Shabalin, I.V. Kudryavtsev,** Hard X-rays in solar flaring loop from accelerated electron beams, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and

Mathematics. 1(182) (2013) 154–165.

[10] **J. Leach, V. Petrosian,** Impulsive phase of solar flares, characteristics of high energy electrons, The Astrophysical Journal. 251 (15 Dec.) (1981) 781–791.

[11] **J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, et al.,** Recent developments in Geant4, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Sec. A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 835 (1Nov.) (2016) 186–225.

[12] **G.V. Fetisov,** Sinkhrotronnoye izlucheniye. Metody issledovaniya struktury veshchestv. [Synchrotron radiation. Methods for studying the structure of substances], Moscow, Litres, 2017.

[13] **S. Krucker, M. Battaglia, P.J. Cargill, et al.,** Hard X-ray emission from the solar corona, Astronomy and Astrophysics, Review. 16 (3-4) (2008) 155 –208.

[14] **Y.E. Charikov, A.N. Shabalin,** Hard X-ray generation in the turbulent plasma of solar flares, Geomagnetism and Aeronomy. 56(8) (2016) 1068–1074.

[15] **G.D. Fleishman, A.A. Kuznetsov,** Fast gyrosynchrotron codes, Astrophysical Journal. 721 (2) (2010) 1127–1141.

[16] **G.M. Nita, G.D. Fleishman, A.A. Kuznetsov, et al.,** Three-dimensional radio and X-ray modeling and data analysis software: Revealing flare complexity, Astrophysical Journal. 799(2) (2015) 236–251.

[17] **V.V. Zharkova, A.A. Kuznetsov, T.V. Siversky,** Diagnostics of energetic electrons with anisotropic distributions in solar flares, I. Hard X-rays bremsstrahlung emission, Astronomy & Astrophysics, 512 (March-April) (2010). A8.

Received 02.04.2017, accepted 17.05.2017.

THE AUTHORS

OVCHINNIKOVA Evgeniya P.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
elfimovaevgeniya@gmail.com

CHARIKOV Yuriy E.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
Yuri.Charikov@mail.ioffe.ru

SHABALIN Aleksander N.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
taoastronomer@gmail.com

VASILYEV Gennadiy I.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
gennadyivas@gmail.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

DOI: 10.18721/JPM.10314
УДК 523.985.3

ДИАГНОСТИКА ПЛАЗМЫ ДВУХ СОЛНЕЧНЫХ ВСПЫШЕК НА ОСНОВЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РЕГИСТРАЦИИ МЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

М.И. Савченко, П.В. Ватагин, В.П. Лазутков, Д.В. Скородумов, И.В. Кудрявцев, Ю.Е. Чариков

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

На основе измерений временных и спектральных характеристик мягкого рентгеновского излучения (РИ), зарегистрированного спектрометром «ИРИС», проведено исследование эволюции температуры и меры эмиссии плазмы вспышек на Солнце, произошедших 29.06. 2002 года (В1) и 27.03. 2003 года (В2). В1 была тепловой и не сопровождалась генерацией жесткого РИ. Проведенный анализ данных показал, что за период времени вспышки В1 происходило, как минимум, два последовательных процесса энерговыделения. В2 была залимбовой, поэтому с орбиты спутника, где был установлен спектрометр, была зарегистрирована только верхняя часть вспышечной петли, которая и являлась источником мягкого РИ. Анализ данных показал, что на начальной фазе В2 происходил быстрый нагрев плазмы с последующим расширением вспышечной области и увеличением меры эмиссии.

Ключевые слова: солнечная вспышка; горячая плазма; вспышечная петля; рентгеновское излучение

Ссылка при цитировании: Савченко М.И., Ватагин П.В., Лазутков В.П., Скородумов Д.В., Кудрявцев И.В., Чариков Ю.Е. Диагностика плазмы двух солнечных вспышек на основе результатов регистрации мягкого рентгеновского излучения // Научно-технические ведомости СПБГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 152–160. DOI: 10.18721/JPM.10314

THE TWO SOLAR FLARES DIAGNOSTICS BASED ON THE SOFT X-RAY EMISSION RECORDING

M.I. Savchenko, P.V. Vatagin, V.P. Lazutkov, D.V. Skorodumov, I.V. Kudryavtsev, Yu.E. Charikov

The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciemes, St. Petersburg, Russian Federation

The time history of the temperature and the emission measure of the solar flare plasma have been studied relying upon the experimental data on the soft X-rays recorded by the IRIS spectrometer on June 29, 2002 (F1) and March 27, 2003 (F2). F1 was a thermal one and was not accompanied by hard X-rays. This data analysis revealed that at least two sequential energy-release processes occurred during F1 event. F2 event took place behind the limb, so only the top part of the flare loop being the soft X-ray source was recorded by the satellite-based spectrometer. From this data analysis, it appeared that the fast plasma heating occurred in the initial stage of F2 and then the flare region expanded and the emission measure of flare plasma increased.

Key words: solar flare; hot plasma; flare loop; X-ray emission

Citation: M.I. Savchenko, P.V. Vatagin, V.P. Lazutkov, D.V. Skorodumov, I.V. Kudryavtsev, Yu.E. Charikov, The two solar flares diagnostics based on the soft X-ray emission recording, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 152–160. DOI: 10.18721/JPM.10314

Введение

Измерение параметров электромагнитного излучения во время солнечных вспышек позволяет проводить диагностику вспышечной плазмы и получать информацию о механизмах накопления и трансформации энергии магнитного поля в тепловую энергию плазмы, в энергию ускоренных частиц и электромагнитного излучения. При этом необходимо отметить, что анализ параметров жесткого рентгеновского излучения (ЖРИ) дает возможность получать важные сведения о процессах ускорения электронов и их распространения во время вспышек (см, например, работы [1 – 4]). Анализ параметров мягкого рентгеновского излучения дает сведения о динамике нагрева и охлаждения плазмы и об эволюции излучающей области [5].

Настоящая работа посвящена диагностике параметров вспышечной плазмы для двух вспышек на основе измерений в мягком рентгеновском диапазоне спектрометром «ИРИС», установленным на борту космической станции «КОРОНАС-Ф» [6, 7].

Методическая часть

Интенсивность мягкого рентгеновского излучения в диапазоне 1 – 15 кэВ определяется температурой (T) и мерой эмиссии (EM) нагретой вспышечной плазмы в предположении тормозного механизма излучения. В статье приводятся результаты расчета температуры и меры эмиссии по мягкому рентгеновскому излучению для двух вспышек GOES-класса C: 29.06.2002 года (C2.6) и 27.03. 2003 года (C2.2). Далее эти вспышки будут для краткости именоваться как B1 и B2.

Спектрометр «ИРИС» [6, 7] предназначен для измерения временных и спектральных характеристик мягкого и жесткого рентгеновского излучения Солнца в диапазоне энергий 2 – 150 кэВ. В силу невысокого энергетического разрешения детекторов вклад отдельных спектральных линий в указанные характеристики незначителен. Мягкое рентгеновское излучение регистрируется пропорциональными детекторами, жесткое – сцинтилляционными детекторами. Оба вида этого излучения регистрируются в 32 энергетических каналах.

Для восстановления параметров вспышечной плазмы мы использовали однотемпературное приближение для описания генерации непрерывного мягкого рентгеновского излучения. В этом приближении рентгеновское излучение описывается как тепловое излучение горячей, оптически тонкой плазмы, частицы которой имеют максвелловское распределение. При этом спектр теплового рентгеновского излучения плазмы с характерным солнечным химическим составом на расстоянии одной астрономической единицы от Солнца описывается следующим выражением [8]:

$$J(E) = 1,3 \cdot 10^3 \cdot \mathrm{EM} \cdot \frac{\exp(-E / T)}{E^{1,4} \cdot T^{0,1}}, \quad (1)$$

где $J(E)$, фотон·см$^{-2}$·с$^{-1}$·(кэВ)$^{-1}$ – дифференциальный поток рентгеновского излучения на орбите Земли; E, кэВ – энергия кванта; T, кэВ – температура плазмы; $\mathrm{EM} = n_e^2 V$, 10^{45}см$^{-3}$ – мера эмиссии вспышечной плазмы (n_e – среднее значение концентрации электронов плазмы в объеме излучающей области V).

Выражение (1) позволяет определять температуру и меру эмиссии на основе измеренного спектра мягкого рентгеновского излучения.

Обсудим кратко вопрос об однотемпературной модели плазмы в источнике мягкого рентгеновского излучения. Очевидно, что такое распределение температуры в принципе существовать не может. Нагреваемая во вспышке плазма в процессе энерговыделения должна расширяться (при условии, что геометрия области не термоизолирована, но это маловероятно), т. е. должен существовать фронт тепловой волны, на котором происходит изменение температуры вплоть до коронально-хромосферных значений. Однако в высокоионизованной плазме солнечной короны, как показывают гидродинамические расчеты, профиль температуры представляет собой практически однородный высокотемпературный участок с резким градиентом температуры на тепловом фронте.

Таким образом, на стадии нагрева плазмы мягкое рентгеновское излучение формируется в основном в однородно нагретой, высокотемпературной плазме. На стадии спада рентгеновского излучения естественно происходит расширение и охлаждение плазмы в источнике; при этом градиент температуры на фронте уменьшается, и в излучение могут вносить сопоставимый вклад области с непрерывно уменьшающейся температурой. Точный учет изменения температуры требует гидродинамических расчетов нагревания и охлаждения плазмы. В случае же проведения только оценок параметров плазмы можно пользоваться одно- либо двухтемпературным распределением частиц плазмы.

В работах [9, 10], при интерпретации данных измерений в рамках двухтемпературной модели, отмечалось существование высокотемпературного источника. В статье [11], при нахождении дифференциальной меры эмиссии вспышечной плазмы, использовались данные измерений как рентгеновского (RHESSI, более чувствительного к излучению высокотемпературной плазмы), так и ультрафиолетового (EVE) излучений. Для рентгеновского излучения с энергиями квантов выше нескольких кэВ более характерен диапазон значений температуры для высокотемпературной плазмы $T > (1{,}0 - 1{,}5)\cdot 10^7$ К. Поскольку нижний энергетический порог спектрометра «ИРИС» равен 3 кэВ, полученные нами значения параметров плазмы гораздо ближе к значениям высокотемпературной области.

В однотемпературном приближении температура и мера эмиссии вычисляются по измеренному спектру мягкого рентгеновского излучения с использованием выражения (1).

В процессе работы спектрометр регистрирует значения скоростей счета в различных энергетических каналах Ne_i. Расчетное же значение скорости счета Nc_i определяется теоретически при задании конкретного вида спектра фотонов $J(\varepsilon)$ [4]:

$$Nc_i = \int_0^{\infty} \int_{A_i}^{A_{i+1}} p(A, \varepsilon) J(\varepsilon) dA d\varepsilon, \qquad (2)$$

где A_i, A_{i+1} – амплитуды сигналов детекторов, соответствующие нижней и верхней границе i-го канала; $i = 1, 2, ..., I_{\max}$ ($I_{\max}$ – количество каналов регистрации); $p(A, \varepsilon)$ – приборная функция, учитывающая эффективную площадь детектора, а также вероятность того, что при регистрации кванта с энергией ε амплитуда сигнала, вырабатываемая детекторами, будет иметь величину A (определяется энергетическим разрешением детектора); $J(\varepsilon)$ – дифференциальный поток рентгеновского излучения на орбите Земли (см. выражение (1)).

Параметры распределения (1), а именно температура T и мера эмиссии EM определялись по критерию минимизации «хи-квадрат»; последний вычислялся по формуле

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{i=32} (Ne_i - Nb_i - Nc_i)^2 / (Nc_i + Nb_i), \qquad (3)$$

где Ne_i – количество импульсов, экспериментально зарегистрированное в i-м канале; Nb_i – их фоновое количество; Nc_i – их расчетное количество.

Температура и мера эмиссии подбирались таким образом, чтобы значение критерия минимизации хи-квадрат было минимальным.

Фактор фонового излучения. Фоновое количество импульсов Nb_i необходимо определять для каждой вспышки в момент ее развития.

Представленные ниже временные зависимости температуры и меры эмиссии были получены после вычитания фона. В качестве фоновых брались скорости счета в энергетических каналах детектора примерно за 5 мин до взрывной фазы вспышки.

Мы считали, что фон определяется рентгеновским излучением плазмы активной области (активных областей) на предвспышечной стадии, которое имеет мягкий спектр (квазитепловое излучение с корональной температурой), а также магнитосферным фоном с более жестким спектром (тормозное излучение энергичных электронов). Однако просто разделить эти компоненты невозможно. О влиянии этих составляющих фона можно косвенно судить по изменению параметров спектра рентгеновского излуче-

ния в процессе развития вспышки. Если фон определяется излучением плазмы активных областей с более мягким спектром, то при его вычитании разностный спектр получится жестче начального спектра и, напротив, при вычитании магнитосферного фона разностный спектр получится мягче начального спектра.

Так например, при определении параметров плазмы по рентгеновскому излучению вспышки B1 температура в максимуме вспышки была на 10 – 15 % ниже (т. е. спектр излучения становился мягче) без вычета фона, а мера эмиссии оказывалась в 1,5 – 2 раза выше, чем при определении тех же параметров с вычетом фона.

На стадии спада рентгеновского излучения температура уменьшается до значений 1,1 – 1,3 кэВ и затем остается постоянной, в то время как при определении параметров с вычетом фона температура равномерно уменьшается до значений ниже 0,5 кэВ. Это говорит о том, что на указанной стадии уже становится значимым вклад жесткого магнитосферного фонового излучения, в то время как на фазе максимума вспышки ее излучение в жестких каналах более чем на порядок превышает магнитосферный фон.

Динамика температуры и меры эмиссии вспышек B1 и B2

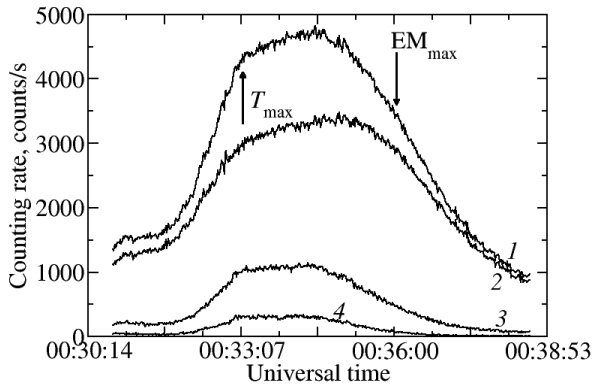
Проанализируем динамику изменения температуры и меры эмиссии плазмы для двух рассматриваемых вспышек. Динамика интегральных скоростей счета приведены на рис. 1. Временной профиль B1 в четырех каналах энергии от 2,9 до 14,4 кэВ (рис. 1, *a*) практически симметричный: время роста и спада вспышечного излучения составляет около 1,5 мин с длительным пиком. Временной профиль B2 несимметричный: стадия роста длится 1,5 – 2,0 мин, а стадия спада – более 5 мин. Интенсивность ЖРИ, измеренная спектрометром «ИРИС», для обеих вспышек не превышает таковой для фонового излучения в данном диапазоне.

Рассмотрим теперь временные профили температуры вспышечной плазмы и меры эмиссии исследуемых вспышек, полученные по ранее описанной методике.

Вспышка B1. На рис. 2 приведены полученные зависимости T и EM от времени для вспышки B1.

Для B1 следует выделить стадию преднагрева компактной области (с малой мерой эмиссии) до температуры $2 \cdot 10^7$ K, за которой следует охлаждение в течение 1,5 мин, причем оно сопровождается непрерывным ростом меры эмиссии. Значение температуры $2 \cdot 10^7$ K сравнимо с температурой в максимуме вспышки. Далее, начиная с момента 00:31:41UT, развивается основная стадия энерговыделения вспышки, которая сопровождается ростом потока рентгеновского излучения, температуры и меры эмиссии. Рост температуры продолжался до начала фазы максимального потока, после чего следовало плавное паде-

a)



b)

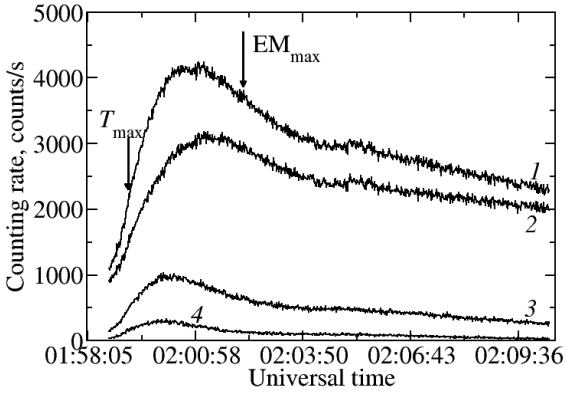


Рис. 1. Динамика интегральных скоростей счета для вспышек B1 (*a*) и B2 (*b*) в четырех энергетических каналах: 2,9 – 14,4 кэВ (кривые *1*); 2,9 – 6,5 кэВ (*2*); 6,5 – 10,4 кэВ (*3*); 10,4 – 14,4 кэВ (*4*)

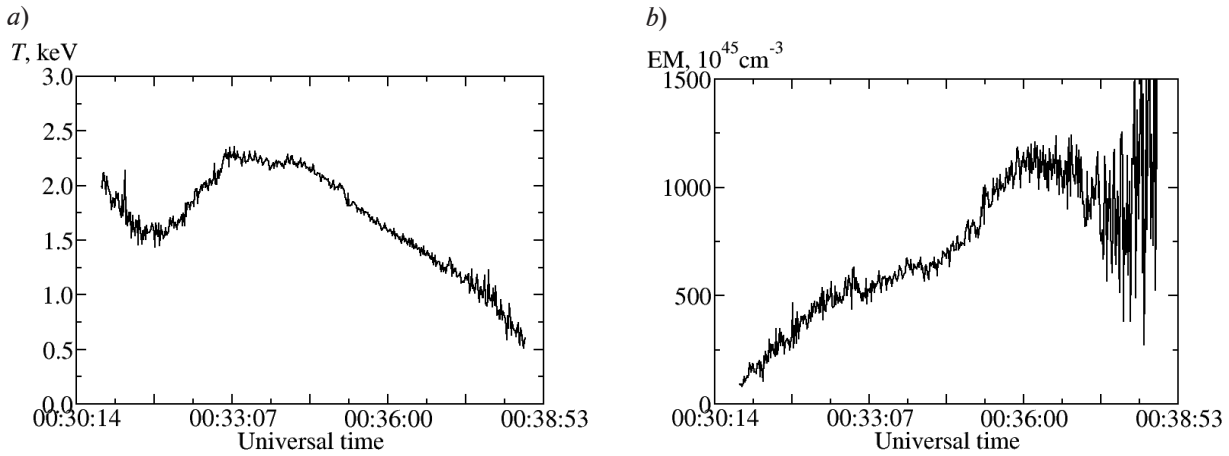


Рис. 2. Временные профили температуры (*a*) и меры эмиссии (*b*) вспышки B1

ние температуры, ускорившееся с началом спада потока рентгеновского излучения, которое наступало в момент 00:35UT. При этом некоторое уменьшение меры эмиссии (сопровождаемое ускоренным ростом температуры) к моменту времени 00:33UT свидетельствует в пользу того, что в это время происходит выделение энергии в некоторой локальной области. Снижение температуры на стадии максимума потока не было плавным и имело два локальных максимума, что говорит о кратном выделении энергии в этой вспышке. Мера эмиссии возрастала вплоть до начала спада скорости счета, достигнув значения около $1{,}2\cdot10^{48}$ см$^{-3}$, затем стала уменьшаться только на стадии глубокого спада потока рентгеновского излучения и снижения температуры до 1,5 кэВ ($\approx1{,}7\cdot10^{7}$ K) начиная с момента 00:37UT. **Широкий разброс** значений меры эмиссии на последней стадии вспышки связан с уменьшением рентгеновского потока и, как следствие, — с недостаточной статистикой.

Вспышка B2. Рассмотрим восстановленные значения температуры и меры эмиссии вспышки B2 (рис. 3).

В самом начале взрывной фазы происходит резкий рост температуры и увеличение меры эмиссии вспышечной плазмы. Температура достигла максимума, равного $2{,}5\cdot10^{7}$ K в середине стадии роста потока рентгеновского излучения (отмечена стрелкой на рис. 1, *b*).

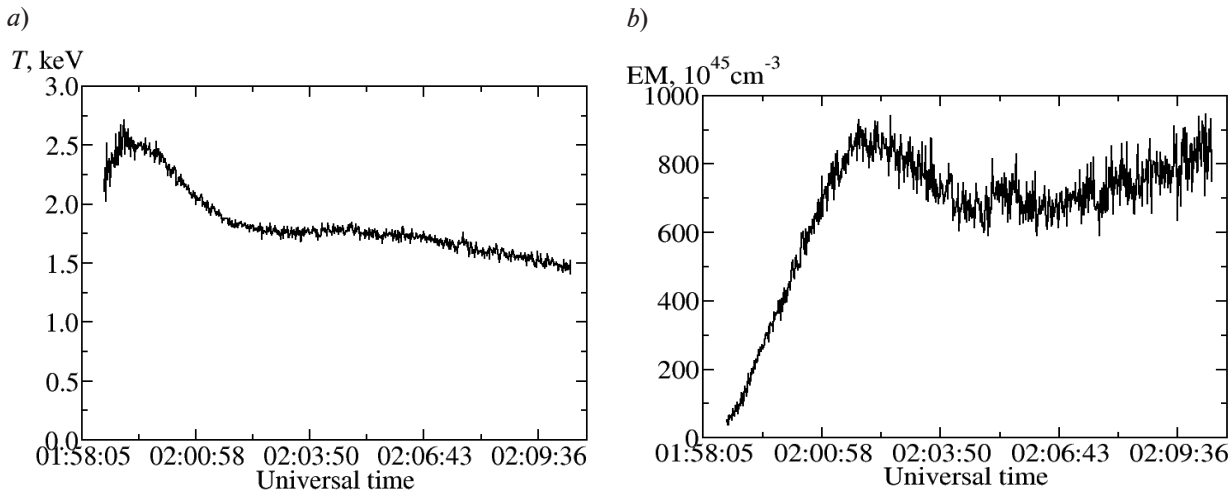


Рис. 3. Временные профили температуры (*a*) и меры эмиссии (*b*) вспышки B2

В дальнейшем температура довольно резко снижалась до начала спада мягкого рентгеновского излучения, после чего темп падения замедлился. На фазе спада вспышки наблюдалось локальное повышение рентгеновского потока, температуры и меры эмиссии, что свидетельствует о дополнительном энерговыделении. Мера эмиссии равномерно возрастала до начала спада рентгеновского потока, а затем уменьшалась до момента локального всплеска в момент времени около 02:05UT; после этого она показывала плавный рост.

Обсуждение результатов

Регистрация мягкого рентгеновского излучения во время вспышек 29.06. 2002 года и 27.03. 2003 года (B1 и B2) рентгеновским спектрометром «ИРИС» позволила определить динамику температуры и меры эмиссии плазмы. Следует подчеркнуть, что динамики скорости счета, температуры и меры эмиссии в этих событиях существенно различаются. Так, динамика процессов во время вспышки B1 свидетельствует о наличии стадии преднагрева плазмы, возникновении горячей (температура достигает $2 \cdot 10^7$ K) компактной области. Фаза развития основного процесса энерговыделения сопровождается ростом как температуры, так и меры эмиссии. При этом момент достижения температурного пика практически совпадает с началом максимума скорости счета, а момент достижения максимума EM лежит на временном промежутке, расположенном на стадии спада потока. Подобная динамика свидетельствует о непрерывном энерговыделении во время данной солнечной вспышки вплоть до максимума потока с последующим тепловым расширением горячей плазмы.

Несколько иной характер процессов нагревания и охлаждения плазмы отмечен во вспышке B2: стадия преднагрева отсутствует, температура плазмы непрерывно растет и достигает максимума, значительно опережая по времени пик скорости счета при продолжающемся росте меры эмиссии. Другими словами, рост потока, скорее всего, связан с нагреванием и непрерывным расширением локального высокотемпературного источника. При дальнейшем расширении горячей плазмы происходит снижение температуры. Локальный всплеск меры эмиссии около момента времени 02:05UT указывает на расширение горячей области после акта дополнительного энерговыделения. Об этом акте свидетельствует и небольшой рост температуры перед этим максимумом.

Результаты регистрации рентгеновского излучения на космической станции RHESSI показывают, что процесс энерговыделения для ряда вспышек начинается в локальной области, расположенной в вершине вспышечной петли. После этого область, излучающая мягкое рентгеновское излучение, расширяется к основаниям магнитной петли (см. например, работу [12]).

Заключение

Высокие значения рабочих параметров спектрометра «ИРИС» (временное разрешение и чувствительность) позволяют детально изучать слабые рентгеновские вспышки на Солнце.

Несмотря на различие сценариев развития описанных вспышек, в обоих случаях просматривается неоднократное энерговыделение. Результаты проведенного анализа подтверждают наличие локальной высокотемпературной области в начале развития солнечных вспышек (см., например, работы [9, 10, 12]). Однако остается неясным вопрос об условиях возникновения стадии преднагрева, т. е. для каких вспышек эта стадия существует, а для каких отсутствует. Чтобы найти ответ на этот вопрос, необходимо дальнейшее изучение вспышек различных рентгеновских классов, а также анализ эволюции температуры и меры эмиссии вспышечной плазмы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Aschwanden M.J.** Particle acceleration and kinematics in solar flares — a synthesis of recent observations and theoretical concepts // Space Sci. Rev. 2002. Vol. 101. No. 1. Pp. 1—227.

2. **Kontar E.P., Brown J.C., Emslie A.G., et al.** Deducing electron properties from hard X-ray

observations // Space Sci. Rev. 2011. Vol. 159. No. 1–4. Pp. 301–355.

3. **Моторина Г.Г., Кудрявцев И.В., Лазутков В.П., Савченко М.И., Скородумов Д.В., Чариков Ю.Е.** К вопросу о реконструкции энергетического распределения электронов, ускоренных во время солнечных вспышек // Журнал технической физики. 2012. Т. 82. Вып. 12. С. 11–15.

4. **Моторина Г.Г., Кудрявцев И.В., Лазутков В.П., Савченко М.И., Скородумов Д.В., Чариков Ю.Е.** Реконструкция энергетического спектра электронов, ускоренных во время солнечной вспышки 15 апреля 2002 г., на основе измерений рентгеновским спектрометром ИРИС // Журнал технической физики. 2016. Т. 86. Вып. 4. С. 47–52.

5. **Guo J., Liu S., Fletcher L., Kontar E.P.** Relationship between hard and soft X-ray emission components of a solar flare // The Astrophysical Journal. 2011. Vol. 728. No. 1. Pp. 1–12.

6. **Матвеев Г.А., Дмитриев П.Б., Кудрявцев И.В., Лазутков В.П., Савченко М.И., Скородумов Д.В., Чариков Ю.Е.** Спектрометр ИРИС: Исследование временной структуры и энергетических спектров рентгеновского излучения солнечных вспышек. //Солнечно-земная физика. Результаты экспериментов на спутнике КОРОНАС-Ф. Под ред. В.Д. Кузнецова. М.: Физматлит, 2009. С. 366 – 400.

7. **Дмитриев П.Б., Кудрявцев И.В., Лазутков В.П., Матвеев Г.А., Савченко М.И., Скородумов Д.В., Чариков Ю.Е.** Особенности рентгеновского излучения солнечных вспышек, зарегистрированных спектрометром «ИРИС» во время полета станции «КОРОНАС-Ф» // Астрономический вестник. 2006. Т. 40. Вып. 2. С. 160–170.

8. **Crannell C.J., Frost K.J., Matzler C., Ohki K., Saba J.L.** Impulsive solar X-ray bursts // The Astrophysical Journal. 1978. Vol. 223. No. 2. Pp. 620–637.

9. **Caspi A., Lin R.P.** RHESSI line and continuum observations of superhot flare plasma // The Astrophysical Journal Letters. 2010. Vol. 725. No. 2. Pp. L161–L166.

10. **Caspi A., Shih A.Y., McTiernan J.M., Krucker S.** Hard X-ray imaging of individual spectral components in solar flares // The Astrophysical Journal Letters. 2015. Vol. 811. No. 1. L1. Pp. 1 – 8.

11. **Caspi A., McTiernan J.M., Warren H.P.** Constraining solar flare differential emission measures with EVE and RHESSI // The Astrophysical Journal Letters. 2014. Vol. 788. No. 2. L31, Pp. 1–6.

12. **Krucker S., Battaglia M., Cargill P.J., et al.** Hard X-ray emission from the solar corona // Astron. Astrophys. Rev. 2008. Vol. 16. No. 3–4. Pp. 155–208.

Статья поступила в редакцию 27.04.2017, принята к публикации 26.06.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

САВЧЕНКО Михаил Иванович – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Mikhail.Savchenko@mail.ioffe.ru

ВАТАГИН Павел Викторович – *младший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
pavelvat@gmail.com

ЛАЗУТКОВ Вадим Петрович – *научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Vadim.Lazutkov@mail.ioffe.ru

СКОРОДУМОВ Дмитрий Всеволодович – *научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Dmitri.Skorodumov@mail.ioffe.ru

КУДРЯВЦЕВ Игорь Владимирович – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Igor.Koudriavtsev@mail.ioffe.ru

ЧАРИКОВ Юрий Евгеньевич – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Yuri.Charikov@mail.ioffe.ru

REFERENCES

[1] **M.J. Aschwanden,** Particle acceleration and kinematics in solar flares – A synthesis of recent observations and theoretical concepts, Space Sci. Rev. 101 (1) (2002) 1–227.

[2] **E.P. Kontar, J.C. Brown, A.G. Emslie, et al.,** Deducing electron properties from hard X-ray observations, Space Sci. Rev. 159 (1–4) (2011) 301–355.

[3] **G.G. Motorina, I.V. Kudryavtsev, V.P. Lazutkov, et al.,** On the reconstruction of the energy distribution of electrons accelerated in solar flares, Tech. Phys. 57 (12) (2012) 1618–1622.

[4] **G.G. Motorina, I.V. Kudryavtsev, V.P. Lazutkov, et al.,** Reconstruction of the energy spectrum of electrons accelerated in the April 15, 2002 solar flare based on IRIS X-ray spectrometer measurements, Tech. Phys. 61 (4) (2016) 525–530.

[5] **J. Guo, S. Liu, L. Fletcher, E.P. Kontar,** Relationship between hard and soft X-ray emission components of a solar flare, The Astrophysical Journal. 728 (1) (2011) 1–12.

[6] **G.A. Matveyev, P.B. Dmitriyev, I.V. Kudryavtsev, et al.,** Spectrometer IRIS: Investigation of the time structure and energy spectra of X-Ray emission from solar flares, CORONAS-F space mission: key results for solar terrestrial physics, Astrophysics and Space Science Library. 400 (2014) 359–391.

[7] **P.B. Dmitriyev, I.V. Kudryavtsev, V.P. Lazutkov, et al.,** Solar flares registered by the IRIS spectrometer on board the CORONAS-F satellite: Peculiarities of the X-ray emission, Solar Syst. Res. 40 (2) (2006) 142–152.

[8] **C.J. Crannell, K.J. Frost, C. Matzler, et al.,** Impulsive solar X-ray bursts, Astrophysical Journal. 223 (2) (1978) 620–637.

[9] **A. Caspi, R.P. Lin,** RHESSI line and continuum observations of superhot flare plasma, The Astrophysical Journal Letters. 725 (2) (2010) L161–L166.

[10] **A. Caspi, A.Y. Shih, J.M. McTiernan, S. Krucker,** Hard X-ray imaging of individual spectral components in solar flares, The Astrophysical Journal Letters, 811 (1) (2015) L1, 1–8.

[11] **A. Caspi, J.M. McTiernan, H.P. Warren,** Constraining solar flare differential emission measures with EVE and RHESSI, The Astrophysical Journal Letters, 788 (2) (2014) L31, 1–6.

[12] **S. Krucker, M. Battaglia, P.J. Cargill, et al.,** Hard X-ray emission from the solar corona, Astron. Astrophys. Rev. 16 (3–4) (2008) 155–208.

Received 27.04.2017, accepted 26.06.2017.

THE AUTHORS

SAVCHENKO Mikhail I.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
Mikhail.Savchenko@mail.ioffe.ru

VATAGIN Pavel V.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
pavelvat@gmail.com

LAZUTKOV Vadim P.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
Vadim.Lazutkov@mail.ioffe.ru

SKORODUMOV Dmitriy V.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
Dmitri.Skorodumov@mail.ioffe.ru

KUDRYAVTSEV Igor V.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
Igor.Koudriavtsev@mail.ioffe.ru

CHARIKOV Yuriy E.
The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
Yuri.Charikov@mail.ioffe.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Алексеева О.А. **18**
Аниконов Д.С. **84**
Антонов В.И. **26**
Бхаткар В.Б. **64**
Васильев Г.И. **140**
Ватагин П.В. **152**
Делхош М. **100**
Джайсвал С.Р. **64**
Зайцев Д.К. **52**
Ильинский А.В. **9**
Калинин Н.В. **26**
Киприянов Я.А. **84**
Кислицына И.А. **38**
Колесник Е.В. **123**
Коновалова Д.С. **84**
Копаркар К.А. **64**
Кудрявцев И.В. **152**
Лазутков В.П. **152**
Ларионов Н.В. **75**
Малыхина Г.Ф. **38**
Набережнов А.А. **18**
Нагуре П.А. **64**
Овчинникова Е.П. **140**
Оманвар С.К. **64**
Паранд К. **100**
Пашкевич М.Э. **9**
Пожилов А.А. **52**
Ряховский А.И. **26**
Савала Н.С. **64**
Савченко М.И. **152**
Серёгин С.В. **116**
Симкин В.Г. **18**
Скородумов Д.В. **152**
Смирнов Е.М. **52, 123**
Смирнов П.О. **95**
Смирновский А.А. **52**
Стукова Е.В. **18**
Чариков Ю.Е. **140, 152**
Шабалин А.Н. **140**
Шадрин Е.Б. **9**
Шевляков Г.Л. **95**
Широков И.С. **95**

Научное издание

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
ТОМ 10, № 3, 2017**

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* – ответственный секретарь
канд. физ.-мат. наук *О.А. Ящуржинская* – научный редактор, корректор
А.С. Колгатина – переводчик
Н.А. Бушманова – технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

Сайт http://ntv.spbstu.ru

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *А.Н. Смирнова*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 19.09.2017. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 20,5. Уч.-изд. л. 20,5. Тираж 1000. Заказ

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Издательство Политехнического университета,
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

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, Астрономия**. Научные направления журнала учитываются ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников.

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 базе данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

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 2007 – 2010, формул – в редакторе MS Equation или MathType. Таблицы набираются в том же формате, что и основной текст.

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 пере- носов. 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 – Наталья Александровна
или по e-mail: physics@spbstu.ru