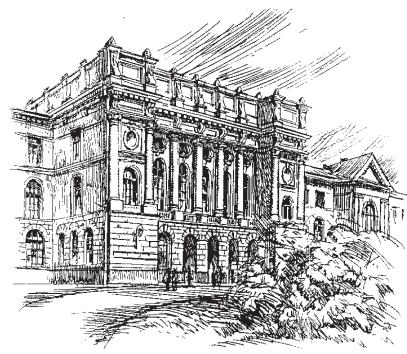


2(98)/2010



Научно-технические ведомости СПбГПУ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

Санкт-Петербург. Издательство Политехнического Университета

Федеральное агентство по образованию
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ СПбГПУ

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

*Алферов Ж.И., академик РАН; Васильев Ю.С., академик РАН (председатель);
Костюк В.В., академик РАН; Лопота В.А., чл.-кор. РАН;
Окрепилов В.В., чл.-кор. РАН; Патон Б.Е., академик РАН и НАН Украины;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН; Федоров М.П., чл.-кор. РАН;
Фортов В.Е., академик РАН.*

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

*Васильев Ю.С., академик РАН (главный редактор); Арсеньев Д.Г., д-р техн. наук, профессор;
Бабкин А.В., д-р экон. наук, профессор (зам. гл. редактора);
Боронин В.Н., д-р техн. наук, профессор; Глухов В.В., д-р экон. наук, профессор;
Дегтярева Р.В., д-р истор. наук, профессор; Иванов А.В., д-р техн. наук, профессор;
Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор; Козловский В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН (зам. гл. редактора); Юсупов Р.М., чл.-кор. РАН.*

СЕРИЯ “ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ”

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ СЕРИИ

*Алферов Ж.И., академик РАН — председатель;
Варшалович Д.А., академик РАН;
Глухих В.А., академик РАН;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН — зам. председателя;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН — зам. председателя;
Рыбин В.В., чл.-кор. РАН;
Сурик Р.А., академик РАН;
Финкельштейн А.М., чл.-кор. РАН.*

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ СЕРИИ

*Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор — председатель;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент — отв. секретарь;
Кожевников Н.М., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Козловский В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Острыakov В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Самойлов В.О., чл.-кор. РАМН;
Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор — зам. председателя.*

Журнал выходит под научно-методическим руководством Российской академии наук с 1995 г.

Журнал включен в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук.

Журнал издается в пяти сериях:

*Наука и образование;
Физико-математические науки;
Экономические науки;
Информатика, телекоммуникации, управление;
Гуманитарные и общественные науки.*

Журнал зарегистрирован в Госкомпечати РФ. Свидетельство № 013165 от 23.12.94.

Подписной индекс 18390 в каталоге “Газеты. Журналы” Агентства “Роспечать”.

Журнал включен в базу данных “Российский индекс научного цитирования” (РИНЦ), размещенную на платформе Национальной электронной библиотеки на сайте <http://www.elibraru.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, 29.
Тел. редакции серии (812) 294-22-85.

© Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет, 2010



Содержание

Физика конденсированного состояния

Масловская А.Г., Ванина Е.А. Упорядоченное движение доменных границ сегнетоэлектрических кристаллов в неоднородном тепловом поле	7
Аграфонов Ю.В., Зеленцов Н.А., Меленчук И.А., Петрушин В.С., Петрушин И.С. Модификация синглетного приближения статистической теории поверхностных явлений.....	11
Бакаев А.В., Журкин Е.Е. Моделирование первичных радиационных дефектов в карбиде кремния при бомбардировке ионами и кластерами углерода	17
Смирнов Д.С., Петров П.В. Моделирование плотности состояний в двумерной системе заряженных примесей.....	23
Апушкинский Е.Г., Попов Б.П., Соболевский В.К. Флуксоидные колебания и волны во внутренней области высокотемпературных сверхпроводников	27

Математическое моделирование физических процессов

Первадчук В.П., Шумкова Д.Б. Оптимальное управление в задачах с подвижным тепловым источником.....	37
Цаплин А.И., Бояршинов М.Г. Моделирование переноса метана в атмосфере и оценка возможности его детонации при аварийном сбросе давления в газопроводе	45
Жгутов В.М. Математические модели, алгоритм исследования и анализ устойчивости ребристых оболочек с учетом ползучести материала при конечных прогибах	53
Арсеньев Д.Г., Иванов В.М., Берковский Н.А. Адаптивный метод существенной выборки при ограниченном числе шагов бисекционного процесса	59

Физика молекул, кластеров и наноструктур

Степанова Т.П., Артамонова А.С., Капралова В.М. Диэлектрические свойства и конформация блок-сополимеров поли- <i>γ</i> -бензил- <i>L</i> -глутамата и полиметилметакрилата в разбавленном растворе	68
---	----

Математическая физика

Цаплин А.И., Никулин И.Л. Математическое моделирование нестационарных режимов затвердевания монокристаллических лопаток газотурбинных двигателей.....	76
Абдуллаев А.Р., Плехова Э.В., Савочкина А.А. Разрешимость квазилинейного уравнения с монотонным оператором.....	80
Иордан В.И., Соловьев А.А. Редукция температурного распределения частиц гетерогенных потоков методом «обращения» их интегрального теплового спектра.....	85

Физическая оптика

Ильин Н.В., Кизеветтер Д.В. Метод возбуждения оптических вихрей в градиентных волоконных световодах	96
Фадеев Д.А., Сетейкин А.Ю. Анализ многократного рассеяния лазерного излучения в биологических средах с пространственными флюктуациями оптических параметров	102



Физическое материаловедение

Голубева И.А., Ланкин С.В., Ванина Е.А., Киселёва А.Н. Влияние термической закалки на диэлектрические свойства керамических оксидных материалов	107
Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Описание внутризеренного и зернограничного упрочнения моно- и поликристаллов	110

Приборы и техника физического эксперимента

Спирин Д.О., Бердников Я.А., Гавриш Ю.Н. Принципы интроскопии крупногабаритных грузов ...	120
Кафидова Г.А., Мокрова Д.В. Возможности неконтактной регистрации пульсовой волны дифференциальным спектр-датчиком.....	127
Краснов А.В., Парфенов В.А. Источник питания полупроводниковых лазерных диодов.....	131

Ядерная физика

Бердников Я.А., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Самсонов В.М. Рождение ф-мезонов в столкновениях ядердейтерия и золота при энергии 200 ГэВ.....	135
---	-----

Дискуссионные вопросы и гипотезы

Галль Л.Н., Галль Н.Р. Коллективные процессы в биомолекулярных системах	141
--	-----

Хроника

Кесаманлы Ф.П. Академик Абрам Фёдорович Иоффе (к 130-летию со дня рождения)	152
Сведения об авторах, контактные данные.....	159
Аннотации, ключевые слова	163



Contents

Condensed matter physics

Maslovskaya A.G., Vanina E.A. <i>The ordered motion of ferroelectric crystal domain walls in the nonuniform thermal field</i>	7
Agrafonov Yu.V., Zelentsov N.A., Melenchuk I.A., Petrushin V.S., Petrushin I.S. <i>The singlet approach adaptation of the statistical theory of surface phenomena</i>	11
Bakaev A.V., Zhurkin E.E. <i>A simulation of primary radiation defects in silicon carbide bombarded by carbon ions and clusters</i>	17
Smirnov D.S., Petrov P.V. <i>The states density simulation in 2D-system of charged impurities</i>	23
Apushkinskiy E.G., Popov B.P., Sobolevskiy V.K. <i>The fluxoid oscillations and waves in the interior space of the HTSC</i>	27

Simulation of physical processes

Pervadchuk V.P., Shumkova D.B. <i>An optimal control in the problems with a mobile thermosource</i>	37
Tsaplin A.I., Boyarshinov M.G. <i>A simulation of methane transfer in the atmosphere and an estimation of its detonation opportunity when jettisoning pressure in the gas pipeline</i>	45
Zhgoutov V.M. <i>Mathematical models, the research algorythm and the ribbed shells steadiness analysis taking into account the creeping of the material at finite bending flexures</i>	53
Arseniev D.G., Ivanov V.M., Berkovskiy N.A. <i>An adaptive importance sampling method with the bounded step number of the bisection process</i>	59

Physics of molecules, clusters and nanostructures

Stepanova T.P., Artamonova A.S., Kapralova V.M. <i>Dielectric properties and conformation of poly-γ-benzyl-L-glutamate and polymethylmethacrylate block-copolymers in dilute solution</i>	68
--	----

Mathematical physics

Tsaplin A.I., Nikulin I.L. <i>Mathematical simulation of nonstationary hardening process of turbine engines single crystal blades</i>	76
Abdullaev A.R., Plekhova E.V., Savochkina A.A. <i>The solvability of quasilinear equation with monotone operator</i>	80
Jordan V.I., Soloviev A.A. <i>The reduction of temperature particles distribution of heterogeneous flows by «the inverse» of their integrated thermal spectrum</i>	85

Physical optics

Il'in N.V., Kiesewetter D.V. <i>Method of optical vortices excitation in graded index optical fibers</i>	96
Fadeev D.A., Seteikin A.Yu. <i>An analysis of the multiple scattering of laser emission in biological environments of optical parameters fluctuated spattially</i>	102

Physical materials technology

Golubeva I.A., Lankin S.V., Vanina E.A., Kiselyova A.N. <i>The influence of heat treatment on dielectric properties of ceramic oxide materials</i>	107
Trusov P.V., Volegov P.S., Yantz A.Yu. <i>A description of intragrain and intergranular hardening in mono- and polycrystals</i>	110

Experimental technique and devices

Spirin D.O., Berdnikov Ya.A., Gavrilov Yu.N. <i>Some concepts of large-size cargoes radioscopy</i>	120
Kafidova G.A., Mokrova D.V. <i>Some possibilities of noncontact pulse waves recording with the differential speckle-sensor</i>	127
Krasnov A.V., Parfenov V.A. <i>Semiconductor laser diodes power supply</i>	131

Nuclear physics

Berdnikov Ya.A., Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Riabov V.G., Riabov Yu.G., Samsonov V.M. <i>Phi-meson production in deuterium and gold nuclei collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200 \text{ GeV}$</i>	135
--	-----

Papers open to questions and hypotheses

Gall L.N., Gall N.R. <i>Collective processes in the bio-molecular systems</i>	141
--	-----

Chronicle

Kesamanly F.P. <i>Abram Fyodorovich Ioffe as a member of the Academy of Science of the USSR (on the occasion of his 130th birthday)</i>	152
<i>About the authors, contact information</i>	159
<i>Abstracts, key words</i>	167



Физика конденсированного состояния

УДК 537.226.4, 538.956

А.Г. Масловская, Е.А. Ванина

УПОРЯДОЧЕННОЕ ДВИЖЕНИЕ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ В НЕОДНОРОДНОМ ТЕПЛОВОМ ПОЛЕ

Одной из важных задач физики сегнетоэлектриков является изучение динамики доменных и межфазных границ. При отклонении температуры двухфазной системы от равновесной различие термодинамических потенциалов фаз приводит к появлению термодинамической силы, действующей на фазовую границу. Такая же ситуация имеет место в полидоменном кристалле в электрическом поле. Однако не только объем, но и граница раздела фаз обладает избыточной энергией, что приводит к появлению лапласовских сил.

В отсутствие векторного воздействия, например электрического поля, энергетическое состояние различных доменов оказывается эквивалентным, и к движению доменных границ могут приводить поверхностные силы. Так, в работе Л.И. Донцовой и Э.С. Попова [1] приведены исследования спонтанного движения доменных границ под действием лапласовских сил. Следует заметить, что не только кривизна доменной стенки, но и зависимость поверхностной энергии данной стенки от температуры в неоднородном тепловом поле будет приводить к возникновению термодинамических сил, а это в свою очередь вызывает ее смещение.

Большинство исследований в этой области основывались на рассмотрении кинетики доменных и межфазных границ с макроскопической точки зрения. В макроскопические модели кроме термодинамических сил вводят феноменологические силы вязкости различной природы (сухого, вязкого трения), иногда – инерции [2].

Феноменологическое описание процессов движения доменных границ под действием термодинамических сил использовалось при описании и моделировании процессов переполяри-

зации В.М. Рудяком [3], А.В. Шильниковым [4], В.И. Алешиным [5], С.А. Кукушкиным [6] и др.

Цели данной работы – построение статистической модели фазовой границы, исследование ее поведения в неоднородном тепловом поле и установление связи между микроскопическими параметрами модели и макроскопическими величинами.

Для кристаллов с фазовыми переходами второго рода зависимость удельной поверхностной энергии σ от температуры T имеет вид [7]:

$$\sigma = \sigma_0 (T_C - T)^{3/2}, \quad (1)$$

где T_C – температура Кюри, σ_0 – константа.

В области с более высокой температурой поверхностная энергия стенки уменьшается, это приводит к появлению термодинамической силы, направленной вдоль градиента температуры.

Рассматривалось простейшее тепловое поле с линейным распределением температуры:

$$T(z) = T_0 + \alpha z, \quad (2)$$

где T_0 – температура для исходного положения границы, $\alpha = \partial T / \partial z$ – градиент температуры.

Задачу о моделировании равновесной конфигурации в поле линейного градиента температуры можно сформулировать как вариационную задачу о минимизации функционала:

$$\begin{aligned} \Phi(z(x, y)) &= \iint_S \sigma(x, y, z) dS = \\ &= \iint_D \sigma(x, y, z) \sqrt{1 + z'_x^2 + z'_y^2} dx dy, \end{aligned} \quad (3)$$

или в двумерном случае, с учетом (1):

$$\Phi(z(x)) = \int_0^{x_0} \alpha \sigma_0 (z_0 - z)^3 \sqrt{1 + z'^2} dx, \quad (4)$$

с граничными условиями $z(0) = z(x_0) = 0$.

Такой подход требует решения уравнения Эйлера, которое в общем случае не разрешается известными аналитическими методами и требует привлечения численных процедур.

При моделировании формы доменной границы был использован метод статистических испытаний – метод Монте-Карло. В основу модели положено два принципа: случайные колебания (флуктуации) элементов границы и различие вероятностей каждого состояния в зависимости от его энергии. В первой модели предполагалась цилиндрическая форма границы с закрепленными краями (рис. 1). Профиль доменной границы разбивался на звенья. Для единичной толщины кристалла элементарная площадка доменной границы ΔS_i соответствовала длине звена, а изменение объема ΔV_i домена – изменению площади под звеном на плоскости xz . Каждому звену при помощи генератора случайных чисел задавалось виртуальное перемещение Δz_i в направлении градиента температуры, которое выбиралось случайным образом из интервала $(-\Delta z_0, +\Delta z_0)$. В простейшей модели величина Δz_i принимала дискретные значения: $-\Delta z_0, 0, +\Delta z_0$, с равной вероятностью ($\Delta z_0 \ll \Delta x$). Такое случайное перемещение звена соответствует малым тепловым флуктуациям положения доменной стенки.

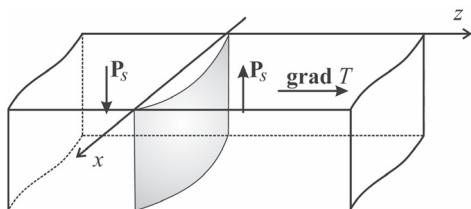


Рис. 1. Конфигурация доменной границы

На следующем этапе вычислялось изменение энергии границы, обусловленное как изменением ее площади, так и изменением температуры ее частей. Энергия каждого звена границы W_i вычислялась по следующему соотношению (для единичной толщины кристалла):

$$W_i = \sigma_i \Delta S_i, \Delta S_i = \sqrt{\Delta x^2 + (z_i - z_{i-1})^2}, \quad (5)$$

где ΔS_i – площадь левого звена i -го узла, z_i – координата узла i , σ_i – поверхностная энергия звена, вычисляемая согласно выражению (1).

Энергия каждого звена определялась по температуре в его средней точке. Значения энергии новой и старой конфигураций сравнивались для двух звеньев. Актуализация виртуального перемещения проводилась с вероятностью p , зависящей от изменения энергии в соответствии с распределением Больцмана. Новое состояние принималось с вероятностью

$$p = \frac{\exp(-\Delta W / \theta)}{1 + \exp(-\Delta W / \theta)}, \quad (6)$$

где p – вероятность реализации нового состояния, W_0 – энергия исходного состояния, ΔW – изменение энергии, θ – параметр, имеющий смысл кинетической температуры.

Такой подход давал возможность принять энергетически менее выгодную структуру, но с меньшей вероятностью. Различие вероятностей состояний с различной энергией обеспечивало стохастическое движение доменной стенки к положению с минимальной энергией. Модель позволяет получить равновесное положение границы, а также наблюдать динамику достижения положения равновесия.

Аналогично понятию критического размежа зародыша введем понятие критического шага Δz_{kp} . При достаточно большом шаге Δz_0 изменение энергии за счет увеличения длины границы будет превышать ее изменение, вызванное повышением температуры, что, в свою очередь, приведет к невозможности движения границы. Приращение длины звена при малом смещении узла на Δz_0 выражается как

$$\Delta l = l - \Delta x \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta z_0}{\Delta x} \right)^2 \Delta x, \quad (7)$$

где Δx – расстояние между узлами.

При смещении узла плоской границы вдоль градиента температуры возникает два конкурирующих фактора – рост энергии за счет увеличения длины звена Δl и ее снижение за счет повышения средней температуры звена (температуры его средней точки), определяемых равенствами:

$$\Delta W_1 = \sigma(T_i) \Delta l \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta z_0}{\Delta x} \right)^2 \Delta x \sigma(T_i),$$



$$\Delta W_2 \approx (\sigma(T_{i+1}) - \sigma(T_i))\Delta x \approx \frac{1}{2} \frac{d\sigma}{dT} \alpha \Delta z_0 \Delta x. \quad (8)$$

Критическое значение для Δz_0 можно определить из равенства $\Delta W_1 + \Delta W_2 = 0$ с учетом выражений (1) и (2):

$$\Delta z_{kp} = \frac{3}{2} \alpha \Delta x^2 \frac{1}{T_C - T}. \quad (9)$$

Для движения границы вдоль градиента температуры необходимо выполнения условия малых флуктуаций границы: $\Delta z_0 < \Delta z_{kp}$. Для эффективного отбора энергетически выгодных конфигураций необходимо также работать при низкой кинетической температуре, масштабом для которой может быть «характеристическая температура», определяемая какой-либо характерной энергией процесса, например, $\theta_{xap} = \Delta W_2$ при $\Delta z_0 = \Delta z_{kp}$. Отбор будет достаточно эффективен при $\theta < \theta_{xap}$. Вводя нормированные величины $T_C = 0$, $T_0 = -1$, $\alpha = 0,02$, $\Delta x = 1$, $\sigma_0 = 1$, получим критические значения для $\Delta z_{kp} = 0,03$ и $\theta_{xap} = 4,5 \cdot 10^{-4}$.

Однако закрепление краев доменных границ создает искривление профиля, влияющее на ее динамику. Поэтому была введена в рассмотрение модель незакрепленной границы, которая позволяет выявить основные закономерности ее движения, обусловленные наличием термодинамических сил. Реализация компьютерной модели динамики свободной доменной границы в неоднородном тепловом поле проведена в пакете прикладных программ Matlab. Анимация последовательных положений границы наблюдалась на мониторе компьютера (рис. 2).

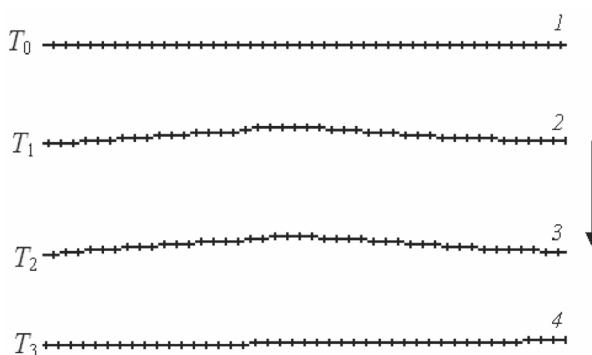


Рис. 2. Изменение степени упорядоченности при движении доменной границы

В поле постоянного градиента температуры следовало бы ожидать монотонный характер движения границы. Однако вычислительные эксперименты показали, что скорость границы в определенном диапазоне параметров модели имеет пульсирующий характер (рис. 3). Положение кривой, глубина и период пульсаций зависят от числа точек разбиения границы N и параметров θ и Δz_0 . Чем меньше параметр θ , тем более четко выражены пульсации скорости (кривая 1). На рис. 2 видно, что по мере движения границы количество ее «несовершенств» периодически изменяется. В начальный момент времени доменная граница представляет собой упорядоченную структуру; при движении стенки со временем происходит накопление изломов и степень ее совершенства снижается. В дальнейшем стенка вновь выравнивается.

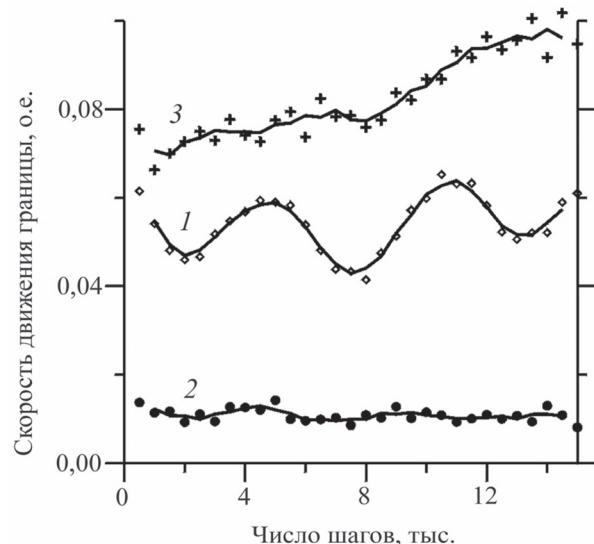


Рис. 3. Зависимость скорости дрейфа границы от числа звеньев N и кинетической температуры θ :
 1 – $N = 100$, $\theta = 2 \cdot 10^{-5}$; 2 – $N = 100$, $\theta = 2 \cdot 10^{-3}$;
 3 – $N = 20$, $\theta = 2 \cdot 10^{-5}$

На основе установленных закономерностей поведения модели целесообразно ввести критерий, характеризующий несовершенство стенки. Таким критерием может служить степень разупорядоченности доменной границы (далее мы используем термин «энтропия», хотя эта величина не является общепринятым термодинамическим потенциалом). Если доменная стенка содержит N узлов и каждые из n_1, n_2, \dots, n_k узлов лежат на

одной прямой, причем $N = \sum n_i$, то «энтропию» стенки определим как

$$S = \ln \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_k!}. \quad (10)$$

Очевидно, что энтропия минимальна и равна нулю, когда доменная граница не имеет изломов – все узлы принадлежат одной прямой. И наоборот, при наличии изломов энтропия больше. При реализации модели наблюдалось периодическое изменение скорости и энтропии. Результаты моделирования представлены на рис. 4. Видно, что имеет место корреляция между кривой, соответствующей изменению скорости, и кривой, определяющей энтропию. В частности, минимальному значению энтропии соответствует максимальная скорость.

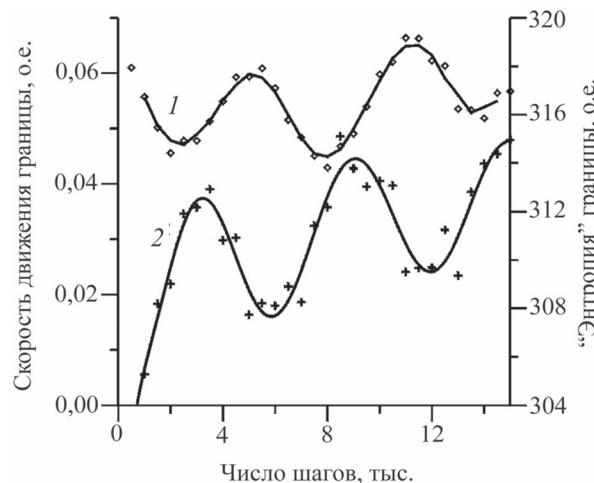


Рис. 4. Автоколебания скорости (1) и энтропии (2) в процессе движения границы; $N = 100$, $\theta = 2 \cdot 10^{-5}$

Возникновение автоколебаний и связь скорости движения границы с ее энтропией нетрудно понять: после начала движения степень неупорядоченности стенки нарастает, при значительном числе изломов перемещение многих узлов вперед становится энергетически невыгодным. В этой ситуации реализуются, в основном, перемещения, которые выпрямляют стенку, после чего вновь возможным оказывается увеличение ее скорости. При увеличении параметра θ эффективность отбора энергетически выгодных шагов (вперед) снижается, что приводит к снижению скорости движения границы и гашению ее пульсаций.

Элементы самоорганизации возникают и в моделях, построенных на иных принципах, в частности, при моделировании движения доменной границы в электрическом поле [8]. В этом случае изменение энергии при смещении границы (возникновении на ней зародыша), обусловлены не только поверхностной, но и объемной энергией.

Таким образом, предложенная статистическая модель доменной границы, базирующаяся на основных принципах физики макроскопических систем, позволяет получить равновесную форму доменной границы в тепловом поле и исследовать ее динамику. Модель, построенная на монотонных принципах поведения каждого звена, при определенных параметрах модели обнаруживает элементы самоупорядоченности движения, проявляющиеся в возникновении автоколебаний скорости и энтропии. Предложенный подход позволяет также оценить вклад дополнительной компоненты пироимпульса, который обусловлен движением доменной границы в неоднородном тепловом поле.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Донцова, Л.И.** Плотность поверхностной энергии и спонтанное движение доменных стенок в кристаллах ТГС [Текст] / Л.И. Донцова, Э.С. Попов // Изв. АН СССР. Сер. физ. – 1975. – Т. 39. – С. 854–856.
2. **Ломаев, Г.В.** Моделирование больших скачков Баркгаузена [Текст] / Г.В. Ломаев, С.П. Ахизиана, Т.Е. Глушкова // Физика металлов и металловедение. – 1997. – № 5. – С. 461–465.
3. **Рудяк, В.М.** Процессы переключения в нелинейных кристаллах [Текст] / В.М. Рудяк. – М.: Наука, 1986 – 248 с.
4. **Shilnikov, A.V.** Simulation motion of domain and interphase boundaries and their contribution to the dielectric properties of ferroelectrics [Text] / A.V. Shilnikov, V.N. Nesterov, A.I. Burkhanov // Ferroelectrics. – 1996. – Vol. 175. – P. 145–151.
5. **Алешин, В.И.** Моделирование переполяризации кристалла и керамики типа BaTiO_3 [Текст] / В.И. Алешин, А.Г. Лучанинов // Изв. АН. Сер. физ. – 2001. – Т. 65. – № 8. – С. 1114–1118.
6. **Кукушкин, С.А.** Термодинамика и кинетика начальных стадий переключения в сегнето-



электриках [Текст] / С.А. Кукушкин, А.В. Осипов // ФТТ. – 2001. – Т. 43. – № 1. – С. 80–87.

7. Струков, Б.А. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах [Текст] / Б.А. Струков, А.П. Леванюк. – М.: Наука, 1995. – 304 с.

8. Shur, V.Ya. Formation of self-organized nanoscale domain patterns during spontaneous backswitching in lithium niobate [Text] / V.Ya. Shur, E.L. Rumyantsev, E.V. Nikolaeva [et al.] // Ferroelectrics. – 2001. – Vol. 253. – P. 105–114.

УДК 536.7; 538.956; 541.12; 541.67

Ю.В. Аграфонов, Н.А. Зеленцов, И.А. Меленчук,
В.С. Петрушин, И.С. Петрушин

МОДИФИКАЦИЯ СИНГЛЕТНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Поверхностные силы в граничных слоях и тонких пленках жидкостей необходимо учитывать при описании различных физико-химических систем и процессов, протекающих в них, – межфазная граница раздела жидкость–пар (жидкость–кристалл), упорядочение газов и жидкостей в наноразмерных полостях, адсорбция, смачивание и т. п. [1].

Многие общие закономерности в таких системах удобно изучать с помощью модели жидкости, граничащей с твердой непроницаемой поверхностью (стенкой). Статистическое рассмотрение молекулярной системы обычно основывается на уравнениях ББГКИ (Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона) или других, эквивалентных им интегральных и интегро-дифференциальных уравнениях для l -частичных функций распределения $G_{1,\dots,l} = (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_l)$ ансамбля N тождественных частиц, находящихся в заданном объеме V и взаимодействующих друг с другом посредством потенциала $\Phi_{ij}(r_{ij})$, где $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ – расстояние между центрами частиц i и j .

Для пространственно-однородных изотропных систем (объемные жидкости в отсутствие внешних полей и вдали от ограничивающих поверхностей) $G_l(\vec{r}_l) \equiv 1$, $G_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = G_{12}^{(0)}(r_{12})$. Все структурные (ближний порядок) и термодинамические параметры выражаются только через двухчастичную функцию распределения $G_{12}^{(0)}(r_{12})$, параметрически зависящую от приведенной плотности $n = \frac{N}{V} \sigma^3$, где σ – характерный размер частицы [2].

Существующие в настоящее время численные методы позволяют вычислять эту функцию

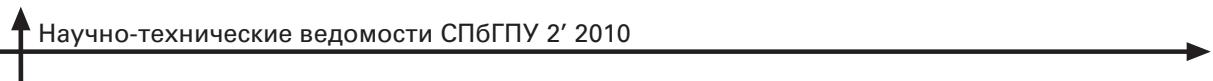
с высокой степенью точности ($\sim 2\%$), хотя ряд принципиальных вопросов не решен до сих пор.

Пространственно-неоднородные системы (жидкость в контакте с твердой поверхностью) описываются двумя функциями распределения – $G_l(\vec{r}_l)$ и $G_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. Границным условием является переход вдали от ограничивающей поверхности к объемной жидкости:

$$G_l(\vec{r}_l) \rightarrow 1; \quad \vec{r}_l \rightarrow \infty$$
$$\lim_{\substack{\vec{r}_1 \rightarrow \infty, \vec{r}_2 \rightarrow \infty \\ r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \text{const}}} G_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = G_{12}^{(0)}(r_{12}). \quad (1)$$

Знание этих функций позволяет рассчитать микроструктуру жидкости – локальную плотность и ближний порядок, а также все макроскопические характеристики: поверхностное натяжение, адсорбцию, расклинивающее давление и т. п.

Непосредственное решение уравнений для функций многих переменных, даже в случае простых систем сферически-симметричных молекул, требует большого объема численных расчетов. Упростить задачу можно, если вместо двухчастичной функции $G_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ использовать в соответствии с условием (1) ее граничное значение $G_{12}^{(0)}(r_{12})$ для объемной жидкости – так называемое синглетное приближение [3]. В результате получается замкнутое уравнение для одночастичной функции распределения $G_l(\vec{r}_l)$, описывающей профиль локальной плотности $n(\vec{r}_l) = nG_l(\vec{r}_l)$ вблизи твердой поверхности. Численное решение уравнения приведено в работах [3–6].



Разумеется, что полное пренебрежение изменением ближнего порядка жидкости вблизи твердой ограничивающей поверхности не позволяет определить непосредственно из уравнений погрешность синглетного приближения. Как правило, эту погрешность оценивают сравнением результатов расчета с эталонными данными численного эксперимента. В данной работе мы уточняем синглетное приближение, частично учитывая изменение ближнего порядка в уравнениях для функций $G_1(\vec{r}_1)$ и $G_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$.

Постановка задачи

Мы будем исходить из системы уравнений для одно- и двухчастичной функций распределения [3] (так же, как и ББГКИ, эквивалентных каноническому распределению Гиббса), но, в отличие от ББГКИ, допускающих решение для плотностей, соответствующих не только газам, но и жидкостям и кристаллам:

$$\omega_1(\vec{r}_1) = n \int G_1(\vec{r}_2) S_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2 + \ln a; \quad (2)$$

$$h_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = c_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \frac{n}{2} \int G_1(\vec{r}_3) [c_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_3) h_{12}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) + \\ + c_{12}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) h_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_3)] d\vec{r}_3. \quad (3)$$

Здесь $G_1 = \exp(-\beta\Phi_i + \omega_i)$ – одночастичная функция распределения; Φ_i – потенциал внешнего поля в точке с координатой \vec{r}_i ; $\beta = 1/kT$; T – температура; k – постоянная Больцмана; n – плотность; ω_i – безразмерный (в единицах kT) одночастичный термический потенциал, или потенциал средней силы, действующей на данную частицу со стороны окружающей среды. Парная корреляционная функция есть $h_{12} = G_{12} - 1$, где $G_{12} = \exp(-\beta\Phi_{12} + \omega_{12})$ – двухчастичная функция распределения, определяющая вероятность нахождения двух произвольных частиц вблизи точек с координатами \vec{r}_1, \vec{r}_2 при условии, что по координатам остальных частиц проводится усреднение. Здесь также в явном виде выделена энергия межмолекулярного взаимодействия Φ_{12} и безразмерный (в единицах kT) двухчастичный термический потенциал ω_{12} , или потенциал средней силы, действующей между частицами за счет их взаимодействия с окружающей средой. Интегрирование в выражениях (2), (3) ведется по координатам i -й частицы – $d(\vec{r}_i)$. Константа $\ln a$ –

логарифм коэффициента активности, определяемый обычно из граничного условия перехода к пространственно-однородной системе. Стоящие в правой части выражений (2), (3) прямые корреляционные функции S_{12} , c_{12} заданы формулами

$$S_{12} = h_{12} - \omega_{12} - \frac{1}{2} h_{12} (\omega_{12} + M_{12}^{(1)}); \quad (4)$$

$$c_{12} = h_{12} - \omega_{12} - M_{12}^{(2)}, \quad (5)$$

где $M_{12}^{(1)}, M_{12}^{(2)}$ – так называемые бридж-функционалы, представляющие собой бесконечные суммы неприводимых диаграмм.

Вычисление этих диаграмм есть одна из серьезных проблем современной физики жидкостей. Обычно бридж-функционалы аппроксимируют какими-либо простыми аналитическими выражениями, называемыми замыканиями. Наиболее известные из них – среднесферическое, Перкус–Йевика, гиперцепное, Мартынова–Саркисова.

Для пространственно-однородных систем ($\omega_1 = 0, \Phi_1 = 0, G_1 = 1$), когда $G_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = G_{12}^{(0)}(\vec{r}_{12})$, уравнение (2) сводится к определению коэффициента активности:

$$\ln a = -n \int S_{12}^{(0)}(\vec{r}_{12}) d^3 \vec{r}_{12}. \quad (6)$$

Уравнение (3), в силу симметричности каждого слагаемого относительно перестановки частиц 1 и 2, сводится к уравнению Орнштейна–Цернике:

$$h_{12}^{(0)}(\vec{r}_{12}) = c_{12}^{(0)}(\vec{r}_{12}) + n \int c_{12}^{(0)}(\vec{r}_{13}) h_{12}^{(0)}(|\vec{r}_{12} - \vec{r}_{13}|) d^3 \vec{r}_{13}, \quad (7)$$

которое широко применяется для описания ближнего порядка в плотных газах и жидкостях.

Подстановка того или иного замыкания в уравнение (7) позволяет вычислить парную корреляционную функцию $h_{12}^{(0)}(\vec{r}_{12})$ и, соответственно, функции $G_{12}^{(0)}(\vec{r}_{12})$, $\omega_{12}^{(0)}(\vec{r}_{12})$, $S_{12}^{(0)}(\vec{r}_{12})$, $c_{12}^{(0)}(\vec{r}_{12})$. Тем самым в соответствии с выражением (6) будет определена константа $\ln a$. Обзор методов решения уравнения (7) для различных замыканий, температуры, плотности и потенциалов межмолекулярного взаимодействия приведен в работе [5]. Заметим лишь, что $h_{12}^{(0)}(\vec{r}_{12})$ – быстро убывающая функция своего аргумента, поэтому основной вклад в область интегрирования уравнения (7) дают малые значения переменной \vec{r}_{13} . Подчеркнем также, что для молекулярной системы твердых сфер наилуч-



шие результаты на всем диапазоне плотностей $0 < n < n_0$ дает замыкание Мартынова–Саркисова:

$$\begin{aligned} M_{12}^{(2)} &= -\frac{1}{2} \omega_{12}^2; \\ M_{12}^{(1)} &= \frac{1}{3} M_{12}^{(2)} = -\frac{1}{6} \omega_{12}^2, \end{aligned} \quad (8)$$

где $n_0 \approx 1$ – плотность кристаллизации.

Жидкость в контакте с твердой непроницаемой поверхностью

Модификация синглетного приближения.

Рассмотрим молекулярную систему в контакте с твердой непроницаемой поверхностью. Начало отсчета совмещаем с центром частицы, соприкасающейся с поверхностью; ось z направляем по нормали. В результате жидкость заполняет все верхнее полупространство $z \geq 0$; нижнее полупространство $z < 0$ недоступно для движения молекул. Такая пространственно-неоднородная система обладает аксиальной симметрией, в силу которой

$$\begin{aligned} G_1(\vec{r}_1) &= G_1(z_1) = \exp[\omega_1(z_1)]; \\ G_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= G_{12}(z_1, z_2, r_{12}), \end{aligned} \quad (9)$$

где r_{12} – расстояние между центрами произвольной пары частиц; $z_i \geq 0$ – удаление каждой из i -й частиц от поверхности. Функции G_1 и G_{12} являются решением системы уравнений (2), (3) с заданными граничными условиями, которые в соответствии с формулами (1) имеют вид

$$\begin{aligned} \omega_1(z_1) &\rightarrow 0; \\ z_1 \rightarrow \infty \\ G_1(z_1) &\rightarrow 1; \\ z_1 \rightarrow \infty \\ G_{12}^{(0)}(r_{12}) &= \lim_{\substack{z_1 \rightarrow \infty, z_2 \rightarrow \infty \\ r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \text{const}}} G_{12}(z_1, z_2, r_{12}). \end{aligned} \quad (10)$$

Упоминавшиеся ранее макроскопические величины – коэффициент адсорбции и поверхностное натяжение вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{N}{V} \int_0^\infty [G_1(z_1) - 1] dz_1; \\ \gamma &= \int_0^\infty \left(P_N - \frac{z_1}{\sigma} P_\tau \right) dz_1, \end{aligned} \quad (11)$$

где P_N, P_τ – нормальная и тангенциальная компоненты тензора давлений;

$$\begin{aligned} \beta P_N &= \frac{N}{V} G_1(z) - \frac{N^2}{2V^2} \int d\vec{r}_{12} \frac{z_{12}^2}{r_{12}} \frac{d\beta\Phi_{12}}{dr_{12}} \times \\ &\times \int_0^1 d\alpha G_{12}[z - \alpha z_{12}, z + (1 - \alpha)z_{12}, \rho_{12}]; \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \beta P_N &= \frac{N}{V} G_1(z) - \frac{N^2}{4V^2} \int d\vec{r}_{12} \frac{\rho_{12}^2}{r_{12}} \frac{d\beta\Phi_{12}}{dr_{12}} \times \\ &\times \int_0^1 d\alpha G_{12}[z - \alpha z_{12}, z + (1 - \alpha)z_{12}, \rho_{12}]. \end{aligned} \quad (13)$$

Отметим, что наиболее просто система уравнений (2), (3) решается в упоминавшемся выше синглетном приближении [4]: подставляя в интеграл (2) прямую корреляционную функцию объемной жидкости $S_{12}^{(0)}(r_{12})$ и воспользовавшись определением (6), получим замкнутое уравнение для одночастичной функции распределения:

$$\begin{aligned} \omega_1(z_1) &= 2\pi n \int_0^\infty dz_2 [G_1(z_2) - 1] \int_{|z_{12}|}^\infty r_{12} dr_{12} S_{12}^{(0)}(r_{12}) - \\ &- 2\pi n \int_{z_1}^\infty dz_{12} \int_{|z_{12}|}^\infty r_{12} dr_{12} S_{12}^{(0)}(r_{12}). \end{aligned} \quad (14)$$

Упоминавшиеся ранее недостатки синглетного приближения можно устраниТЬ, если отказаться от замены двухчастичной функции распределения $G_{12}(z_1, z_2, r_{12})$ ее граничным значением $G_{12}^{(0)}(r_{12})$. С этой целью проанализируем асимптотическое поведение функции $G_{12}(z_1, z_2, r_{12})$ при больших удалениях частиц от поверхности z_1, z_2 . Уравнение (3) удобно переписать в тождественном виде, если ввести в рассмотрение новую функцию $\gamma_{12} = h_{12} - c_{12}$:

$$\begin{aligned} \gamma_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{n}{2} \int G_1(\vec{r}_3) [(h_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_3) - \gamma_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_3)) h_{12}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) + \\ &+ (h_{12}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) - \gamma_{12}(\vec{r}_2, \vec{r}_3)) h_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_3)] d(\vec{r}_3). \end{aligned} \quad (15)$$

Преобразуем интегралы в уравнении (15). С этой целью в двухчастичных функциях удобно выделить в явном виде зависимость от координат в лабораторной системе (\vec{r}_i) и в системе, связанной с движущейся частицей (\vec{r}_{ij}) . Именно такое сочетание координат правильно учитывает граничные



условия (10), что позволяет рассчитать в соответствии с уравнением (7) функции $h_{12}^{(0)}(r_{12})$, $c_{12}^{(0)}(r_{12})$, $\gamma_{12}^{(0)}(r_{12})$. При вычислении первого слагаемого в правой части уравнения (15) начало отсчета совмещаем с центром частицы 1. Интегрирование проводим в цилиндрической системе координат $d(\vec{r}_3) = \rho_{13} d\rho_{13} dz_{13} d\phi_{13}$. Зависимость функций γ_{12} , h_{12} от переменных интегрирования имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}\gamma_{12}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) &\equiv \gamma_{12}(z_i, z_j, r_{ij}) = \gamma_{12}(z_1, \rho_{ij}, z_{ij}); \\ h_{12}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) &\equiv h_{12}(z_i, z_j, r_{ij}) = h_{12}(z_1, \rho_{ij}, z_{ij}).\end{aligned}\quad (16)$$

Здесь мы учли, что

$$\begin{aligned}r_{ij}^2 &= \rho_{ij}^2 + z_{ij}^2, \quad z_{ij} = z_j - z_i; \\ \rho_{23}^2 &= \rho_{12}^2 + \rho_{13}^2 - 2\rho_{12}\rho_{13} \cos \phi_{13}; \\ z_{23} &= z_3 - z_2 \equiv z_{13} - z_{12}.\end{aligned}\quad (17)$$

В результате первое слагаемое в правой части уравнения (15) принимает вид

$$\frac{n}{2} \int_{-z_1}^{\infty} \left\{ dz_{13} G_1(z_1 + z_{13}) \int_0^{\infty} \rho_{13} d\rho_{13} [h_{12}(z_1, \rho_{13}, z_{13}) - \right. \\ \left. - \gamma_{12}(z_1, \rho_{13}, z_{13})] \int_0^{2\pi} d\phi_{13} h_{12}(z_1, \rho_{23}, z_{13} - z_{12}) \right\}, \quad (18)$$

где удаление частицы от поверхности z_1 есть заданный параметр.

Проведем асимптотическую оценку интеграла (18) для больших значений z_1 . При $z_1 \rightarrow \infty$ и $z_{12} = \text{const}$ основной вклад во внутренние интегралы дают малые значения переменных ρ_{13} , z_{13} , поскольку при больших значениях аргументов функции h_{12} , γ_{12} быстро убывают, стремясь к соответствующим граничным значениям $h_{12}^{(0)}$, $\gamma_{12}^{(0)}$. С этой же степенью точности во внешнем интеграле можно полагать $G_1(z_1 + z_{13}) \approx G_1(z_1)$. В результате получаем ($z_{12} = \text{const}$) асимптотику интеграла (18):

$$\begin{aligned}G_1(z_1) \frac{n}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz_{13} \int_0^{\infty} \rho_{13} d\rho_{13} [h_{12}^{(0)}(r_{13}) - \gamma_{12}^{(0)}(r_{13})] \times \\ \times \int_0^{2\pi} d\phi_{13} h_{12}^{(0)}(r_{23}).\end{aligned}\quad (19)$$

Поскольку $dz_{13} \rho_{13} d\rho_{13} d\phi_{13} = d\vec{r}_{13}$ и $r_{23} = |\vec{r}_{12} - \vec{r}_{13}|$, интегрирование проводим в сферической системе координат, что в соответствии с уравнением (7) дает результат $G_1(z_1) \gamma_{12}^{(0)}(r_{12})/2$. При вычислении второго слагаемого в правой части уравнения (15) начало отсчета совмещаем с центром частицы 2. Аналогичные вычисления дают следующую асимптотику: $G_1(z_2) \gamma_{12}^{(0)}(r_{12})/2$.

Таким образом, асимптотическое поведение уравнения (15) имеет вид

$$\begin{aligned}\gamma_{12}(z_1, z_2, r_{12}) &\xrightarrow[z_1 \rightarrow \infty, z_2 \rightarrow \infty, r_{12} = \text{const}]{} \\ &\rightarrow \frac{1}{2} [G_1(z_1) + G_1(z_2)] \gamma_{12}^{(0)}(r_{12}).\end{aligned}\quad (20)$$

Полагая, что асимптотическое значение (20) можно аппроксимировать на любые расстояния z_1 , z_2 , получим модифицированное синглетное приближение:

$$\gamma_{12}(z_1, z_2, r_{12}) = \frac{1}{2} [G_1(z_1) + G_1(z_2)] \gamma_{12}^{(0)}(r_{12}). \quad (21)$$

С той же степенью точности можно записать и все другие двухчастичные функции $-G_{12}(z_1, z_2, r_{12})$, $h_{12}(z_1, z_2, r_{12})$, $c_{12}(z_1, z_2, r_{12})$, $S_{12}(z_1, z_2, r_{12})$, в частности

$$S_{12}(z_1, z_2, r_{12}) = \frac{1}{2} [G_1(z_1) + G_1(z_2)] S_{12}^{(0)}(r_{12}). \quad (22)$$

Подстановка соотношения (22) в уравнения (2), (6) приводит к уравнению для одночастичной функции распределения в модифицированном синглетном приближении:

$$\omega_1(z_1) = n \int \left[G_1(z_2) \frac{G_1(z_1) + G_1(z_2)}{2} - 1 \right] S_{12}^{(0)}(r_{12}) d\vec{r}_2. \quad (23)$$

Выполняя интегрирование в цилиндрической системе координат, получим:

$$\begin{aligned}\omega_1(z_1) = 2\pi n \int_0^{\infty} dz_2 \left[G_1(z_2) \frac{G_1(z_1) + G_1(z_2)}{2} - 1 \right] \times \\ \times \int_{|z_{12}|}^{\infty} r_{12} dr_{12} S_{12}^{(0)}(r_{12}) - 2\pi n \int_{z_1}^{\infty} dz_{12} \int_{z_1}^{\infty} r_{12} dr_{12} S_{12}^{(0)}(r_{12}).\end{aligned}\quad (24)$$

Заметим, что если в формулах (21), (22) положить $G_1(z_i) = 1$, то получим уравнение (14) для одночастичной функции распределения в синглетном приближении. Подчеркнем, что в синглетном приближении учитывается только изменение локальной плотности G_1 , в то время как в модифици-



рованном синглетном приближении учитывается изменение и локальной плотности G_1 , и ближнего порядка G_{12} . Поэтому естественно ожидать, что модифицированное синглетное приближение имеет меньшую погрешность.

Решение при низких плотностях. Рассмотрим решение уравнений (14), (24) при низких плотностях, т. е. при $n \rightarrow 0$.

В этом случае выбор замыкания не существует. Важно, что для низких и средних плотностей ($n < 0,5$) все известные замыкания дают согласующиеся результаты; расхождения начинаются при более высоких плотностях. Поэтому при низких плотностях одночастичный термический потенциал $\omega_1(z_1)$ можно разложить в степенной ряд по малому параметру $n \ll 1$. Ограничивааясь в системе (9) членами второго порядка, получим:

$$\omega_1(z_1) = n\omega_1^{(1)}(z_1) + n^2\omega_1^{(2)}(z_1);$$

$$G_1(z_1) = 1 + n\omega_1^{(1)}(z_1) + n^2 \left\{ \omega_1^{(2)}(z_1) + \frac{1}{2} [\omega_1^{(1)}(z_1)]^2 \right\}. \quad (25)$$

Для нахождения коэффициентов разложения необходимо предварительно вычислить прямую корреляционную функцию $S_{12}^{(0)}(r_{12})$ и провести при этом в формулах (4)–(8) разложения в ряд с точностью до членов первого порядка:

$$S_{12}^{(0)}(r_{12}) = S_{12}^{(00)}(r_{12}) + nS_{12}^{(01)}(r_{12}). \quad (26)$$

При вычислении возникающих интегралов начало отсчета совмещаем с центром частицы 1;

ось z направляем через центр частицы 2; все расстояния измеряем в безразмерных единицах r_{12}/σ . Межмолекулярное взаимодействие задаем потенциалом твердых сфер; минимальное расстояние между центрами двух соприкасающихся частиц считаем равным единице. Интегрирование в сферической системе координат дает следующий результат:

$$S_{12}^{(00)}(r_{12}) = \begin{cases} -1, & r_{12} \leq 1; \\ 0, & r_{12} > 1; \end{cases}$$

$$S_{12}^{(01)}(r_{12}) = \begin{cases} \pi(r_{12}^3 + 12r_{12} - 16), & r_{12} \leq 1; \\ 0, & r_{12} > 1. \end{cases} \quad (27)$$

Коэффициенты разложения одночастичного термического потенциала $\omega_1(z_1)$ получаются подстановкой выражений (25) в уравнения (14), (24) и приравниванием выражений при одинаковых степенях плотности n . Для удобства будем обозначать эти коэффициенты как $\omega_1^{(i)}(z_1)$ и $\Omega_1^{(i)}(z_1)$ соответственно для синглетного (14) и модифицированного синглетного (24) уравнений. Удаление частицы от поверхности измеряем в безразмерных единицах z_1/σ . В первом порядке по степеням плотности из уравнений (14) и (24) получаются одинаковые выражения

$$\omega_1^{(1)}(z_1) = \Omega_1^{(1)}(z_1) = \begin{cases} \pi(z_1^3 - 3z_1 + 2), & z_1 < 1; \\ 0, & z_1 > 0. \end{cases} \quad (28)$$

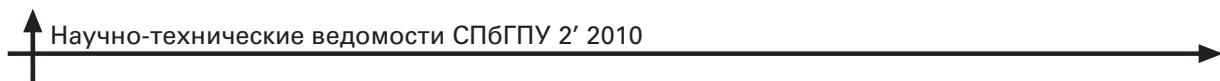
Отличие возникает уже во втором порядке (табл. 1).

Таблица 1

Выражения для одночастичной функции распределения (второй порядок по степени плотности)

Область значений z_1	Приближение	$\omega_1^{(2)}(z_1)$
$0 \leq z_1 \leq 1$	C	$\pi^2/360(z_1^6 - 30z_1^4 + 80z_1^3 + 90z_1^2 - 174z_1 - 5)$
	СМ	$\pi^2/360(21z_1^6 - 150z_1^4 + 80z_1^3 + 315z_1^2 - 198z_1 - 125)$
$1 \leq z_1 \leq 2$	C	$-\pi^2/180(z_1^6 - 30z_1^4 + 80z_1^3 - 192z_1 + 160)$
	СМ	$-\pi^2/120(z_1^6 - 30z_1^4 + 80z_1^3 - 192z_1 + 160)$

Обозначения: С, СМ – синглетное и синглетное модифицированное приближения; $\omega_1^{(2)}(z_1) = 0$ при $z_1 \geq 2$ в обоих приближениях.



Заметим, что функция $\omega_i^{(1)}(z_i)$ определена на интервале $0 \leq z_i \leq 1$ и является положительной, монотонно убывающей от своего максимального значения $2\pi/3$ до нуля. В то же время функция $\omega_i^{(2)}(z_i)$ определена на большем интервале $0 \leq z_i \leq 2$, где она является отрицательной, монотонно возрастающей от своего минимального значения $-5\pi^2/360$ до нуля. В табл. 2 приведены значения функций, вычисленные для точек $z_i = 0$ и 1 .

Таблица 2

**Значения одночастичной функции,
вычисленные для двух точек**

z_i	Приближение	$\omega_i^{(1)}$	$\omega_i^{(2)}$
0	С	$2\pi/3$	$-\pi^2/72$
	СМ	$2\pi/3$	$-25\pi^2/72$
1	С	0	$-38\pi^2/360$
	СМ	0	$-57\pi^2/360$

Выделенные точки $z_i = 0$, $z_i = 1$, $z_i = 2$ относятся соответственно к первому, второму и третьему монослоям молекул, прилегающим к твердой поверхности. В объемной жидкости подобные расстояния соответствуют первой, второй и третьей координационным сферам. По мере увеличения плотности, что соответствует переходу к старшим порядкам разложения в выражении (25), возрастает расстояние, на котором происходит изменение локальной плотности под воздействием твердой поверхности. Это наглядно проявляется уже во втором порядке в разложениях, представленных в табл. 1. Примечательно, что в отличие от синглетного приближения, в модифицированном синглетном приближении изменения проявляются резче. Это есть следствие одновременного учета изменения локальной плотности и ближнего порядка молекулярной системы вблизи ограничивающей поверхности.

Работа выполнена при частичной поддержке ГРНТИ-091-03-106, государственного контракта ГК П1919 и РНП 2.2.2.1/3297.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аграфонов, Ю.В. Оценка адсорбционной способности углеродных нановолокон методом функций распределения [Текст] / Ю.В. Аграфонов, И.С. Петрушин, И.Г. Просекина [и др.] // Изв. РАН. Сер. физ. – 2007. – Т. 71. – № 2. – С. 186–188.
2. Martynov, G.A. Exact equations and the theory of liquids. I Analysis. Transformation and method of solving exact equations [Text] / G.A. Martynov // Mol. Phys. – 1981. – Vol. 42. – No. 2. – P. 329–337.
3. Аграфонов, Ю.В. Физика классических неупорядоченных систем [Текст] / Ю.В. Аграфонов, Д.С. Сандитов, Ш.Б. Цыдыпов. – Улан-Удэ: Изд-во Бурятского гос. ун-та, 2000. – 234 с.
4. Tikhonov, D.A. Singlet integral equation approaches in the statistical theory of surface phenomena in liquids [Text] / D.A. Tikhonov, O.E. Kiselyov, G.A. Martynov, G.N. Sarkisov // J. Mol. Liq. – 1999. – Vol. 82. – P. 3–17.
5. Саркисов, Г.Н. Приближенные уравнения теории жидкостей в статистической термодинамике классических жидкых систем [Текст] / Г.Н. Саркисов // УФН – 1999. – Т. 169. – № 5. – С. 625–640.
6. Саркисов, Г.Н. Молекулярные функции распределения стабильных, метастабильных и аморфных классических моделей [Текст] / Г.Н. Саркисов // УФН – 2002. – Т. 172. – № 6. – С. 647–662.



УДК 538.971

A.V. Бакаев, Е.Е. Журкин

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В КАРБИДЕ КРЕМНИЯ ПРИ БОМБАРДИРОВКЕ ИОНАМИ И КЛАСТЕРАМИ УГЛЕРОДА

Имплантация кластерными ионами (включая фуллерены) с энергией в диапазоне до нескольких кэВ/атом рассматривается как перспективный метод ионного легирования, модификации свойств материалов, прецизионной обработки поверхности, а также как новый инструмент для анализа поверхности на субмикронном масштабе расстояний [1–3]. По сравнению с традиционными методами ионной имплантации и травлением (когда облучение мишени производится пучком ускоренных одноатомных ионов), применение кластерной имплантации имеет ряд преимуществ. Так, в частности, одной из проблем, ограничивающих использование пучков одноатомных ионов для прецизионного анализа поверхности, является ее радиационное повреждение. Для снижения данного эффекта необходимо уменьшать энергию ионов (ниже 1 кэВ), однако при этом существенно уменьшается коэффициент распыления и ухудшается качество фокусировки пучка. Использование кластерных пучков позволяет уменьшить энергию каждого иона в пучке, так как энергия кластера возрастает кратно числу атомов в нем при той же скорости, а это позволяет уменьшить радиационные повреждения облучаемых материалов при сохранении качества фокусировки и необходимой эффективности распыления [4, 5].

В настоящее время накоплено очень мало данных о характере взаимодействия многоатомных кластеров и фуллеренов с поверхностью твердых тел (включая, в частности, и полупроводниковые материалы), что не позволяет проводить надежные количественные оценки подобных эффектов. Физическая модель эрозии поверхности при кластерной бомбардировке до сих пор не создана. Фундаментальные исследования в данной области, как правило, базируются либо на эксперименте, либо на численном моделировании. Необходимо отметить, что проведение реально-го эксперимента в данной области представляет

достаточно сложную и дорогостоящую задачу. В связи с этим имеющиеся результаты экспериментальных исследований носят отрывочный и несистематический характер. В частности, в целом ряде экспериментов было показано, что бомбардировка кластерами может приводить к неаддитивному (нелинейному) возрастанию коэффициента распыления, а также к образованию микрократеров на облучаемой поверхности [4–6]. Подобные эффекты обусловлены высокой локальной плотностью энергии, поглощаемой в приповерхностной области мишени, в результате чего может возникать нелинейный каскад атомных соударений (так называемый «столкновительный пик»), который превращается в «тепловой пик» – относительно долгоживущую локально расплавленную область вещества. Эффекты «пиков» пока не описаны количественно, поскольку ни одна из существующих теорий не предлагает приемлемых моделей явления. В связи с этим для теоретического изучения пиков чаще всего применяют численное моделирование в рамках метода классической молекулярной динамики. Данный метод был использован в ряде работ с целью изучения распыления и первичных структурных нарушений в мишени при кластерной бомбардировке [7–9]. Например, в работе [9] исследовалась низкоэнергетическая имплантация аргоновых кластеров (содержащих 13–3000 атомов) в кремний. Было обнаружено, что повреждение мишени, вызванное бомбардировкой кластерами, обусловлено изотропной передачей энергии через многочисленные взаимодействия между кластером и поверхностными атомами, в результате чего увеличение размера налетающего кластера приводит к уменьшению эффективного порога дефектообразования. В работе [3] дан обширный обзор публикаций, посвященных изучению различных аспектов взаимодействия кластеров с поверхностью твердых тел, из которого очевидно, что в настоящее время невозможно

сформулировать универсальные законы, описывающие взаимодействие ускоренных кластеров с поверхностью, при этом процессы радиационного повреждения твердотельных мишеньей при кластерной бомбардировке остаются малоизученными как экспериментально, так и теоретически.

Цель данной работы – выявление и анализ особенностей и физических механизмов легирования, и первичного радиационного повреждения карбида кремния при низкоэнергетической бомбардировке одноатомными ионами углерода C_1 , кластерами C_5 и фуллеренами C_{60} при одинаковой энергии, приходящейся на один атом бомбардирующей частицы ($E/N=200$ эВ/атом) с помощью компьютерного моделирования на атомарном масштабе расстояний.

Методика исследования

Использовалось компьютерное моделирование в рамках метода классической молекулярной динамики (МД), который позволяет отслеживать индивидуальные траектории каждой из частиц изучаемой системы путем решения системы уравнений движения Ньютона [10]. Для проведения вычислений использовался модифицированный алгоритм, ранее разработанный авторами работ [7, 8]. При расчетах для вычисления сил взаимодействия между атомами использовался многочастичный потенциал Терсова, специально адаптированный для описания свойств кубического карбида кремния $c\text{-SiC}$ [11]. Данный потенциал был сопряжен с потенциалом Циглера–Бирсака–Литтмарка [12] в области малых межатомных расстояний с целью корректного учета высокоэнергетических соударений атомов. Были выполнены тестовые расчеты имплантации ионов и кластеров C_1 , C_5 , C_{60} с энергией 0,2 кэВ/атом в модельный кристалл карбида кремния $SiC(111)$, содержащий от 30000 до 130000 атомов. Исходная температура модельного кристалла составляла $T = 0$ К. Выбиралось наклонное направление удара (под углом 7° относительно нормали к поверхности мишени) для исключения эффекта канализации. Каждая история отслеживалась на промежутках времени до 10–30 пс. Для достижения статистически приемлемых результатов число рассмотренных событий составило примерно 100 историй на каждый внедренный атом. В качестве критерия поиска точечных дефектов использовалась следующая процедура: в исходном «идеальном» модельном

кристалле вокруг каждого узла решетки строилась сфера радиусом $0,5(r_{NN} + r_{2N})$, где r_{NN} , r_{2N} – расстояния до первых и вторых ближайших соседей (в алмазной решетке $r_{NN} = \frac{\sqrt{3}}{4}a_0$; $r_{2N} = \frac{\sqrt{2}}{2}a_0$ (a_0 – постоянная решетки)). Далее анализировалась текущая конфигурация атомов в заданный момент времени (вплоть до конечного стационарного состояния системы), и определялось число атомов в каждой построенной сфере, которое по сути есть координационное число атома Z (в идеальной алмазной решетке $Z = 4$). Для анализа характера радиационного повреждения мишени фиксировались вызванные бомбардировкой изменения числа атомов ΔN^+ и ΔN^- мишени, имеющих соответственно либо избыточное, либо недостаточное значение Z . При анализе конечной конфигурации атомов использовалась численная процедура «метода связанных ячеек», обеспечивающая наиболее эффективный поиск ближайших соседей каждого атома в модельном кристалле [10].

Результаты и их обсуждение

Распределение пробегов внедренных атомов. Одной из важных проблем, связанной с кластерной имплантацией, является оценка распределения пробегов внедренных атомов. Следует отметить, что систематические исследования в данной области не проводились. Тем не менее анализ имеющихся работ позволяет выделить две противоречивые точки зрения. С одной стороны, было установлено, что средний проективный пробег атомов имплантируемых кластеров существенно превышает пробег одноатомных ионов при одинаковой начальной энергии в пересчете на один атом в области небольших энергий (порядка нескольких кэВ/атом) [3]. Впервые подобный факт, названный «эффектом расчистки пути», был предсказан теоретически в работах П. Зигмунда и В. Шульги [13]. Его суть заключается в следующем: предполагается, что фронтальные атомы кластера, внедряясь в мишень, передают коррелированным образом импульсы атомам мишени, направленные вдоль направления удара, тем самым «расчищая» путь для последующих атомов кластера, внедряемых следом. Это приводит к уменьшению средней тормозной способности замедляющихся атомов кластера и, соответственно, к систематическому увеличению их пробега. С другой стороны, результаты экспериментов



группы Х.Х. Андерсена [14] указывают на то, что средние пробеги мономеров и небольших кластеров золота Au_N ($N = 1; 2; 7$), имплантируемых в медь и кремний с энергиями 10 кэВ/атом, оказываются практически одинаковыми. Кроме того, было обнаружено увеличение флуктуаций пробегов атомов при внедрении кластерных ионов в металлы [3, 14]. Подобные эффекты были воспроизведены в работах [15, 16] с помощью компьютерного моделирования, хотя при этом авторами все же было отмечено систематическое возрастание среднего пробега с увеличением размера кластера при энергиях вплоть до 10 кэВ/атом, однако данный эффект ослаблялся с ростом начальной энергии кластера.

В настоящей работе проведено численное моделирование процессов внедрения атомов углерода при имплантации низкоэнергетических ионов и кластеров углерода C_N (при $N = 1; 5; 60$) в приповерхностную область карбида кремния $SiC(111)$.

На рис. 1 показано распределение пробегов атомов углерода по глубине мишени, а в таблице приведены соответствующие средние значения характерных параметров этого распределения. Страгглинг пробегов ΔR_p – это величина среднестатистического стандартного отклонения для распределения пробегов внедряемых атомов вдоль направления $\{111\}$ (перпендикулярного к поверхности). Видно, что распределения пробегов атомов углерода, полученные при имплантации как одноатомных ионов, так и кластеров, оказываются очень близки, что указывает на отсутствие эффекта систематического увеличения пробегов атомов внедряемого кластера с ростом его размера N . При этом для всех трех налетающих частиц величина пробега R_p составляет около 9 Å (см. таблицу). Страгглинг пробегов ΔR_p слабо растет с ростом размера кластера N , в случае имплантации фуллерена C_{60} величина ΔR_p возрастает на 60 % (по сравнению с соответствующей величиной для C_1). Этот эффект во многом обусловлен наличием некоторого числа длиннопробежных атомов (см. рис. 1), удельный вес которых в распределении пробегов, однако, невелик. Качественно такой характер зависимости распределения пробегов от размера кластера существенно отличается от установленного ранее эффекта возрастания пробегов и их флуктуаций при имплантации многоатомных кластеров в металлические мишени [16] (в том же диапазоне размеров – до 55 атомов в кластере и энергий – до 1 кэВ/атом), для которых отмечалось

увеличение пробега 55-атомного кластера почти в 1,5 раза и страгглинга – в 2 раза по сравнению с одноатомным ионом при той же энергии на атом. Можно предположить, что эти различия связаны с более быстрым, по сравнению с металлическими материалами, разрушением кластеров C_N при их внедрении в приповерхностную область карбида кремния, приводящем к уменьшению вероятности возникновения коррелированного движения внедряемых атомов; последнее приводит к увеличению пробегов за счет «эффекта расчистки пути». Различия связаны также с относительно малой интенсивностью и небольшой продолжительностью посткаскадного теплового пика в полупроводниковых материалах. Вследствие этого эффект возрастания страгглинга пробегов оказывается слабее.

Характеристики пробегов, каскада соударений и первичного радиационного повреждения SiC при бомбардировке одноатомными ионами и многоатомными кластерами C_N с энергией 200 эВ/атом

N	R_p	ΔR_p	t_{peak}	t_{recomb}	$\Delta N^+/N$, о. е.		$\Delta N^-/N$, о. е.	
	Å	фс			Si	C	Si	C
1	9,5	6,3	60	120	5,5±0,3	9,8±0,5	5,9±0,3	6,9±0,4
5	9,4	7,3	80	221	5,4±0,3	9,0±0,5	7,2±0,3	8,6±0,4
60	8,6	10,4	120	1104	1,7±0,1	3,2±0,1	9,8±0,3	12,1±0,3

Обозначения: N – число атомов в налетающем кластере, R_p – средний проективный пробег, ΔR_p – страгглинг пробегов, t_{peak} – характерное время каскада, t_{recomb} – время рекомбинации, $\Delta N^-/N$, $\Delta N^+/N$ – средние числа атомов С и Si в мишени с низким (–) и избыточным (+) координационными числами, приходящиеся на один атом налетающего кластера

Характеристики каскада соударений и структурных нарушений в облучаемой мишени. На рис. 2 показано распределение по времени (отсчитываемого от момента удара частицы-снаряда о поверхность мишени) для «движущихся» атомов мишени (в пересчете на один внедренный атом снаряда) при имплантации ионов и кластеров C_N при $N = 1; 5; 60$. При этом «движущимися» считались те атомы, которые имели кинетическую энергию выше энергии когезии (связи) E_{coh} вещества мишени (для карбида кремния данная величина составляет 6,2 эВ). Данное распределение характеризует каскадную стадию, во время которой происходит выбивание атомов

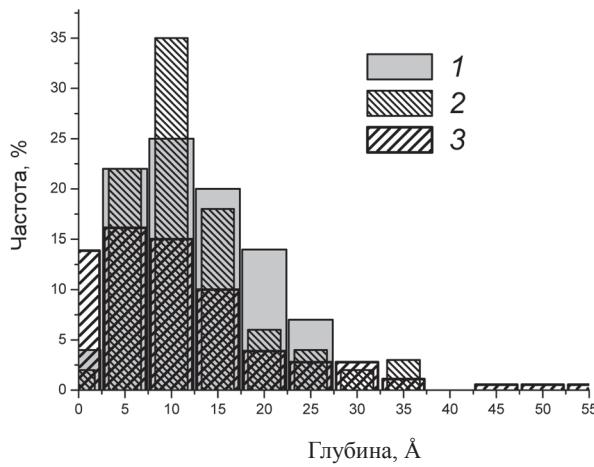


Рис. 1. Распределение проективных пробегов R_p атомов имплантируемой примеси углерода в SiC(111) по глубине мишени после удара кластера углерода C_N с начальной энергией 0,2 кэВ/атом; $N = 1$ (1); 5 (2); 60 (3)

из узлов кристалла. Видно, что относительное число движущихся атомов (в пересчете на один внедренный атом) неаддитивно увеличивается с ростом размера N кластера-снаряда; при этом полная продолжительность каскадной стадии находится в пределах около 200 пс при $N = 1$; 5 и приблизительно 800 пс при $N = 60$. Таким образом очевидно, что при внедрении кластеров ($N > 1$) на стадии развития каскада соударений проявляются нелинейные (неаддитивные) эффекты, хотя их интенсивность заметно слабее, чем в случае металлических мишней [7].

Для анализа характера радиационного повреждения мишени фиксировались вызванные бомбардировкой изменения числа атомов ΔN^+ и ΔN^- мишени, имеющих соответственно избыточное, либо недостаточное значение координационного числа Z (по сравнению с исходными значениями Z в необлученной мишени). Для оценки влияния размера налетающего кластера на относительную эффективность структурных нарушений все вышеприведенные величины пересчитывались на один атом налетающего кластера.

На рис. 2, б показано распределение (эволюция по времени) изменения среднего числа атомов мишени $\Delta N^+/N$ с избыточным значением координационного числа (на один внедренный атом) при имплантации ионов и кластеров C_N при изменении размера кластера. Данное распределение характеризует относительную эффективность радиационного повреждения мишени в зависимости

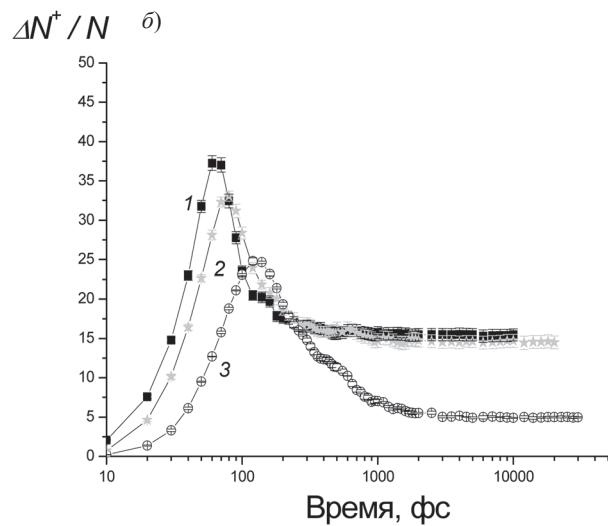
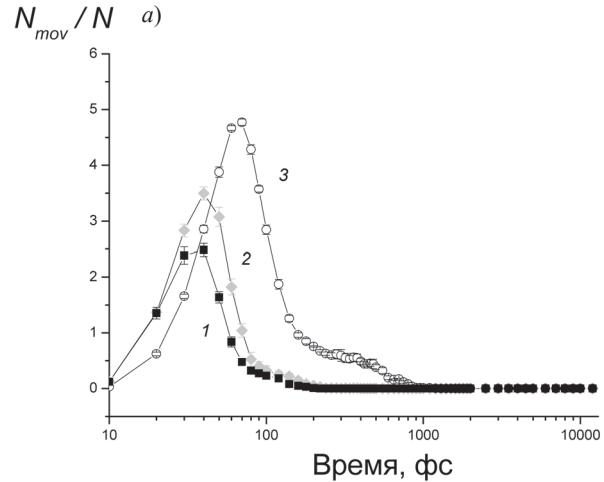


Рис. 2. Распределения во времени движущихся атомов мишени N_{mov}/N (на один атом налетающей частицы-снаряда) (а) и относительного числа атомов мишени с избыточным значением координационного числа $\Delta N^+/N$ (б) в SiC с момента удара кластера C_N ; $N = 1$ (1); 5 (2); 60 (3). Начальная энергия кластера 0,2 кэВ/атом

от времени. Видно, что при имплантации ионов и небольших кластеров ($N = 1$; 5) величины $\Delta N^+/N$ ведут себя практически одинаково, а при имплантации фуллерена ($N = 60$) конечное стационарное значение величины $\Delta N^+/N$ заметно снижается.

Кроме того, на основе приведенных на рис. 2, б распределений были оценены времена, характеризующие различные стадии дефектообразования: каскадное время t_{peak} , которое соответствует моменту достижения максимального числа дефектов в каскаде, и продолжительность стадии спонтанной атермической рекомбинации t_{recomb} . Последнее вычислялось следующим образом: соответствую-



щая часть кривой при $t > t_{peak}$ аппроксимировалась экспоненциальной зависимостью

$$\Delta N^+/N \sim \exp[-(t - t_{peak})/\tau],$$

и величина τ , характеризующая время релаксации, из данной аппроксимации численно оценивалась. Далее полагалось, что $t_{recom} = 3\tau$. Полученные значения t_{peak} и t_{recomb} приведены в таблице. Как и следовало ожидать, величины t_{peak} коррелируют с соответствующими временами продолжительности каскадной стадии (см. рис. 2, a), увеличиваясь при этом в два раза при возрастании размера налетающего кластера N от 1 до 60. При этом характерная продолжительность стадии спонтанной атермической рекомбинации t_{recom} возрастает почти на порядок (от 0,1 пс для C_1 до 1 пс для C_{60}).

В таблице приведены конечные стационарные значения величин $\Delta N^+/N$ и $\Delta N^-/N$ (раздельно для атомов кремния и углерода). Видно, что данные характеристики структурных нарушений в обеих элементных подсистемах мишени близки между собой. Значения величин $\Delta N^+/N$ и $\Delta N^-/N$ неаддитивным образом изменяются с увеличением числа атомов N в налетающем кластере, однако следует отметить, что эти изменения имеют противоположный характер для величин $\Delta N^+/N$ и $\Delta N^-/N$: первая уменьшается с ростом N , тогда как вторая, напротив, возрастает.

Для объяснения такого поведения величин была произведена визуализация облученной области мишени с целью оценки характера радиационного повреждения после имплантации ионов и кластеров. В качестве примера на рис. 3 показана визуализация среза центральной области модельного кристалла карбида кремния при имплантации ионов и кластеров C_N разного размера. Видно, что в отличие от отдельных точечных дефектов и их скоплений, возникающих при имплантации одноатомного иона C_1 и малого кластера C_5 , при имплантации фуллерена C_{60} возникает разупорядоченная аморфная область. К ней приводит высокая плотность поглощенной энергии и неаддитивно возросшего числа смещенных атомов в «ядре» каскада (в пересчете на один имплантируемый атом) при внедрении кластера C_{60} (см. рис. 2, a). Однако избыточное координационное число служит критерием наличия отдельных структурных дефектов в объеме кристалла. В случае же аморфизации большинство атомов аморфной зоны имеют стандартное координационное число, чем

и объясняется отмеченное выше уменьшение относительного числа атомов с избыточным координационным числом при имплантации фуллерена. При этом следует заметить, что фактическая область разупорядочения при имплантации фуллерена существенно больше, чем при имплантации ионов и малых кластеров. Возрастание относительного числа атомов с недостаточным координационным числом $\Delta N^-/N$ при увеличении размера бомбардирующих кластеров N обусловлено значительным выходом вещества на поверхность мишени, а также образованием разреженной зоны

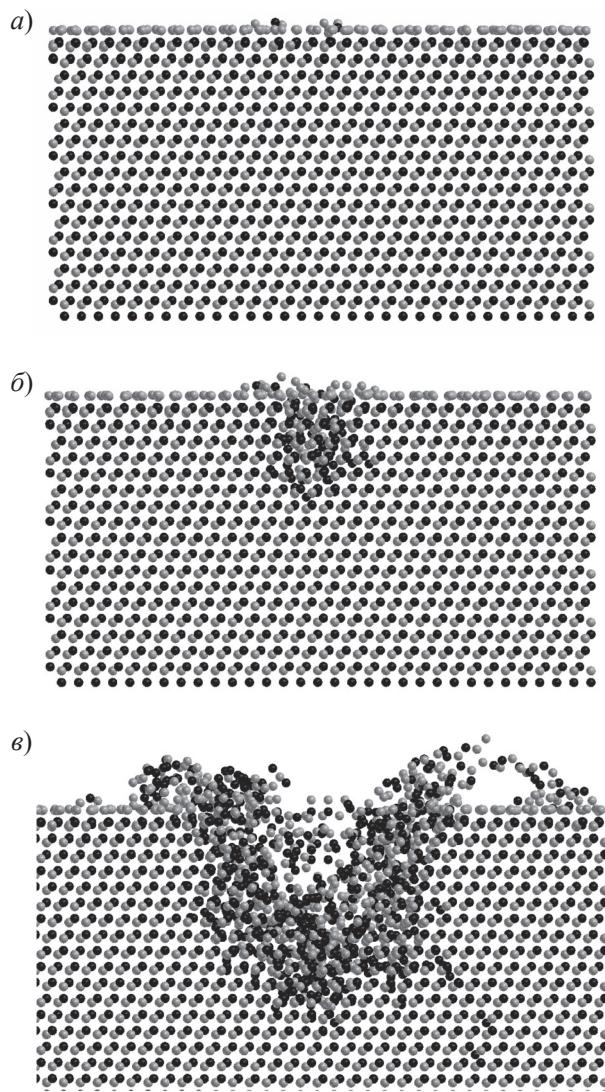
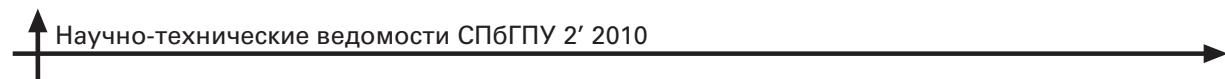


Рис. 3. Визуализация поперечного среза центральной области модельного кристалла SiC после имплантации одноатомного иона C_1 (a), кластера C_5 (b) и фуллерена C_{60} (c) с начальной энергией 0,2 кэВ/атом. Чёрные и серые кружки – атомы С и Si соответственно



в центре поврежденной приповерхностной области (см. рис. 3). Поскольку атомы вблизи поверхности, так же как и дефекты вакансионного типа, имеют низкое координационное число, вышеупомянутые эффекты приводят к неаддитивному возрастанию числа атомов, имеющих пониженное координационное число.

Таким образом, неаддитивный характер накопления структурных нарушений при кластерной бомбардировке (с увеличением размера налетающего кластера) по-разному проявляется не только при различных условиях облучения, но и для дефектов различного типа в облучаемой мишени.

Таким образом, в результате проведенного исследования был выявлен ряд закономерностей, характерных для низкоэнергетической имплантации ионов C_1 , кластеров C_5 и фуллеренов C_{60} (при начальной энергии 200 эВ/атом) в карбид кремния:

пространственное распределение пробегов имплантированных атомов в карбид кремния слабо зависит от размера внедренного кластера, что указывает на отсутствие эффекта увеличения пробегов с увеличением размера кластера-снаряда, установленного ранее для металлических мишеней;

интенсивность нелинейных эффектов на каскадной стадии при внедрении кластеров оказывается заметно меньше, чем для металлических мишеней при сходном режиме облучения;

при имплантации фуллерена происходит неаддитивное (по сравнению с имплантацией одноатомного иона при той же энергии на один внедряемый атом) накопление структурных нарушений в приповерхностной области мишени; при этом возрастает число атомов, имеющих низкое координационное число, и, напротив, уменьшается число атомов с избыточным координационным числом;

в отличие от отдельных точечных дефектов и их скоплений, характерных для имплантации одноатомных ионов и малых кластеров, содержащих несколько атомов, при имплантации фуллера C_{60} в мишени возникает разупорядоченная аморфная область.

Работа поддержана в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы. Госконтракт № 02.740.11.0572.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yamada, I. Nano-processing with gas cluster ion beams [Text] / I. Yamada, J. Matsuo, Z. Insepov [et al.] // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. – 2000. – Vol. 164–165. – P. 944–959.
2. Szymczak, W. Evidence for strongly enhanced yields of negative molecular secondary ions due to bombardment with SF_n cluster ions [Text] / W. Szymczak, K. Wittmaack // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B – 1994. – Vol. 88. – P. 149–153.
3. Popok, V.N. Beams of atomic clusters: effects on impact with solids [Text] / V.N. Popok, E.E.B. Campbell // Rev. Adv. Mater. Sci. – 2006. – Vol. 11. – P. 19–45.
4. Insepov, Z. Computer modeling and electron microscopy of silicon surfaces irradiated by cluster ion impacts [Text] / Z. Insepov, L.P. Allen, C. Santeufemio [et al.] // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. – 2003. – Vol. 202. – P. 261–268.
5. Dobeli, M. Sputtering and defect production by focused gold cluster ion beam irradiation of silicon [Text] / M. Dobeli, P.W. Nebiker, R. Mihle [et al.] // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. – 1997. – Vol. 132. – P. 571–577.
6. Brauchle, G. Etching nanometer sized holes of variable depth from carbon cluster impact induced defects on graphite surfaces [Text] / G. Brauchle, S. Richard-Schneider, D. Illig [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1995. – Vol. 67. – P. 52–55.
7. Zhurkin, E.E. Atomic scale modelling of Al and Ni(111) surface erosion under cluster impact [Text] / E.E. Zhurkin, A.S. Kolesnikov // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. – 2003. – Vol. 202. – P. 269–277.
8. Журкин, Е.Е. Компьютерное моделирование процессов эрозии поверхности металлов при бомбардировке N -атомными кластерами ($N = 1–55$) [Текст] / Е.Е. Журкин, В.Ф. Космач, А.С. Колесников // Поверхность. – 2005. – № 3. – С. 51–56.
9. Aoki, T. Molecular dynamics study of damage formation characteristics by large cluster ion impacts [Text] / T. Aoki, J. Matsuo, G. Takaoka // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. – 2003. – Vol. 202. – P. 278–282.



10. **Allen, M.P.** Computer simulation of liquids [Text] / M.P. Allen, D.J. Tildesley. – Oxford: Clarendon Press, 1987. – 387 p.
11. **Tersoff, J.** Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems [Text] / J. Tersoff // Phys. Rev. B. – 1989. – Vol. 39. – P. 5566–5568.; 1990. – Vol. 41. – P. 3248.
12. **Ziegler, J.F.** The stopping and range of ions in solids [Text] / J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark // The Stopping and Range of Ions in Matter. – 1995. – Vol. 1. – New York : Pergamon Press, 1985. – 321 p.
13. **Shulga, V.I.** Pronounced nonlinear behavior of atomic collision sequences induced by keV-energy heavy ions in solids and molecules [Text] / V.I. Shulga, M. Vicanek, P. Sigmund // Phys. Rev. A. – 1989. – Vol. 39. – P. 3360–3372.
14. **Andersen, H.H.** Gold-cluster ranges in aluminium, silicon and copper [Text] / H.H. Andersen, A. Johansen, M. Olsen [et al.] // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. – 2003. – Vol. 212. – P. 56–62.
15. **Peltola, J.** Heat spike effect on the straggling of cluster implants [Text] / J. Peltola, K. Nordlund // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68. – P. 035419–035424.
16. **Журкин, Е.Е.** Пробеги имплантируемых атомов при бомбардировке поверхности Cu(111) многоатомными кластерами [Text] / Е.Е. Журкин, В.Ф. Космач, А.С. Колесников. // Поверхность. – 2007. – № 4. – С. 5–11.

УДК 625.855.3

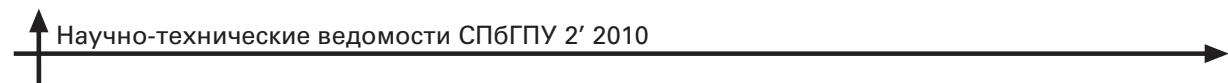
Д.С. Смирнов, П.В. Петров

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ В ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ПРИМЕСЕЙ

Важную роль в транспортных свойствах двумерных полупроводниковых легированных структур играют D^- - и A^+ -центры, являющиеся состояниями в верхней зоне Хаббарда. Нижней и верхней зонами Хаббарда принято называть совокупности соответственно однократно и двукратно заполненных примесных центров в полупроводниках. Для получения таких равновесных центров необходимо одновременно легировать квантовую яму и ее барьеры. В таком случае при низких температурах носители заряда переходят в яму и захватываются нейтральными примесными центрами в результате дипольного взаимодействия. Полученная таким образом структура квантовых ям GaAs/AlGaAs с A^+ -центрами есть по сути двумерный аналог полупроводника с большой степенью компенсации. Легко показать [1], что в таких структурах в отсутствие делокализованных зарядов возникают неограниченно большие флуктуации потенциала, связанные со случайным пространственным распределением примеси в барьерах и квантовой яме. Таким образом, необходимо учитывать даже малые концентрации носителей в валентной зоне. Однако при исследовании энергетических, транспортных и оптических свойств квантовых ям [3] указанные флуктуации явным образом фактически

нигде не учитывались. Кроме состояния A^+ и делокализованного состояния, в данном исследовании было учтено состояние \tilde{A} , которое образуется из дырок, связанных с ионизированными барьерными акцепторами. Электростатическое взаимодействие носителей заряда при низкой температуре изменяет плотность состояний в квантовой яме, исходно не зависящую от энергии, и приводит к появлению в ней кулоновской щели [1]. В данной работе для оценки влияния флуктуаций потенциала на энергетическую структуру квантовых ям были вычислены плотности всех состояний валентной зоны в зависимости от температуры для произвольных параметров квантовой ямы. При этом отдельно вычислялись плотности как заполненных, так и пустых состояний в зоне валентных связей и в примесных зонах A^+ и \tilde{A} .

В качестве физической модели квантовая яма представлялась в виде параллельных плоскостей, соответствующих барьера姆 и самой квантовой яме. Поскольку последняя изучалась при низких температурах и малых концентрациях легирования, дырки считались точечными зарядами, для которых справедлив закон Кулона. Значения диэлектрической проницаемости квантовой ямы и ее барьеров могут несколько отличаться, но мы



пренебрегли этим различием в силу близости указанных значений материалов ямы и барьера в структурах GaAs/AlGaAs. В такой системе барьерные заряженные центры считались неподвижными, а дырки в квантовой яме могли перемещаться в ее плоскости. Для того, чтобы программа выполнялась за конечное время, были использованы циклические граничные условия. Потенциальная энергия ε_i в плоскости квантовой ямы вычислялась (согласно принципу суперпозиции) как сумма взаимодействий со всеми положительными зарядами (U_i^+), с ионизированными барьерными акцепторами (U_i^-) и энергии локализации в данной точке ($\Delta\varepsilon_i$):

$$\varepsilon_i = U_i^+ + U_i^- - \Delta\varepsilon_i.$$

Оценки для значений радиусов и энергий локализации A^+ -центров и комплексов \tilde{A} были взяты из работы [3]. Для нахождения минимумов потенциала в плоскости квантовой ямы эта плоскость условно разбивалась на квадраты. Для простоты мы полагали, что дырки могут располагаться только в серединах квадратов. Весь расчет плотности состояний такой системы делился на два этапа. Первый заключался в нахождении локального минимума полной энергии системы при нулевой температуре. Для этого на очередном шаге вычислялись энергии во всех квадратах. Затем делалась попытка переноса наиболее энергичной дырки в квадрат с наименьшей энергией. В таком процессе изменение полной энергии системы выражалось как разность потенциальных энергий в конечной и начальной точках за вычетом добавки, связанной с кулоновским потенциалом самой переносимой дырки:

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1 - e^2/kr.$$

Если изменение оказывалось меньше нуля, то производился перенос и процесс повторялся. В противном случае предпринимались попытки всех возможных оставшихся переносов дырок. Некоторые из них также могли понизить полную энергию системы в силу существования кулоновской добавки $-e^2/kr$. В итоге система приводилась в локальный минимум полной энергии, что соответствовало ее состоянию при нулевой температуре.

На втором этапе программы вводился учет ненулевой температуры в системе, при этом для нахождения плотности состояний использовалась модификация алгоритма Метрополиса [4],

который в свою очередь представляет собой модификацию метода Монте-Карло. Система запускалась в случайные блуждания по фазовому пространству, что в данном случае соответствовало случайным перемещениям дырок как в плоскости квантовой ямы, так и в заданном нами диапазоне кинетических энергий $10 kT$ (от 0 до E_{\max}). На очередном шаге программы перебирались последовательно все частицы системы, и для каждой из них генерировалось случайное перемещение (по координате и по энергии), и при выполнении условия перехода из текущего состояния в случайно сгенерированное совершался перенос дырки. Таким образом, реализовывался процесс перемещения системы в фазовом пространстве. Однако для приведения в соответствие результатов численного моделирования и реального физического процесса генерирование очередного положения частицы выполнялось следующим образом. Геометрически это состояние выбиралось как равновероятное в любом квадрате, находящемся на расстоянии не более a относительно прежнего положения. Величина этого параметра выбиралась произвольной согласно алгоритму Метрополиса, однако ее значение (как и константы E_{\max}) влияет на скорость сходимости алгоритма. После определения координаты выбиралось отвечающее ей энергетическое состояние дырки. В наиболее общем случае в каком-либо из положений дырка могла оказаться в подзоне тяжелых или легких дырок, либо находиться в одном из двух локализованных состояний: на A^+ -центре или на барьерном акцепторе (на комплексе \tilde{A}). Однако эти состояния уже нельзя считать равновероятными, и одно из них выбиралось согласно соотношению $P_{fh} : P_{A^+} : P_{\tilde{A}}$, где буквы P с нижними индексами – величины относительного веса соответствующего состояния (fh – free hole – свободные дырки). Если при разбиении исследуемой плоскости внутри A^+ -центра (комплекса \tilde{A}) помещалось N_{A^+} ($N_{\tilde{A}}$) условных квадратов, то его относительный вес выражался как $P_{A^+} = 1/N_{A^+}$ ($P_{\tilde{A}} = 1/N_{\tilde{A}}$). Согласно формуле для плотности свободных состояний $D(E)$ в верхней зоне Хаббарда [2], в диапазоне от 0 до E_{\max} заключается

$$P_{fh} = D(E)sE_{\max}$$

состояний свободной дырки. Здесь s – площадь квадрата, на которые условно разделена плоскость квантовой ямы.



Если выбранное энергетическое состояние оказывалось делокализованным, то в нем равновероятно генерировалась случайная кинетическая энергия дырки.

Далее, на очередной шаг в фазовом пространстве накладывалось следующее условие:

$$\Delta\epsilon < 0, \text{ либо}$$

$$\xi < \exp(-\Delta\epsilon/kT), \xi \in (0; 1).$$

Если изменение $\Delta\epsilon$ полной энергии системы отрицательно, то такой шаг совершился. В противном случае генерировалось случайное число в диапазоне от 0 до 1, и если оно оказывалось меньше значения температурной экспоненты, то переход считался совершившимся. Это соответствовало совершению прыжка с указанной вероятностью. При таком алгоритме плотность состояний находилась как средняя величина по всей фазовой траектории.

Проведем анализ результатов численного моделирования (рис. 1). На графике представлены характерные плотности состояний при температуре 30 К. Расстояние между плоскостями составляет 150 Å, концентрации легирования барьеров и ямы – $1,5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, энергии локализации и радиусы A^+ -центров и комплексов \tilde{A} равны 8,5 мэВ, 100 Å и 7 мэВ, 60 Å соответственно. Интересной особенностью данного результата является то, что при близких энергиях связи A^+ и \tilde{A} , близких ра-

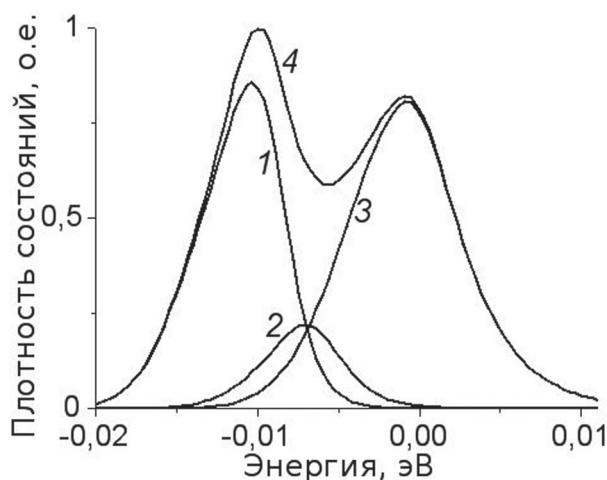


Рис. 1. Результат численного моделирования характерных плотностей состояний при температуре 30 К: A^+ (1), \tilde{A} (2), делокализованные дырки (3); 4 – суммарная плотность

диусах и равных концентрациях количества этих состояний очень сильно отличаются. Этот эффект связан с тем, что образование пары A^+ - и A^- -центров из комплекса \tilde{A} и A^0 -центра часто оказывается энергетически выгоднее благодаря добавочной энергии взаимодействия заряженных центров.

Проведем сравнение рассчитанных плотностей состояний с экспериментальными данными (рис. 2). На рис. 2, а представлены плотности состояний при различных температурах, полученные при помощи численного моделирования; на рис. 2, б – спектры фотолюминесценции квантовых ям GaAs/AlGaAs, содержащих A^+ -центры [5]. При низких температурах и малых интенсивностях накачки энергии всех электронов, участвующих в люминесценции, мы полагаем равными, а разностью сечений

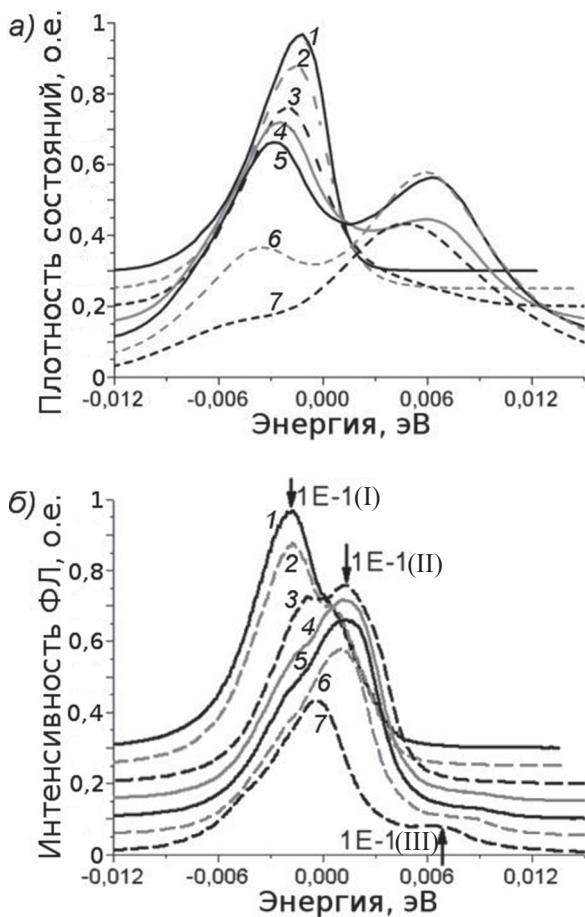
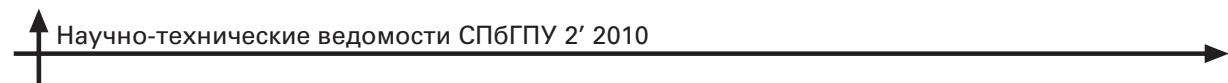


Рис. 2. Сравнение результатов численного моделирования (а) с экспериментальными спектрами фотолюминесценции (ФЛ) (б). Температура образца, К: 6 (1), 9 (2), 15 (3), 25 (4), 30 (5), 40 (6), 70 (7); концентрация центров $n(A^+) = n(\tilde{A}) = 1,5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, спейсер составляет 135 Å; максимумы ФЛ связаны с переходами на A^+ (I), на делокализованные тяжелые (II) и легкие (III) дырки



захвата различных центров пренебрегаем. Таким образом, интенсивность фотолюминесценции оказывается пропорциональной плотности состояний. Входные данные численного моделирования соответствуют параметрам исследуемого образца. Нулевая энергия на рис. 1 и 2 расположена на дне неискривленной флюктуациями валентной зоны. При низких температурах дырки локализованы на A^+ -центрах, что соответствует переходу зона–примесь. При высоких температурах большинство дырок делокализовано, что в свою очередь соответствует переходу на подзону легких и тяжелых дырок. Особенность полученных результатов заключается в следующем. В спектрах рекомбинации обычных образцов с нейтральной примесью пики переходов зона–зона и зона–примесь отстоят друг от друга точно на значение энергии связи. В данном случае сильные электростатические флюктуации уменьшают расстояние между пиками и делают его зависимым от всех параметров системы. Кроме основного результата, в нашей работе было показано существование кулоновской щели в плотности состояний при низких температурах и исследовано ее исчезновение при повышении температуры (рис. 3). На графиках представлены плотности состояний в квантовой яме, однако здесь, в отличие от предыдущих (см. рис. 1 и 2) показаны не только заполненные, но и вообще все возможные состояния дырок (верхние кривые при каждой температуре). При абсолютном нуле температур ясно наблюдается кулоновская щель, имеющая форму модуля, так как структура двумерна. При повышении температуры видно плавное закрытие щели в области температур около 10 К.

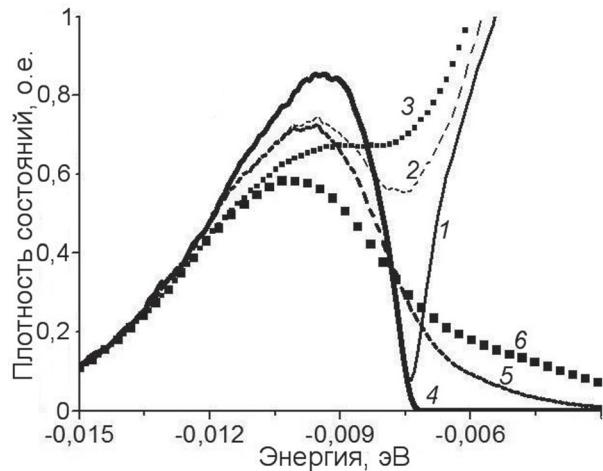


Рис. 3. Плотности различных состояний в квантовой яме при трех температурах T , К: 0 (1, 4); 8 (2, 5); 12 (3, 6). Состояния: только заполненные (4–6), все (пустые и заполненные) (1–3)

Такой результат хорошо согласуется с данными транспортных измерений подобных структур [6].

Итак, в данной работе получены плотности различных состояний в квантовых ямах GaAs/AlGaAs, что дает возможность в дальнейшем детальнее изучить механизм двумерной проводимости в квантовых ямах. В перспективе планируется введение в алгоритм программы учета кинетической энергии свободных носителей, возможности коррелированных прыжков и эффекта электронных поляронов.

Работа поддержана РФФИ (09-02-00904-а) и президентской программой «Ведущие научные школы» (НШ 3306.2010.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шкловский, Б.И. Электронные свойства легированных полупроводников [Текст] / Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. – М.: Наука, 1979. – 416 с.
2. Андо, Т. Электронные свойства двумерных систем [Текст] / Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. – М.: Мир, 1985. – 416 с.
3. Agrinskaya, N.V. Photoluminescence and transport in selectively doped p -GaAs/AlGaAs quantum wells: manifestation of the upper Hubbard band [Text] / N.V. Agrinskaya, Yu.L. Ivanov, P.A. Petrov [et al.] // Solid State Comm. – 2003. – Vol. 126. – № 7. – P. 369–372.
4. Metropolis, N. Equation of state calculations by fast computing machines [Text] / N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller [et al.] // J. Chem. Phys. – 1953.
5. Petrov, P.V. Optical studies of A^+ -centers in GaAs/AlGaAs quantum wells. Energy structure of the isolated centers, and their collective behavior [Text] / P.V. Petrov, Yu.L. Ivanov, V.E. Sedov [et al.] //



Physica B: Condensed Matter. – 2009. – Vol. 404. – № 23–24. – P. 5148.

6. Агринская, Н.В. Проявление кулоновской щели в двумерных структурах *p*-GaAs-AlGaAs

в условиях заполнения верхней зоны Хаббарда [Текст] / Н.В. Агринская, В.И. Козуб, В.М. Устинов [и др.] // Письма в ЖЭТФ. – 2002. – Т. 76. – Вып. 6. – С. 420.

УДК 537.312.62

Е.Г. Апушкинский, Б.П. Попов, В.К. Соболевский

ФЛУКСОИДНЫЕ КОЛЕБАНИЯ И ВОЛНЫ ВО ВНУТРЕННЕЙ ОБЛАСТИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

Линейные электродинамические процессы, свойственные явлению сверхпроводимости, хорошо изучены к настоящему времени, однако в исследовании нелинейных процессов делаются только первые шаги. Несмотря на существование ряда фундаментальных теорий указанных процессов, пока отсутствует ясное физическое толкование многих экспериментальных явлений, в частности долгоживущего радиочастотного эха [1–5]. Оно представляет собой специфический отклик сверхпроводящего материала, помещенного в постоянное магнитное поле, на импульсное воздействие ортогональным переменным магнитным полем. Это явление подробно изучено экспериментально и характеризуется временами релаксации, составляющими десятки минут и более; однозначной теоретической трактовки оно пока не имеет.

Согласно предлагаемой нами модели этого явления главной причиной эхо-сигнала являются незатухающие флюксоидные колебания и волны, распространяющиеся во внутренней области сверхпроводника. Рассмотрим поликристаллический порошкообразный высокотемпературный сверхпроводник (ВТСП), в котором формируется эхо-сигнал. Постоянное магнитное поле проникает в объем отдельной крупинки (моноокристалла) образца в виде флюксоидов (вихрей Абрикосова). Переменное магнитное поле способно проникнуть только в приповерхностную область моноокристалла. Под внутренней областью сверхпроводника (СП) будем понимать пространство, ограниченное поверхностью, которое находится на значительно большем расстоянии от поверхности, чем глубина проникновения радиочастотного поля λ . Кроме того, будем полагать, что сверхпроводник нахо-

дится в шубниковской фазе и расстояние между отдельными флюксоидами значительно больше λ ; что вихревые нити удерживаются за счет сил пиннинга на кристаллической решетке и не могут свободно перемещаться, т. е. рассматривается СП третьего рода.

Возбуждение колебания сверхпроводящих пар, образующих флюксоид, в этом случае может произойти за счет акустических колебаний кристаллической решетки, идущих от поверхности. Если последние носят импульсный характер, то в интервале между импульсами происходит затухание колебаний центров пиннинга, удерживающих флюксоид. При условии, что задержка между импульсами настолько большая, что возбужденное акустической волной движение центров пиннинга прекращается задолго до прихода второго импульса, можно говорить о колебаниях СП, образующих флюксоид между соседними точками пиннинга.

Математическая модель флюксоидных колебаний

Запишем уравнение движения вихревого смещения:

$$-\Gamma(B_0, x) \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} - \mathbf{F}_{rest}(\mathbf{v} - \mathbf{u}) + \\ + [\mathbf{j}_{RF} \times \mathbf{B}_0] + \mathbf{F}_t = m_f \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial t^2}, \quad (1)$$

подобное приведенному в статье [4]. Все использованные в данной работе обозначения физических величин совпадают с использованными в статье [1].

Рассмотрим входящие в уравнение (1) силы: $[\Gamma(B_0, x)\partial v/\partial t]$ – сила вязкого затухания движения вихрей, проявляющаяся только на концах флюксоидов за счет излучения и в точках пиннинга, где происходит передача энергии от колебаний вихревой решетки к колебаниям кристаллической. Данная сила должна расти с увеличением поля и температуры [2]. В экспериментах мы наблюдали рост затухания (рис. 1), что может свидетельствовать о росте $\Gamma(B_0, x)$ с ростом поля B_0 .

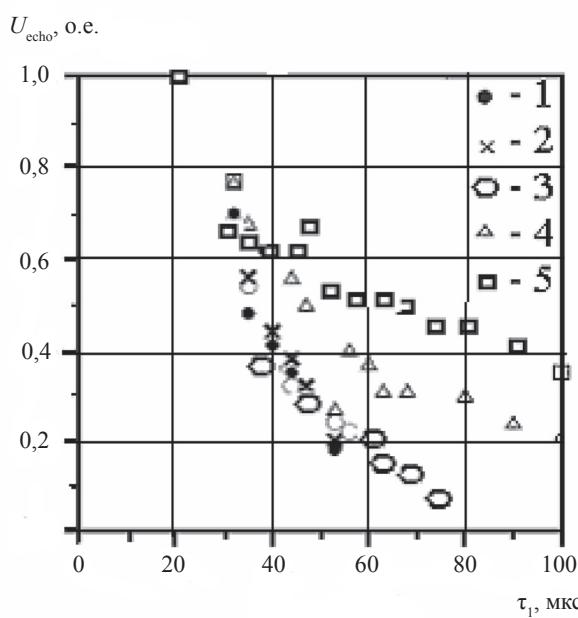


Рис. 1. Амплитуда двухимпульсного эха в зависимости от интервала между возбуждающими импульсами при различных величинах индукции внешнего магнитного поля B_0 , Т: 4,50 (1); 4,25 (2); 3,55 (3); 0,64 (4); 0,31 (5)

$F_{rest}(v - u)$ – возвращающая сила, обусловленная взаимодействием с другими флюксоидами и напряжением, вызванным случайно распределенными индивидуальными пиннинговыми центрами. В состоянии равновесия вихря эта сила равна нулю; вне этого состояния ее можно задать с помощью эмпирической формулы, полученной путем обобщения большого числа экспериментальных данных [3]:

$$F_{rest}(v - u) = \text{sgn}(v - u)B_0J_c\{1 - \exp[-|v - u|/r_p]\}.$$

Параметр r_p является мерой смещения, при котором начинает проявляться необратимость; он

слабо зависит от величины B_0 , обычно давая один пологий максимум.

$[\mathbf{j}_{RF} \times \mathbf{B}_0]$ – сила Ампера. Если плотность тока, наводимого отклонением флюксоида от состояния равновесия, записать как

$$\mathbf{j}_{RF} = \text{rot} \mathbf{H}_{\sim} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \partial / \partial x & \partial / \partial y & \partial / \partial z \\ 0 & 0 & H_{\sim} \end{vmatrix}$$

то

$$[\mathbf{j}_{RF} \times \mathbf{B}_0] = \mathbf{k}(B_0/\mu_0)\partial B_{\sim}/\partial x.$$

Индукция $B_{\sim}(x)$ на границе флюксоида определяется внешним воздействием (рис. 2), а при проникновении в глубь образца она спадает. Однако $B_{\sim}/B_0 = \partial v/\partial x$, так как

$$\tan \gamma = \partial v / \partial x = B_{\sim}/B_0.$$

Следовательно,

$$\partial^2 v / \partial x^2 = (1/B_0) \cdot \partial B_{\sim} / \partial x,$$

$$[\mathbf{j}_{RF} \times \mathbf{B}_0] = \mathbf{k}(B_0^2/\mu_0)\partial^2 v / \partial x^2 = \mathbf{k}C_{44}\partial^2 v / \partial x^2,$$

где введено обозначение $C_{44} = (B_0^2/\mu_0)$ для модуля упругости вихревой решетки.

F_t – случайная сила термического отклонения, которую будем считать равной нулю за счет временного усреднения.

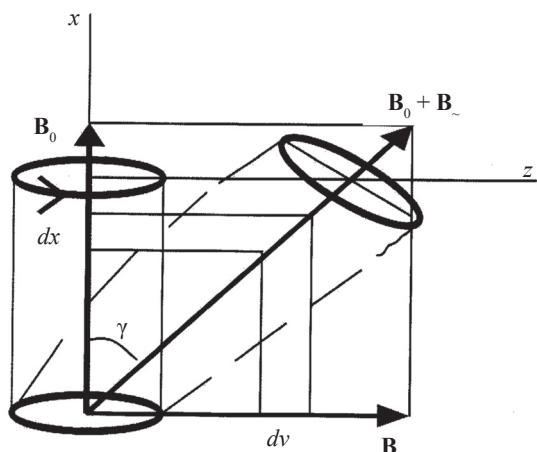


Рис. 2. Колебания вихря относительно положения равновесия под действием внешнего радиочастотного поля



С учетом преобразований уравнение (1) приобретает следующий вид:

$$C_{44} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \left[\Gamma(B_0, x) \frac{\partial v}{\partial t} \right] - B_0 J_c \operatorname{sgn}(v) \left\{ 1 - \exp \left[\frac{-|v|}{r_p} \right] \right\} = m_f \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}. \quad (2)$$

При условии, что смещение вихрей $v(x, t)$ значительно превосходит смещение узлов кристаллической решетки $u(x, t)$, в уравнении (2) вместо относительного смещения $[v(x, t) - u(x, t)]$ используется смещение $v(x, t)$ [4]. Если перейти к новой переменной $y = |v|/r_p \ll 1$ и учесть, что $B_0 J_c / (r_p C_{44}) = \alpha_L / C_{44}$, то получим следующее уравнение для относительного вихревого смещения:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \left[\frac{\Gamma(B_0, x)}{C_{44}} \right] \frac{\partial y}{\partial t} - \frac{\alpha L}{C_{44}} \operatorname{sgn}(y) \cdot [1 - \exp(-|y|)] = \frac{m_f}{C_{44}} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}. \quad (3)$$

Механизм образования долгоживущего эха в порошках ВТСП

Уравнение относительного вихревого смещения. Сигналы долгоживущего эха наблюдались как в обычных, так и в высокотемпературных сверхпроводниках [5]. Эти сигналы наблюдались после трех возбуждающих импульсов при условии, что временнóе расстояние между первыми двумя импульсами τ_1 было меньше времени фазовой релаксации колебаний кристаллической решетки T_2 . Задержка третьего импульса превосходила все ожидаемые для данных экспериментов времена релаксации и в реальных экспериментах составляла часы. При малых временах релаксации τ_2 (меньше одной минуты) сигнал долгоживущего эха довольно быстро спадал (примерно в e раз) при увеличении τ_2 , а далее оставался неизменным при дальнейшем росте τ_2 (рис. 3).

Такие особенности долгоживущего эха можно понять, если предположить, что в его образовании принимают участие два ансамбля нелинейных осцилляторов. Первый из них – это кристаллические решетки крупинок порошка ВТСП, в которых возникают фоновые колебания, а второй – это ансамбль флюксоидов, в котором каждый осциллятор имеет собственную частоту, отличную от

других за счет наличия некоторого распределения длин флюксоидов вызванного случайным выбором точек пиннинга. Колебания флюксоидов, находящихся внутри сверхпроводника, напоминают колебания струн с закрепленными концами в режиме стоячих волн. Они оказываются практически незатухающими, если в точках пиннинга колеблющихся флюксоидов находятся узлы стоячих волн. Сохранение фазы колебаний ансамблем флюксоидных осцилляторов и позволяет наблюдать долгоживущее эхо, возникающее после третьего импульса на интервале времени, не превышающем T_2 . Последнее объясняется тем, что волны, создаваемые флюксоидами внутри СП, могут выйти наружу только при наличии колебаний кристаллической решетки. Воздействие внешнего радиочастотного поля на флюксоиды в сверхпроводниках происходит только в приповерхностном слое, на глубине λ – проникновения радиочастотного поля в сверхпроводник [4]. Как уже отмечалось, движение флюксоидов в этом слое вызывает колебания кристаллической решетки сверхпроводника из-за достаточно жесткой связи флюксоидной и кристаллической решеток через центры пиннинга. Эти колебания в свою очередь возбуждают акустическую волну [4], которая может распространяться в глубь СП на весь его объем. В результате центры пиннинга внутри сверхпроводника также придут в движение, а это

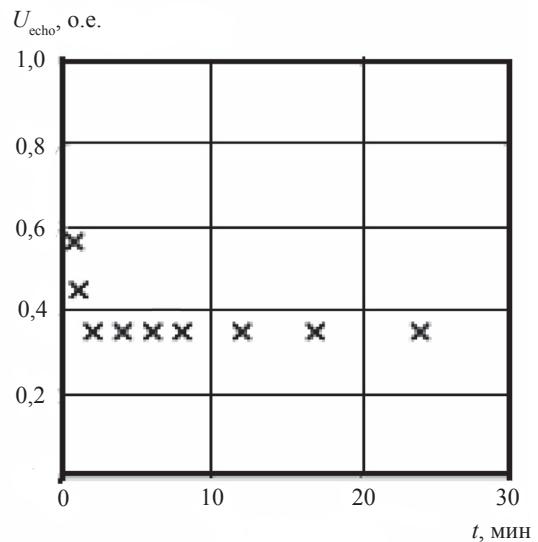
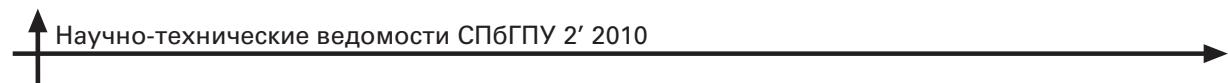


Рис. 3. Временная зависимость амплитуды долгоживущего эха



в свою очередь приведет к колебанию флюксоидов, прикрепленных к этим центрам. Отметим, что колебания кристаллической решетки спустя какое-то время затухнут, а колебания флюксоидов между внутренними центрами пиннинга – нет. В дальнейшем эти колебания могут проявиться в виде долгоживущего эха, которое наблюдается в высокотемпературных сверхпроводниках.

Рассмотрим уравнение (3) для относительно го вихревого смещения на интервале между двумя соседними точками пиннинга. Затухания между этими точками практически нет. Таким образом, на интервале времени $t \gg T_2$ можно пренебречь релаксационным членом в уравнении (3), так как акустические колебания в крупинке уже затухли. Тогда после элементарных преобразований уравнение (3) принимает вид

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - c_f^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + \Omega^2 \operatorname{sgn}(y)[1 - \exp(-|y|)] = 0, \quad (4)$$

и для $t \gg T_2$ относительное вихревое смещение $y = 0$ при $x = 0$, l_f . Здесь l_f – длина флюксоида между соседними точками пиннинга, $c_f^2 = C_{44}/\rho_f$, при чем c_f имеет размерность скорости, если ρ_f имеет размерность плотности, $\Omega^2 = \alpha_L/\rho_f = (J_c \mu_0)/(r_p \rho_f)$ и Ω имеет размерность частоты. Напомним, что $y < 1$.

Если рассматривать флюксоид как объект, порожденный круговым движением сверхпроводящих носителей, то можно легко провести аналогию между колебаниями флюксоидов и альфеновской волной, распространяющейся в плазме. Действительно, в обоих случаях происходят по-перечные колебания, распространяющиеся вдоль магнитного поля. Скорость распространяющихся по флюксоиду колебаний

$$c_f^2 = C_{44}/\rho_f = B_0^2/(\mu_0 n^* m^*),$$

где n^* и m^* – соответственно концентрация и эффективная масса сверхпроводящих носителей; она определяется точно так же, как скорость альфеновской волны в плазме (см. например [[6]]).

Равенство (4) – это нелинейное уравнение, для которого существует важный класс решений Римана (типа бегущих волн). В этом классе неизвестная функция зависит от координаты и времени не раздельно, а в комбинации $z = x - bt$, где b имеет смысл скорости распространения волны.

Исследуем эти решения. Делаем замену переменных, вводя $z = x - bt$ и новую функцию

$g(z) = g(x - bt) = y(x, t)$, причем $g(z) < 1$. Тогда уравнение (4) примет вид:

$$\frac{\partial^2 g}{\partial z^2} + q^2 \operatorname{sgn}(g)[1 - \exp(-|g|)] = 0, \quad (5)$$

где $q^2 = \Omega^2/(b^2 - c_f^2)$; q имеет размерность, обратную длине. Учитывая тот факт, что $g(z) < 1$, упростим уравнение (5) путем разложения экспоненты в ряд по степеням g .

Линейный случай. Начнем рассмотрение с указанного случая:

$$\frac{\partial^2 g}{\partial z^2} + q^2 |g| = 0$$

при условиях, что $g(0) = 0$, $g(l_f - bt) = u(l_f, t)$ – акустические колебания пиннинг-центра.

При возбуждении флюксоидной волны один конец флюксоида колеблется больше другого, поэтому считаем, что флюксоид возбуждается с одного конца при неподвижном втором. Тогда в флюксоиде образуется стоячая волна; это режим вполне линейный, и эха здесь быть не может.

Квадратичная нелинейность. Рассмотрим теперь поведение флюксоида с учетом квадратичной нелинейности в уравнении (5):

$$\frac{\partial^2 g}{\partial z^2} + q^2 \operatorname{sgn}(g)(|g| - |g|^2/2) = 0$$

при условиях, что $g(0) = 0$, $g(l_f - bt) = u(l_f, t)$ – акустические колебания пиннинг-центра. Если $g \geq 0$, то последнее уравнение имеет вид

$$\frac{\partial^2 g}{\partial z^2} + q^2 (g - g^2/2) = 0.$$

Условие $g \leq 0$ также приводит к данной ситуации. Это уравнение имеет частное решение [7]:

$$g = \frac{3}{\cos^2(qz/2)} = \frac{3}{\cos^2\{(1/2)(x-bt)\Omega/(b^2 - c_f^2)^{1/2}\}}.$$

Если $b > c_f$, то согласно этому решению, в точках

$$(1/2)(x - bt) \Omega / (b^2 - c_f^2)^{1/2} = \pi n/2,$$

где $n = \pm 1, \pm 2, \dots$, функция g должна уходить на бесконечность, т. е. имеет место некоторая неустойчивость, которая уже не попадает под ограничения квадратичной нелинейности при разложении экспоненты в ряд, и $g(z) < 1$. Поэтому рассмотрение этого решения не имеет особого смысла.

С другой стороны, если $b < c_f$, то $q = i|q|$ и

$$g = \frac{3}{\cos^2(i|q|z/2)} = \frac{3}{\operatorname{ch}^2\{|q|z/2\}} = \\ = \frac{3}{\operatorname{ch}^2\{(1/2)(x-bt)\Omega/(b^2 - c_f^2)^{1/2}\}}.$$

Это решение, как известно [6, 7], является уединенной волной, или солитоном с характерной шириной

$$(1/2)\Omega/(b^2 - c_f^2)^{1/2}.$$

Отметим, что такой солитон, приближаясь к центру пиннинга, может отразиться, а может переместиться за центр пиннинга. Последнее возможно, например, если центр пиннинга колеблется и при приближении к нему флюксоида солитона его амплитуда окажется равной амплитуде солитона. Полное отражение солитона будет происходить, когда центры пиннинга покоятся.

Солитон, представленный данным уравнением, имеет ту особенность, что его ширина Δ (расстояние, на котором амплитуда солитона падает в e раз) связана со скоростью солитона соотношением

$$\Delta = 2(b^2 - c_f^2)^{1/2}/\Omega; b = (c_f^2 - \Delta^2\Omega^2/4)^{1/2}.$$

В таком режиме возможно построение на базе флюксоидов высокостабильных генераторов.

Кубическая нелинейность. Сохраним теперь в разложении экспоненты в уравнении (5) все слагаемые до кубического включительно (ограничение кубической нелинейностью вызвано тем, что это наименьшая степень нелинейности, которая дает эффект эха):

$$\frac{\partial^2 g}{\partial z^2} + q^2 \operatorname{sgn}(g)(|g| - |g|^2/2 + |g|^3/6) = 0 \quad (6)$$

при условиях $g(0) = 0, g(l_f - bt) = u(l_f, t)$ – акустические колебания пиннинг-центра; $u(l_f, t > \tau_1 + T_2) = 0$. Если $g \geq 0$, то уравнение (6) будет иметь вид

$$\frac{\partial^2 g}{\partial z^2} + q^2(g - g^2/2 + g^3/6) = 0. \quad (6a)$$

Условие $g \leq 0$ также приводит уравнение (6) к виду (6a). Обратим внимание на тот факт, что для $0 < g < 1$ величина

$$g > g - (1/2)g^2 + (1/6)g^3 > g - (1/2)g^2.$$

Действительно, очевидно что

$$g > g - (1/2)g^2; \\ g - (1/2)g^2 + (1/6)g^3 > g - (1/2)g^2,$$

а $g > g - (1/2)g^2 + (1/6)g^3$, если $g < 3$.

Таким образом, возвращающая сила при относительных отклонениях флюксоида, меньших единицы, должна быть больше при учете кубической нелинейности, чем при учете только квадратичной, т. е. добавление кубического члена к квадратичному не отдаляет решение от линейной задачи, а наоборот, приближает к ней. Это позволяет предположить существование в задаче с кубической нелинейностью периодических решений, сходных с решениями в линейной.

Проверим выдвинутое предположение. Первый интеграл уравнения (6a) можно легко получить. Введем новую переменную $g_1 = \partial g / \partial z$, разделим переменные и в результате интегрирования уравнения (6a) получим:

$$\left(\frac{\partial g}{\partial z} \right)^2 + q^2(g^2 - g^3/3 + g^4/12) = C = \text{const.} \quad (7)$$

Полученное уравнение определяет траекторию движения относительного смещения флюксоида в фазовой плоскости. Поскольку $g < 1$, то с достаточной степенью точности можно утверждать, что данные траектории согласно уравнению (7) будут представлять собой окружности и соответственно будут замкнуты (рис. 4). Поэтому можно говорить о наличии периодичности в рассматриваемом движении, которое описывается уравнением (6) [8]. Таким образом, решение уравнения (6) следует искать в виде некоторой периодической функции, у которой в принципе возможны как изменения амплитуды, так и фазы. Однако можно полагать, что флюктуации амплитуды должны быть значительно меньше флюктуации фазы, поскольку с амплитудой связана сохраняющаяся величина, а именно плотность энергии.

Действительно, как уже отмечалось, колебания флюксоида между центрами пиннинга не испытывают затухания, и поэтому можно предполагать лишь небольшое перераспределение энергии по волне, при этом изменения фазы ничем не ограничены. Таким образом, для дальнейшего исследования уравнения (6a) оказывается естественным применение метода медленно меняющихся

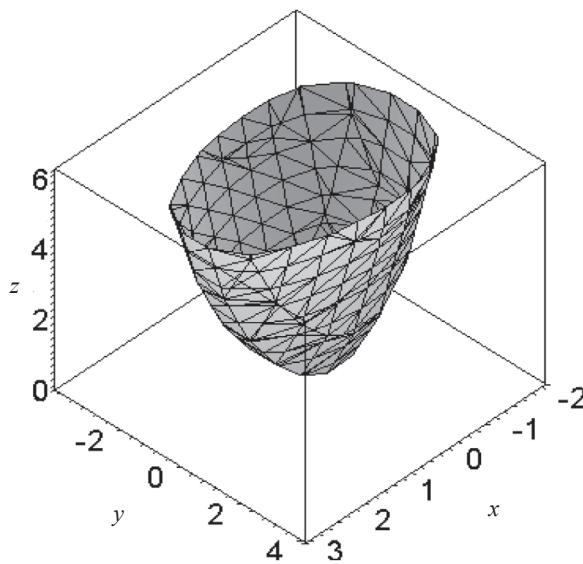


Рис. 4. Зависимость фазовых траекторий уравнения (7) от константы интегрирования C при $q^2 = 1$
($x = g$, $y = \partial g / \partial z$, $z = C$)

амплитуд, согласно которому решение уравнения (6а) следует искать в виде

$$g(z) = \frac{p(z) \exp\{-ik_0 z\} + p^*(z) \exp\{ik_0 z\}}{2}. \quad (8)$$

Подставляя решение (8) в уравнение (6а) и пренебрегая вторыми производными от амплитуд как величинами более высокого порядка малости, по сравнению с первыми и нулевыми производными, получим дифференциальное уравнение первого порядка относительно амплитуды p . В нем слагаемые будут иметь следующие фазы: $\pm ik_0 z$, $\pm 2ik_0 z$, $\pm 3ik_0 z$. В методе медленно меняющихся амплитуд (методе Ван-дер-Поля) расчет ведется по первой гармонике, поэтому постоянными составляющими и высшими гармониками пренебрегаем. В результате получим, что уравнение (6а) выполняется при условии

$$\operatorname{Re} \left\{ \left[-ik_0 \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{k_0^2 p}{2} + \frac{q^2 p}{2} + \frac{q^2 p (p^*)^2}{16} \right] \times \exp(-ik_0 z) \right\} = 0 \quad (9)$$

Представим функцию, где $p(z) = |p(z)| \exp[i\psi(z)]$. Если учесть, что $\psi(z) \ll k_0 z$, то решением уравнения будет решение следующей системы:

$$k_0 \frac{\partial |p|}{\partial z} = 0;$$

$$k_0 |p| \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{|p|(q^2 - k_0^2)}{2} + \frac{|p|^3 q^2}{16} = 0, \quad (10)$$

откуда $|p| = p_0 = \operatorname{const}(z)$. Второе уравнение из системы (10) дает

$$k_0 (\partial \psi / \partial z) + (1/2)(q^2 - k_0^2) + (1/16)|p|^2 q^2 = 0;$$

$$\partial \psi / \partial z = (1/2)(k_0^2 - q^2)/k_0 - (1/16)|p|^2 q^2/k_0,$$

$$\psi(z) = \psi_0 + [(1/2)(k_0^2 - q^2)/k_0 - (1/16)p_0^2 q^2/k_0]z,$$

где $\psi_0 = \operatorname{const}(z)$.

В результате получаем функцию вида

$$p(z) = p_0 \exp \left\{ i \left[\psi_0 + \frac{k_0 z}{2} \left(1 - \frac{q^2}{k_0^2} \left(1 + \frac{p_0^2}{8} \right) \right) \right] \right\}. \quad (11)$$

Из полученной формулы видно, что фаза рассматриваемых колебаний оказывается зависящей от амплитуды. Как отмечено в книге [9], если подобным видом нелинейности обладает каждый элемент ансамбля, то в таком ансамбле возможно образование эха. Покажем это для рассматриваемого нами ансамбля колеблющихся флюксоидов, понимая под элементом ансамбля флюксоид (или часть флюксоида) между двумя соседними точками пиннинга.

Модель ангармонических осцилляторов для флюксоидов. Процесс возбуждения флюксоида через точки пиннинга аналогичен возбуждению струны через свободный конец при условии, что другой конец закреплен. Действительно, ионы в точках пиннинга совершают фононные колебания как соседние точки стоячей акустической волны, возбужденной в крупинке СП, поэтому они будут иметь разную амплитуду колебаний, и в системе отсчета, связанной, допустим, с точкой пиннинга, совершающей колебания меньшей амплитуды, флюксоид будет эквивалентен струне, закрепленной на одном конце и возбужденной на другом. Подставляя функцию (11) в выражение (8), получим в режиме бегущей волны выражение для функции $y(x, t) = g(x - bt)$ соответственно:

$$y(x, t) = p_0 \cos \left\{ \psi_0 - \frac{k_0}{2} \left[1 + \frac{q^2}{k_0^2} \left(1 + \frac{p_0^2}{8} \right) \right] x + \frac{k_0}{2} \left[1 + \frac{q^2}{k_0^2} \left(1 + \frac{p_0^2}{8} \right) \right] bt \right\}. \quad (12)$$



В режиме стоячей волны абсолютное отклонение $v(x, t)$ будет выражаться как сумма падающей и отраженной волн:

$$v(x, t) = 4p_0 r_p \sin \left\{ \Psi_0 + \frac{k_0}{2} \left[1 + \frac{q^2}{k_0^2} \left(1 + \frac{p_0^2}{8} \right) \right] bt \right\} \times \times \sin \left\{ \frac{k_0}{2} \left[1 + \frac{q^2}{k_0^2} \left(1 + \frac{p_0^2}{8} \right) \right] x \right\}. \quad (13)$$

Отметим, что в отсутствие колебаний кристаллической решетки, т. е. после их затухания, в точке пиннинга $x = l_f$ и $v(l_f, t) = 0$. Последнее естественно возможно, если

$$(k_0/2)[1 + q^2/k_0^2(1 + p_0^2/8)]l_f = \pi n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Тогда для основной моды колебаний $n = 1$ согласно выражению (13) получаем:

$$v(x, t) = 4p_0 r_p \sin \left\{ \Psi_0 + \frac{\pi b t}{l_f} \right\} \sin \left\{ \frac{\pi x}{l_f} \right\}. \quad (14)$$

Именно эти колебания флюксоида внутри СП могут существовать сколь угодно долго, сохранив информацию в виде фазы Ψ_0 о возбуждении, их вызвавшем. Действительно, при неподвижных точках пиннинга волна остается стоячей, а потеря на излучение нет, так как выйти это излучение из сверхпроводника не может. Возбуждение этих флюксоидных колебаний, как уже отмечалось, совершается колебаниями ионов кристаллической решетки в центрах пиннинга $u(x = l_f, t)$. При этом для простоты предполагается, что один конец $x = 0$ закреплен, а другой $x = l_f$ совершает колебания, жестко следя за центром пиннинга (закрепление флюксоида на центрах пиннинга считаем жестким). Тогда $v(x = l_f, t) = u(x = l_f, t)$.

Отметим, что рассматривается внутренний флюксоид, находящийся от края на некотором расстоянии $x = x_i \gg \lambda$.

В опытах со сверхпроводником колебания центров пиннинга вызываются третьим возбуждающим импульсом. Действительно, после того как затухнут колебания кристаллической решетки, обусловленные вторым возбуждающим импульсом, т. е. через время T_2 после его окончания, в сверхпроводнике останутся лишь колебания флюксоидов между центрами пиннинга. Эти колебания не затухают. Третий возбуждающий импульс через флюксоиды на границе сверхпровод-

ника возбуждает акустическую волну, которая проникает вовнутрь и там возбуждает центры пиннинга, к которым присоединен флюксоид. Частоты флюксоидных и акустических колебаний совпадают, поэтому по флюксоиду побежит волна, которая не будет затухать на центрах пиннинга, а достигнув границы сверхпроводника, вызовет колебания конца флюксоида, за счет которых и наведется сигнал в приемной катушке. Явление эха нужно здесь только для того, чтобы синхронизировать колебания разных флюксоидов, слегка отличающихся по частотам за счет различных длин l_f . Реальная форма и временная расстановка возбуждающих флюксоид импульсов представлена на рис. 5. Отметим, что сделано допущение, согласно которому $\Delta t_1 = \Delta t_2 = \Delta t_3 = \Delta t$ (это удобно для упрощения дальнейших рассуждений); $\tau_1, \tau_2, T_2 \gg \Delta t$; $T_2 > \tau_1$; $\tau_2 \gg \tau_1, T_2$. Суммарное воздействие трех импульсов в момент времени $t > \tau_2$ выражается как

$$p_0 = p_1 + p_2 + p_3 = |p_1| \exp[i\omega] + + |p_2| \exp[i\omega(t - \tau_1)] + |p_3| \exp[i\omega(t - \tau_2)], \quad (15)$$

где ω – собственная частота акустических колебаний в крупинке сверхпроводящего порошка. Используя формулу (13), найдем производную от отклонения флюксоида по оси x для определения магнитного поля, наводящего сигнал в приемной катушке:

$$\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{x=0} = p_0 r_p k_0 \left[1 + \frac{q^2}{k_0^2} \left(1 + \frac{p_0^2}{8} \right) \right] \times \times \sin \left\{ \frac{k_0}{2} \left[1 + \frac{q^2}{k_0^2} \left(1 + \frac{p_0^2}{8} \right) \right] bt \right\}.$$

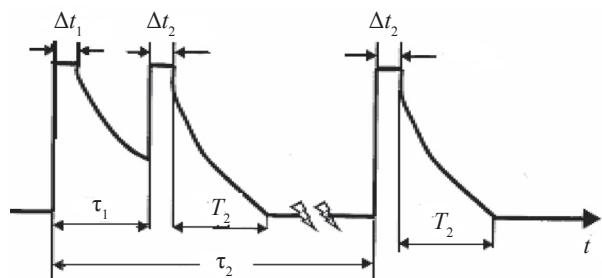
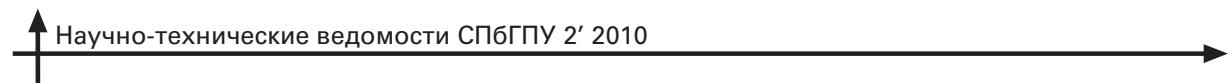


Рис. 5. Форма импульсов, возбуждающих флюксоидные колебания



В этой формуле за счет разложения $p_0|p_0|^2$ по формуле (15) будет присутствовать ряд слагаемых, среди которых имеется следующее:

$$p_1^* p_2 p_3 = 2|p_1||p_2||p_3| \exp\{i\omega[t - (\tau_1 + \tau_2)]\}. \quad (17)$$

Именно оно определяет сигнал долгоживущего эха, так как в момент $t = \tau_1 + \tau_2$ сигнал от собственной частоты крупинки и, следовательно, сигналы от всех крупинок сверхпроводящего порошка будут складываться когерентно. В результате суммарный сигнал долгоживущего эха будет выражаться как

$$\begin{aligned} B_{\tau_1+\tau_2}^{\Sigma}(t) &= \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} G(\omega) B_0 \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} d\omega = \\ &= B_0 |p_1||p_2||p_3| \frac{\Omega^2 c_f^2}{b^2 - c_f^2} \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} G(\omega) \frac{\omega}{4} \times \\ &\times \sin \left\{ \frac{\omega b t}{2 c_f} \left[1 + \frac{\Omega^2 c_f^2}{\omega^2 (b^2 - c_f^2)} \left(1 + \frac{|p_0|^2}{8} \right) \right] \right\} \times \\ &\times \exp\{i\omega[t - (\tau_1 + \tau_2)]\} d\omega. \quad (18) \end{aligned}$$

Обсуждение результатов

Формула (18) качественно согласуется с экспериментальными данными. Действительно, как видно из рис. 3 и 6, сигнал акустического стимулированного эха определяет эхо-сигнал после трехимпульсного воздействия при малых временах τ_2 , где он просто суммируется с флюксоидным эхом. Однако с увеличением τ_2 вклад флюксоидного эха будет преобладать, так как акустическое эхо затухает, а флюксоидное – нет. Амплитуда флюксоидного эха при малых τ_2 будет меньше амплитуды акустического, причем это будет тем заметнее, чем l_f меньше l – диаметра крупинки, так как увеличение числа центров пиннинга уменьшает амплитуду колебаний флюксоида между двумя точками пиннинга. В наших экспериментах амплитуда фононного эха отличалась от амплитуды долгоживущего примерно в три раза (см. рис. 3),

а это свидетельствует о том, что расстояние между центрами пиннинга l_f примерно в три раза меньше диаметра крупинки порошка. Действительно, при условии синусоидальной стоячей звуковой волны в крупинке колебания будут меньше в три раза относительно максимального значения в точке, отстоящей от края на одну шестую диаметра крупинки. В этой точке они не затухают, следовательно, центр пиннинга должен быть на расстоянии одной трети диаметра от края. Таким образом, длина флюксоидной волны будет $\lambda_f = (2/3)l$. Средний диаметр крупинки исследуемого нами порошка – 35 мкм, откуда средняя длина флюксоидной волны $\lambda_f = 24$ мкм. Эта поперечная волна, обусловленная колебаниями СП носителей и приводящая к искривлению силовых линий магнитного поля внутри СП, бежит вдоль линий поля. Как уже отмечалось, это (по своей сути) альфвеновская волна. В рассматриваемом случае частота этой волны значительно меньше частоты циклотронного вращения СП-пар, образующих флюксоид, поэтому ее скорость не зависит от частоты [6], т. е. $c_f = \lambda_f f$, где f – частота возбужденных колебаний, равная 30,7 МГц. Тогда усредненная скорость $c_f \approx 750$ м/с. С другой стороны, $c_f^2 = C_{44}/\rho_f$ откуда можно легко оценить плотность флюксоида: $\rho_f \approx 1,5$ кг/м³, так как $C_{44}(B_0 = 1 \text{ Т}) = B_0^2/\mu_0 = 8 \cdot 10^5 \text{ Т}^2 \cdot \text{м/Гн}$. Соответственно линейная плотность массы флюксоида будет $\mu_f = \rho_f \pi \xi^2 \approx 6,32 \cdot 10^{-17}$ кг/м. Интересно этот

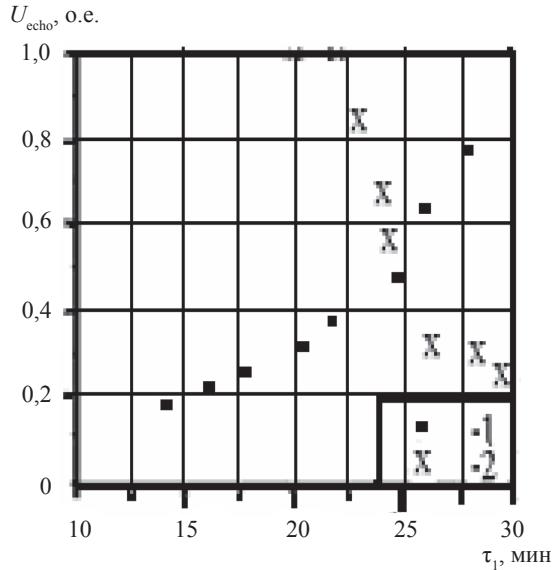


Рис. 6. Зависимость эхо-сигнала от интервала t между первым и вторым импульсами при трехимпульсном возбуждении:
 $t = 2\tau_2 - \tau_1$ (1); $t = \tau_1 + \tau_2$ (2)



результат сравнить с некоторыми результатами других авторов (см. таблицу).

Значения линейной плотности массы флюксоида по оценкам различных авторов

Оценка	Материал	$T, \text{К}$	$\mu_f, \text{кг/м}$	Литературный источник
Теоретическая по БКШ	Низкотемпературный СП	4,4	$1,0 \cdot 10^{-21}$	[12]
Теоретическая по кинетической энергии вихря	Купраты	4,4	$7,5 \cdot 10^{-20}$	[10]
Экспериментальная	YB_6	4,4	$1,0 \cdot 10^{-18}$	[11]
Экспериментальная	ВТСП	77	$6,3 \cdot 10^{-17}$	Данная работа

Обращает на себя внимание широкий разброс значений, представленных в таблице. Наш результат оказался максимальным и на порядок больше, чем аналогичная экспериментальная оценка, приведенная в работе [11]. Однако следует иметь в виду, что наши измерения проводились при 77 К, тогда как у авторов [11] – при 4,4 К, когда диаметр флюксоида должен быть меньше и, соответственно, меньше его линейная плотность.

В работе [10] для соединения, аналогичного используемому в наших опытах, приведены результаты измерения коэффициента силы Магнуса с использованием эффекта Фарадея:

$$\alpha_m(\Phi_0/B_0) = \pi \hbar n^*,$$

где n^* – концентрация СП носителей.

Для $B_0 = 5 \text{ Т}$ и $T = 77 \text{ К}$ значение $\alpha_m \approx 10^{-7} \text{ кг/мс}$. Отсюда находим $n^* \approx 3 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$. Соответственно эффективная масса сверхпроводящих носителей $m^* = \rho_f/n^* \approx 5 \cdot 10^{-27} \text{ кг} \approx 5 \cdot 10^3 m_0$, где m_0 – масса электрона.

Аналогичная оценка для купратов по значению $\mu_f \approx 7,5 \cdot 10^{-20} \text{ кг/м}$ из работы [10] дает $m^* \approx 7m_0$, а для YB_6 (но с концентрацией СП-носителей для купратов) – $m^* \approx 70m_0$.

В заключение отметим, что если рассматривать сверхпроводник как систему флюксоидных осцилляторов, совершающих незатухающие колебания, и использовать для их описания нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка с кубической нелинейностью, то можно понять особенности наблюдаемых радиочастотных сигналов долгоживущего эха. Рассмотренный нами механизм образования долгоживущего эха в порошках ВТСП может лieчь в основу принципа записи и хранения информации на незатухающих колебаниях флюксоидов внутри сверхпроводника.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Van der Beek, C.Y.** Linear and nonlinear a-c response in the superconducting mixed state [Text] / C.Y. Van der Beek, V.B. Geshkenbein, V.M. Vinokur // Phys. Rev. B. – 1993. – Vol. 48. – № 5. – P. 3393 – 3403.
2. **Pankert, J.** Ultrasonic attenuation by the vortex lattice of high- T_c superconductors [Text] / J. Pankert, G. Marbach, A. Comberg, [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 1990. – Vol. 65. – № 24. – P. 3053 – 3055.
3. **Campbell, A.M.** Critical currents in superconductors [Text] / A.M. Campbell, Y.E. Evtets. – London: Taylor and Francis Ltd., 1972.
4. **Haneda, H.** Generation and detection of transverse ultrasonic waves via vortex tilting in super conductive $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ [Text] / H. Haneda, T. Ishigura, M. Miriam // Appl. Phys. Lett. – 1996. – Vol. 68. – № 23. – P. 3335 – 3337.
5. **Апушкинский, Е.Г.** Эхо в порошках высокотемпературных сверхпроводников [Текст] / Е.Г. Апушкинский, М.С. Астрон, В.В. Долбиев [и др.] // Научное приборостроение. – 1992. – Т. 2. – № 2. – С. 54 – 64.
6. **Крол, Н.** Основы физики плазмы [Текст]: учеб. пос. для вузов/ Н. Крол, А. Трайвелпис. – М.: Мир, 1975. – 525 с.
7. **Кадомцев, Б.Б.** Коллективные явления в плазме [Текст] / Б.Б. Кадомцев. – М.: Наука, 1988. – 304 с.
8. **Stoker, J.J.** Nonlinear vibrations in mechanical and electrical systems [Text] / J.J. Stoker. – New York, 1950. – 264 р.
9. **Голдин, Б.А.** Спин-фононные взаимодействия в кристаллах (ферритах) [Текст] / Б.А. Голдин,

Л.Н. Котов, Л.К. Зарембо [и др.] – Л.: Наука, 1991. – 148 с.

10. **Dominguez, D.** Interaction of vortex lattice with ultrasound and the acoustic Faraday effect [Text] / D. Dominguez, L. Bulaevskii, B. Ivlev [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 1995. – Vol. 74. № 74. – P. 2579–2582.

11. **Филь, В.Д.** Масса абрикосовского вихря [Текст] / В.Д. Филь, Т.В. Игнатова, Д.В. Филь [и др.] // Физика низких температур. – 2007. – Т. 33. – № 12. – С. 1342 – 1346.

12. **Suhl, H.** Inertial mass of a moving fluxoid [Text] / H. Suhl // Phys. Rev. Lett. – 1965. – Vol. 14. – № 7. – P. 226 – 229.



Математическое моделирование физических процессов

УДК 517.097

В.П. Первадчук, Д.Б. Шумкова

ОПТИМАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ В ЗАДАЧАХ С ПОДВИЖНЫМ ТЕПЛОВЫМ ИСТОЧНИКОМ

Теория оптимального управления системами с распределенными параметрами интенсивно изучается и остается актуальной на протяжении нескольких десятков лет. Центральными теоретическими проблемами описания дифференциальных уравнений, их систем и распределенных задач, в том числе и задач оптимального управления распределенными системами являются проблемы, связанные с однозначной разрешимостью, получением необходимых и достаточных условий разрешимости вариационных постановок, а также с непосредственным численным решением. Особый интерес представляют задачи оптимального управления распределенными системами в своих нелинейных постановках. Нелинейность относительно функции управления в дифференциальной задаче приводит к необходимости применения специальных методов теоретического исследования и численного решения [1, 2].

Производство оптических волокон представляет собой сложный высокоточный технологический процесс, включающий в себя различные физико-химические явления. К оптико-механическим характеристикам кварцевых заготовок при производстве кварцевых световодов предъявляются жесткие требования. Качество волоконно-оптических световодов в первую очередь зависит от технологического процесса газофазного осаждения (легирования). Поэтому математическое моделирование и управление этим процессом весьма важно и актуально.

Легирование, которое осуществляется, как правило, с помощью технологии MCVD (Modified Chemical Vapor Deposition – модифицированное химическое газофазное осаждение) – сложный физико-химический процесс, и пока он мало изучен. Практика показывает, что газофазное осаждение

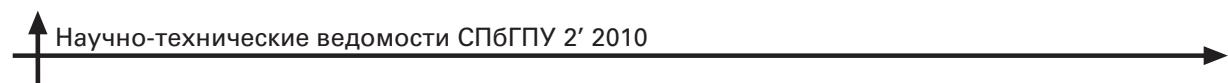
в сильной степени зависит от температуры. Поэтому проблема оптимального управления этим процессом может быть приведена к задаче управления температурным полем в заготовке, которое описывается нестационарным уравнением теплопроводности; в качестве управляющего параметра может быть выбрана скорость движения горелки.

Постановка задачи

Рассмотрим технологический процесс легирования заготовки газофазным осаждением по методике MCVD. Создание волокна происходит в два этапа. На первом изготавливается цилиндрическая заготовка с заданным профилем показателя преломления путем осаждения из газовой фазы легирующего слоя на внутренней поверхности цилиндрической заготовки. Этот этап является определяющим в технологии изготовления качественного волокна и требует точного соблюдения условий, гарантирующих получение заготовки с заданными параметрами. На второй стадии заготовку вытягивают. Предполагается, что во время вытяжки отношение внешнего диаметра волокна к диаметру сердцевины в любой момент времени сохраняется.

Для получения сердцевины волокна с нужным профилем показателя преломления (показатели преломления оболочки и сердцевины отличаются), применяются различные примеси (легирующие добавки).

В ходе этого процесса опорная кварцевая трубка вращается в герметичных муфтах и нагревается до температуры 1200–1800 °C двигающимся вдоль продольной оси пламенем кислородно-водородной горелки (рис. 1). Внутрь трубы подается смесь кислорода с парами некоторых



из следующих веществ: тетрахлориды кремния и германия, бромид бора, оксихлорид фосфора, шестифтористая сера и другие. В зоне разогрева горелки парообразные реагенты окисляются. Частицы образовавшихся оксидов размером около 0,1 мкм осаждаются на внутренние стенки трубы и сплавляются, образуя слой легированного соответствующим образом кварца. Подбором концентрации компонентов смеси на входе в трубку, температуры факела и скорости его движения можно получить требуемую скорость осаждения слоя и его показатель преломления. После определенного количества проходов (с изменямыми концентрациями реагентов, скоростью движения горелки и температурой ее факела) и сплавления с помощью той же горелки (при более высокой температуре) объекта в монолитный цилиндрический стержень получается преформа (предзаготовка). В дальнейшем эти преформы химически, механически и термически обрабатываются и собираются в заготовки, из которых вытягивают оптическое волокно.

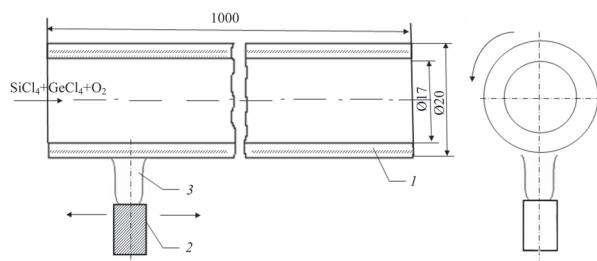


Рис. 1. Схематическое изображение установки газофазного осаждения:

1 – кварцевая трубка; 2 – движущаяся горелка (стрелки показывают направления движения); 3 – факел

Решающая роль в процессе газофазного осаждения добавок принадлежит температуре. В связи с этим на первом этапе оптимального управления процессом MCVD необходимо сформулировать задачу об оптимальном управлении температурным полем кварцевой трубы [5].

Математическая модель нагрева кварцевой трубы подвижным источником получена при следующих предположениях:

теппературное поле кварцевой трубы осесимметричное;

теплообмен с внешней окружающей средой и газом, текущим внутри трубы, описывается законом Ньютона;

теплофизические характеристики – постоянные величины;

тепловой поток от факела изменяется вдоль оси z по следующему закону:

$$q = q_{\max} \exp \left\{ - \left[\left(z - \int_0^t u(\xi) d\xi \right) / H \right]^2 \right\}, \quad (1)$$

где $u(\xi)$ – скорость движения горелки (функция управления), H – ширина пламени горелки, q_{\max} – мощность горелки, t – время, z – пространственная переменная вдоль оси заготовки.

Тогда в цилиндрической системе координат (r, φ, z) уравнение теплопроводности запишется в виде:

$$\rho c \frac{\partial \Theta}{\partial r} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda \frac{\partial \Theta}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \frac{\partial \Theta}{\partial z} \right), \quad (2)$$

начальное и краевые условия на цилиндрических поверхностях имеют следующий вид:

$$\Theta(z, 0) = \Theta_0(z); \quad (3)$$

$$\lambda \frac{\partial \Theta}{\partial r} \Big|_{r=r_0} = \alpha_r (\Theta - \Theta_r); \quad (4)$$

$$\lambda \frac{\partial \Theta}{\partial r} \Big|_{r=R} = -\alpha_c (\Theta - \Theta_c) + q(z, t), \quad (5)$$

где Θ , ρ , c , λ – температура, плотность, удельная теплоемкость и теплопроводность кварца соответственно; α_r , α_c – коэффициенты теплообмена с газом и внешней средой; Θ_r , Θ_c – температура газа и внешней среды; r_0 , R – внутренний и внешний радиусы цилиндра.

Сделав еще одно предположение о независимости температуры от радиуса r (что вполне допустимо благодаря малой толщине стенки трубы), проинтегрируем обе части уравнения (2) по области $D = \{(r, \varphi) | r_0 \leq r \leq R; 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$:

$$\iint_D \rho c \frac{\partial \Theta}{\partial t} r d\varphi dr = \iint_D \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda \frac{\partial \Theta}{\partial r} \right) r d\varphi dr + \iint_D \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial \Theta}{\partial z} \right) r d\varphi dr.$$

Тогда с учетом условий (4) и (5) первый интеграл в правой части последнего уравнения примет вид:

$$\begin{aligned} \iint_D \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda \frac{\partial \Theta}{\partial r} \right) d\varphi dr &= 2\pi \left(r \lambda \frac{\partial \Theta}{\partial r} \right) \Big|_{r_0}^R = \\ &= 2\pi R \lambda \frac{\partial \Theta}{\partial r} \Big|_{r=R} - 2\pi r_0 \lambda \frac{\partial \Theta}{\partial r} \Big|_{r=r_0} = \\ &= 2\pi R (-\alpha_c (\Theta - \Theta_c) + q(z, t)) - 2\pi r_0 \alpha_r (\Theta - \Theta_r). \end{aligned}$$



После интегрирования разделим обе части уравнения теплопроводности на $\rho c \pi (R^2 - r_0^2)$ и получим:

$$\frac{\partial \Theta(t, z)}{\partial t} - a \frac{\partial^2 \Theta(t, z)}{\partial z^2} + \alpha \Theta(t, z) = F(u, t, z). \quad (6)$$

Здесь a – коэффициент температуропроводности;

$$\alpha = \frac{S_R \alpha_c + S_{r_0} \alpha_r}{\rho c V};$$

$$F(u, t, z) = \frac{S_R}{\rho c V} q(z, t) + \frac{S_R \alpha_c}{\rho c V} \Theta_c + \frac{S_{r_0} \alpha_r}{\rho c V} \Theta_r,$$

$z \in (0, L)$, $t \in (0, \tau)$, L – длина заготовки, τ – продолжительность процесса осаждения; S_R , S_{r_0} – площади внешней и внутренней цилиндрических поверхностей, V – объем полого цилиндра.

Уравнение (6) дополняется начальным условием (3) и следующими граничными условиями:

$$\Theta(t, 0) = \Theta_1(t), \quad (7)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial z}(t, L) = \Theta_2(t). \quad (8)$$

Рассмотрим функционал вида

$$I(u) = \int_0^\tau \int_0^L [\Theta(t, z) - \Theta_d(t, z)]^2 dz dt \rightarrow \inf, \quad (9)$$

который имеет смысл близости состояния системы к заданной функции $\Theta_d(t, z)$ в области $(0; \tau) \times (0; L)$. Задача оптимального управления (3), (6)–(9) является нелинейной относительно функции управления – скорости теплового источника (см. уравнения (1), (6)) и классифицируется как задача с жестким распределенным управлением и распределенным наблюдением [6]. В качестве пространства управлений рассмотрим пространство $U = L_2((0; \tau) \times (0; L))$, в качестве пространства решений: $\hat{\Theta} = L_2((0; \tau); H^1(0; L))$.

Исследование и решение задачи оптимального управления

В силу нелинейности правой части уравнения состояния (6) вопросы разрешимости, единственности (в случае разрешимости) решения задачи оптимального управления и построение системы оптимальности (в своей сильной форме) не являются тривиальными. Чтобы исследовать эти воп-

росы, предлагается метод, который заключается в разбиении решения поставленной задачи на два последовательных этапа. Первый из них предполагает реализацию задачи оптимального управления тепловым источником, где под новой функцией управления $u_1(t, z)$ понимается тепловой поток:

$$\frac{\partial \Theta(t, z)}{\partial t} - a \frac{\partial^2 \Theta(t, z)}{\partial z^2} + \alpha \Theta(t, z) = u_1(t, z). \quad (10)$$

Данное уравнение записывается с начальным и граничным условиями (3), (7), (8) и коэрцитивным целевым функционалом

$$I_1(u_1) = \int_0^\tau \int_0^L [\Theta(t, z) - \Theta_d(t, z)]^2 dz dt + \sigma \|u_1(t, z)\|^2 \rightarrow \inf. \quad (11)$$

В качестве пространства решений рассматривается пространство

$$\Theta = L_2((0; \tau); H^1(0; L)),$$

в качестве пространства управлений –

$$U_1 = L_2((0; \tau) \times (0; L)),$$

$$\Theta_d(t, z) \in L_2((0; \tau) \times (0; L)),$$

$$\Theta_0(z) \in L_2(0; L), \Theta_1(t), \Theta_2(t) \in L_2(0; \tau), \sigma > 0.$$

Задача оптимального управления (10), (3), (7), (8), (11) является линейной относительно функции управления $u_1(t, z)$, с распределенным управлением, распределенным наблюдением и компромиссной целевой функцией [4]. Для получения условий разрешимости и единственности решения этой задачи, а также системы оптимальности будет использован один из вариантов метода Лагранжа.

Теорема [7]. *Пара $(\Theta(t, z), \hat{u}_1(t, z))$ образует решение задачи оптимального управления (10), (3), (7), (8), (11) тогда и только тогда, когда существует функция $p(t, z) \in L_2((0; \tau); H^1(0; L))$, такая, что функции $\tilde{\Theta}(t, z)$, $p(t, z)$ являются решением системы дифференциальных уравнений*

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial t} - a \frac{\partial^2 \tilde{\Theta}}{\partial z^2} + \alpha \tilde{\Theta} = -\frac{p}{\sigma}; \quad \tilde{\Theta}(0, z) = 0, \\ \tilde{\Theta}(t, 0) = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial z}(t, L) = 0; \\ \frac{\partial p}{\partial t} + a \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} - \alpha p = \tilde{\Theta}_d - \tilde{\Theta}; \quad p(\tau, z) = 0; \\ p(t, 0) = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial z}(t, L) = 0, \end{array} \right. \quad (12)$$

где

$\tilde{\Theta}(t, z) = \Theta(t, z) - \tilde{\Theta}(t, z)$, $\tilde{\Theta}_d(t, z) = \Theta_d(t, z) - \tilde{\Theta}(t, z)$;
функция $\tilde{\Theta}(t, z)$ является решением дифференциальной задачи

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{\Theta}(t, z)}{\partial t} - a \frac{\partial^2 \tilde{\Theta}(t, z)}{\partial z^2} + \alpha \tilde{\Theta}(t, z) = 0; \\ \tilde{\Theta}(0, z) = \Theta_0(z), \tilde{\Theta}(t, 0) = \Theta_1(t); \\ \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial z}(t, L) = \Theta_2(t), \end{cases}$$

и функция оптимального управления находится по формуле

$$\hat{u}_1(t, z) = -\frac{p(t, z)}{\sigma}.$$

Доказательство.

Решение краевой задачи (10), (3), (7), (8) представим в виде

$$\Theta(t, z) = \tilde{\Theta}(t, z) + \tilde{\Theta}(t, z),$$

где функция $\tilde{\Theta}(t, z)$ удовлетворяет условиям

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{\Theta}(t, z)}{\partial t} - a \frac{\partial^2 \tilde{\Theta}(t, z)}{\partial z^2} + \alpha \tilde{\Theta}(t, z) = u_1(t, z); \\ \tilde{\Theta}(0, z) = 0; \\ \tilde{\Theta}(t, 0) = 0; \\ \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial z}(t, L) = 0, \end{cases} \quad (13)$$

а $\tilde{\Theta}(t, z)$ является решением задачи

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{\Theta}(t, z)}{\partial t} - a \frac{\partial^2 \tilde{\Theta}(t, z)}{\partial z^2} + \alpha \tilde{\Theta}(t, z) = 0; \\ \tilde{\Theta}(0, z) = \Theta_0(z); \\ \tilde{\Theta}(t, 0) = \Theta_1(t); \\ \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial z}(t, L) = \Theta_2(t). \end{cases} \quad (14)$$

Система (14) не зависит от функции $u_1(t, z)$ и имеет единственное решение; таким образом, функцию $\tilde{\Theta}(t, z)$ можно считать известной функцией. Задача минимизации в таком случае сводится к решению задачи для функции $\tilde{\Theta}$ (13) с функционалом (11).

Очевидно, что в случае однородности начальных и граничных условий в (13) состояние системы $\tilde{\Theta}(t, z)$ линейно зависит от функции управления $u_1(t, z)$. Таким образом, определен линейный оператор (обозначим его Λ), который ставит в соответствие каждому $u_1(t, z) \in U_1$ единственное $\tilde{\Theta}(t, z) \in \Theta$, а значит и единственное значение $\Theta(t, z) = \tilde{\Theta}(t, z) + \tilde{\Theta}(t, z)$:

$$\tilde{\Theta}(t, z) = \Lambda u_1(t, z). \quad (15)$$

В силу введенных обозначений выполняется равенство

$$\Theta(t, z) = \Lambda u_1(t, z) + \tilde{\Theta}(t, z).$$

Следовательно, исходная задача минимизации сводится к задаче оптимального управления (13) с целевой функцией вида

$$I_1(u_1) = I_1(\Lambda u_1) =$$

$$= \int_0^{\tau} \int_0^L \left[\Lambda u_1(t, z) + \tilde{\Theta}(t, z) - \Theta_d(t, z) \right]^2 dz dt + \sigma \|u_1(t, z)\|^2 \rightarrow \inf.$$

Введем обозначения: $-\tilde{\Theta}(t, z) + \Theta_d(t, z) = \tilde{\Theta}_d(t, z)$.
Тогда

$$I_1(u_1) = \int_0^{\tau} \int_0^L \left[\Lambda u_1(t, z) - \tilde{\Theta}_d(t, z) \right]^2 dz dt + \sigma \|u_1(t, z)\|^2 \rightarrow \inf. \quad (16)$$

Выделим в функционале (16) квадратичную, линейную и постоянную части относительно функции управления $u_1(t, z)$:

$$\begin{aligned} I_1(u_1) &= \int_0^{\tau} \int_0^L \left[\Theta - \tilde{\Theta}_d \right]^2 dz dt + \sigma \|u_1\|^2 + \int_0^{\tau} \int_0^L u_1^2 dz dt = \\ &= \int_0^{\tau} \int_0^L \Theta^2 dz dt - 2 \int_0^{\tau} \int_0^L \Theta \tilde{\Theta}_d dz dt + \int_0^{\tau} \int_0^L \tilde{\Theta}_d^2 dz dt + \\ &+ \sigma \int_0^{\tau} \int_0^L u_1^2 dz dt = \int_0^{\tau} \int_0^L (\Lambda u_1)^2 dz dt - 2 \int_0^{\tau} \int_0^L \Lambda u_1 \tilde{\Theta}_d dz dt + \\ &+ \int_0^{\tau} \int_0^L \tilde{\Theta}_d^2 dz dt + \sigma \int_0^{\tau} \int_0^L u_1^2 dz dt. \end{aligned}$$



Здесь $\int_0^\tau \int_0^L (\Lambda u_1)^2 dz dt + \sigma \int_0^\tau \int_0^L u_1^2 dz dt$ – квадратичная, $\int_0^\tau \int_0^L \Lambda u_1 \tilde{\Theta}_d dz dt$ – линейная, $\int_0^\tau \int_0^L \tilde{\Theta}_d^2 dz dt$ – постоянная относительно функции управления $u_1(t, x)$ части.

Для выпуклого, коэрцитивного и полунепрерывного снизу на U_1 функционала (16) существует, и притом единственный элемент $\hat{u}_1 \in U_1$, на котором этот функционал достигает своего минимума [6]. Действительно, функционал (16) непрерывен на U_1 , является выпуклым в силу линейности оператора Λ , а его коэрцитивность обеспечивает наличие второго слагаемого. Таким образом, существует и притом единственный элемент $\hat{u}_1 \in U_1$, на котором функционал (16) достигает минимума:

$$\hat{u}_1 \in U_1 : I(\hat{u}_1) = \inf_{u_1 \in U_1} I_1(u_1).$$

Получим оптимизационную систему в своей сильной форме, то есть в виде краевой задачи для сопряженной функции. Для этого вычислим слабую производную функционала (16) на элементе \hat{u}_1 , доставляющем минимум этому функционалу.

$$\begin{aligned} \langle I'_1(\hat{u}_1), v - u_1 \rangle &= 2 \int_0^\tau \int_0^L (\Lambda \hat{u}_1 - \tilde{\Theta}_d) \cdot \Lambda' \hat{u}_1 dz dt + \\ &+ 2\sigma \int_0^\tau \int_0^L \hat{u}_1 \cdot \hat{u}_1' dz dt = 2 \int_0^\tau \int_0^L (\Lambda \hat{u}_1 - \tilde{\Theta}_d) \Lambda (v - \hat{u}_1) dz dt + \\ &+ 2\sigma \int_0^\tau \int_0^L \hat{u}_1 (v - \hat{u}_1) dz dt. \end{aligned}$$

Здесь использовано определение слабой производной и линейность оператора Λ , в силу чего

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\Lambda(\hat{u}_1 + t(v - \hat{u}_1)) - \Lambda \hat{u}_1}{t} &= \\ = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\Lambda \hat{u}_1 + t \Lambda(v - \hat{u}_1) - \Lambda \hat{u}_1}{t} &= \Lambda(v - \hat{u}_1); \end{aligned}$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{(\hat{u}_1 + t(v - \hat{u}_1)) - \hat{u}_1}{t} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\hat{u}_1 + t(v - \hat{u}_1) - \hat{u}_1}{t} = v - \hat{u}_1.$$

Согласно критерию оптимальности [6] имеем:

$$\langle I'_1(\hat{u}_1), v - \hat{u}_1 \rangle = 0, \forall v \in U_1;$$

$$\begin{aligned} &\int_0^\tau \int_0^L (\Lambda \hat{u}_1 - \tilde{\Theta}_d) \Lambda (v - \hat{u}_1) dz dt + \\ &+ \sigma \int_0^\tau \int_0^L \hat{u}_1 (v - \hat{u}_1) dz dt = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Выразим первое слагаемое (17) через вариацию управления $v - u_0$. Для вариации решения $\tilde{\Theta} = \Lambda(v - u_0)$ выпишем соответствующую сопряженную задачу. Для этого проварырем систему (13):

$$\frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial t} - a \frac{\partial^2 \tilde{\Theta}}{\partial z^2} + \alpha \tilde{\Theta} = v - \hat{u}_1; \quad (18)$$

$$\tilde{\Theta}(0, z) = 0; \quad (19)$$

$$\tilde{\Theta}(t, 0) = 0; \quad (20)$$

$$\frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial z}(t, L) = 0. \quad (21)$$

Умножим уравнение (18) на произвольную функцию $p(t, z) \in \Theta$ и проинтегрируем по области $(0, L) \times (0, \tau)$:

$$\begin{aligned} &\int_0^\tau \int_0^L \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial t} pdz dt - a \int_0^\tau \int_0^L \frac{\partial^2 \tilde{\Theta}}{\partial z^2} pdz dt + \\ &+ \alpha \int_0^\tau \int_0^L \tilde{\Theta} pdz dt = \int_0^\tau \int_0^L (v - \hat{u}_1) pdz dt. \end{aligned}$$

Воспользуемся формулой Грина в первом слагаемом в левой части один раз, а во втором – два раза. Учитывая начальное и граничные условия, получим:

$$\begin{aligned} &-\int_0^\tau \int_0^L \frac{\partial p}{\partial t} \tilde{\Theta} dz dt + \int_0^L p \tilde{\Theta} \Big|_0^\tau dz - \\ &- a \left(-\int_0^\tau \int_0^L \frac{\partial p}{\partial z} \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial z} dz dt + \int_0^\tau p \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial z} \Big|_0^L dt \right) + \\ &+ \alpha \int_0^\tau \int_0^L \tilde{\Theta} pdz dt = \int_0^\tau \int_0^L (v - \hat{u}_1) pdz dt; \\ &- \int_0^\tau \int_0^L \frac{\partial p}{\partial t} \tilde{\Theta} dz dt + \int_0^L p \tilde{\Theta} \Big|_0^\tau dz - \\ &- a \left[-\left(-\int_0^\tau \int_0^L \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} \tilde{\Theta} dz dt + \int_0^\tau \frac{\partial p}{\partial z} \tilde{\Theta} \Big|_0^L dt \right) + \int_0^\tau p \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial z} \Big|_0^L dt \right] + \end{aligned}$$

$$+ \alpha \int_0^{\tau} \int_0^L \dot{\tilde{\Theta}} p dz dt = \int_0^{\tau} \int_0^L (v - \hat{u}_1) p dz dt.$$

В итоге получим:

$$\begin{aligned} & - \int_0^{\tau} \int_0^L \frac{\partial p}{\partial t} \dot{\tilde{\Theta}} dz dt + \int_0^L p \dot{\tilde{\Theta}} \Big|_0^{\tau} dz - \\ & - \lambda \int_0^{\tau} \int_0^L \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} \dot{\tilde{\Theta}} dz dt + \lambda \int_0^{\tau} \frac{\partial p}{\partial z} \dot{\tilde{\Theta}} \Big|_0^L dt - \\ & - \lambda \int_0^{\tau} p \frac{\partial \dot{\tilde{\Theta}}}{\partial z} \Big|_0^L dt + \alpha \int_0^{\tau} \int_0^L \dot{\tilde{\Theta}} p dz dt = \int_0^{\tau} \int_0^L (v - \hat{u}_1) p dz dt. \end{aligned} \quad (22)$$

Потребуем, чтобы функция $p(t, z)$ удовлетворяла следующей задаче:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \alpha \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} - \alpha p = \tilde{\Theta}_d - \Lambda \hat{u}_1; \quad (23)$$

$$p(\tau, z) = 0; \quad (24)$$

$$p(t, 0) = 0; \quad (25)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z}(t, L) = 0. \quad (26)$$

Интегральное тождество (22) в силу этого перепишется в виде

$$\int_0^{\tau} \int_0^L \dot{\tilde{\Theta}} \cdot (\tilde{\Theta}_d - \Lambda \hat{u}_1) dz dt = \int_0^{\tau} \int_0^L (v - \hat{u}_1) p dz dt. \quad (27)$$

Поскольку $\dot{\tilde{\Theta}} = \Lambda(v - \hat{u}_1)$ (это вариация решения), то левая часть (27) совпадает с первым слагаемым в левой части (17). Учитывая это, перепишем (17), выразив производную через вариацию $v - \hat{u}_1$:

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau} \int_0^L \Lambda(v - \hat{u}_1) (\tilde{\Theta}_d - \Lambda \hat{u}_1) dz dt &= \int_0^{\tau} \int_0^L (v - \hat{u}_1) p dz dt, \\ \forall v \in U_1; \end{aligned}$$

$$\int_0^{\tau} \int_0^L (v - \hat{u}_1) p dz dt + \sigma \int_0^{\tau} \int_0^L \hat{u}_1 (v - \hat{u}_1) dz dt = 0.$$

Окончательно имеем:

$$\int_0^{\tau} \int_0^L (v - \hat{u}_1) (p + \sigma \hat{u}_1) dz dt = 0, \quad \forall v \in U_1.$$

Поскольку v – произвольная функция из U_1 , то интеграл равен нулю в том случае, если $p + \sigma \hat{u}_1 = 0$. Отсюда следует формула для нахождения значения функции оптимального управления через значение сопряженной функции $p(t, z)$:

$$\hat{u}_1(t, z) = -p(t, z)/\sigma. \quad (28)$$

Таким образом, получена система оптимальности, не зависящая явно от функции оптимального управления в своей сильной форме, то есть записанная в форме краевой задачи относительно сопряженной функции:

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial t} - \lambda \frac{\partial^2 \tilde{\Theta}}{\partial z^2} + \alpha \tilde{\Theta} = -\frac{p}{\sigma}, \quad \tilde{\Theta}(0, z) = 0, \quad \tilde{\Theta}(\tau, 0) = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial z}(\tau, L) = 0; \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \lambda \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} - \alpha p = \tilde{\Theta}_d - \tilde{\Theta}, \quad p(\tau, z) = 0, \quad p(\tau, 0) = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial z}(\tau, L) = 0. \end{cases} \quad (29)$$

После решения оптимизационной системы оптимальное управление определяется по формуле (28).

Здесь $\tilde{\Theta}_d(t, z) = \Theta_d(t, z) - \tilde{\Theta}(t, z)$, для нахождения $\tilde{\Theta}(t, z)$ решается краевая задача (14).

Теорема доказана.

Решение оптимизационной системы (13) и функция $u_1(t, z)$, определяющая тепловой поток, далее считаются известными функциями.

Второй этап предполагает минимизацию функционала

$$I_2(u) = \int_0^{\tau} \int_0^L (\hat{u}_1(t, z) - F(u, t, z))^2 dz dt \rightarrow \inf, \quad (30)$$

где $\hat{u}_1(t, z)$ – решение задачи оптимального управления (10), (3), (7), (8), (11). Минимизация функционала (12) означает поиск параметров теплового источника (под параметрами, в частности, понимается скорость подвижного теплового источника) так, чтобы количество тепла, передаваемого источником в систему, описывалось функцией, численно близкой функции, которая определяется соотношением

$$F(u, t, z) = \frac{S_R}{\rho c V} q(z, t) + \frac{S_R \alpha_c}{\rho c V} \Theta_c + \frac{S_{r_0} \alpha_r}{\rho c V} \Theta_r$$

Здесь $q(z, t)$ выражено формулой (1).



Основные результаты и их обсуждение

В процессе численной реализации предложенных алгоритмов функцию управления $u(t, z)$ предлагается искать в классе кусочно-постоянных функций [3], для чего промежуток $[0, \tau]$ разбивается на промежутки $0 = t_1 < t_2 < \dots < t_n = \tau$:

$$u = \begin{cases} u_1, & 0 = t_1 \leq t < t_2; \\ u_2, & t_2 \leq t < t_3; \\ \dots & \dots \\ u_{n-1}, & t_{n-1} \leq t < t_n = \tau, \end{cases} \quad (31)$$

где $u_i \in R$, $i = \overline{1, n-1}$.

Таким образом,

$$I_2(u) = \sum_{i=1}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (u_1(t, z) - F(u_i, t, z))^2 dt dz. \quad (32)$$

Для минимизации функционала (12) использован метод градиентного спуска:

$$u^{n+1} = u^n - \beta \cdot \nabla I_2(u^n), \beta \in (0; 1). \quad (33)$$

С учетом выражения (1) и уравнения (2) получим, что

$$\nabla I_2(u^n) = \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial}{\partial u_i} (I_2(u^n)) \cdot \delta u_i^n,$$

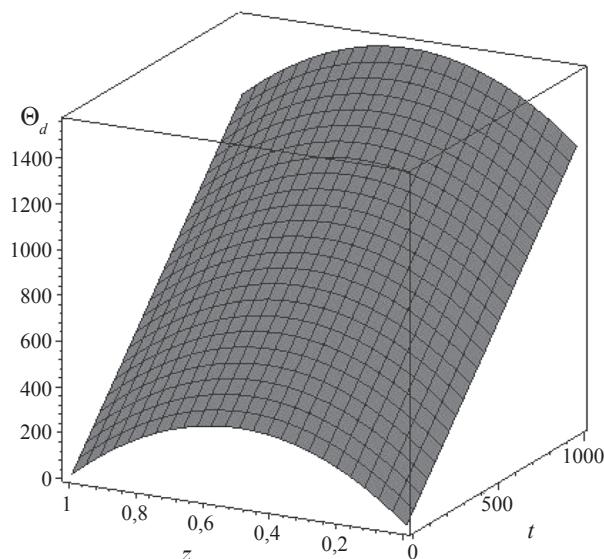


Рис. 2. Функция приближения состояния системы $\Theta_d(t, z)$

тогда согласно методу градиентного спуска,

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \beta \frac{\partial I(u^n)}{\partial u_i},$$

где

$$\frac{\partial I(u^n)}{\partial u_i} = \int_0^{t_{i+1}} \frac{\partial}{\partial u_i} (u_1(t, z) - F(u_i^n, t, z))^2 dt dz, \quad i = \overline{1, n-1}.$$

Известным недостатком метода градиентного спуска, как известно, является резко возрастающее количество итераций в случае, если гиперповерхность исследуемой функции имеет овражистый характер. Это приводит к частой смене направлений антиградиента, т. е. к «рысканью» и, более того, успех в поиске глобального минимума зависит от выбора начального приближения. Подобная ситуация имеет место в случае минимизации функционала (13).

При решении выбраны следующие значения параметров: $H = 0,02$ м; $q_{\max} = 5 \cdot 10^3$ Вт/м²; $\sigma = 0,01$; $a = 2 \cdot 10^{-7}$ м²/с; $\alpha = 4 \cdot 10^{-5}$ с⁻¹; $L = 1$ м; $\tau = 500$ с. Поверхность, описывающая функцию приближения состояния системы $\Theta_d(t, z)$, представлена на рис. 2. Полученные оптимальные значения температурного поля $\Theta(t, z)$, тепловой поток $u_1(t, z)$ и скорости теплового источника $u(t)$ представлены на рис. 3–5.

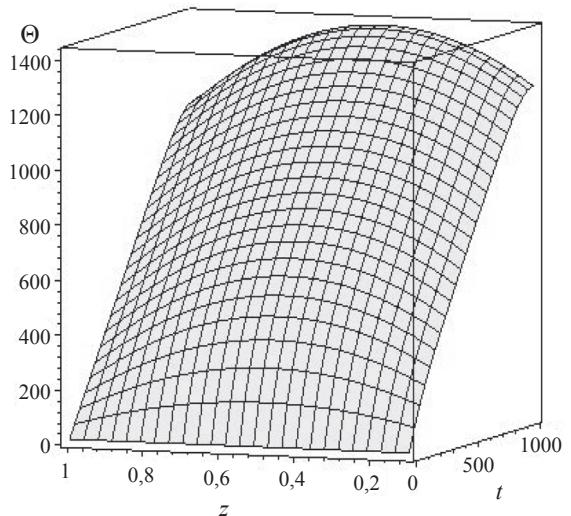


Рис. 3. Распределение температуры $\Theta(t, z)$

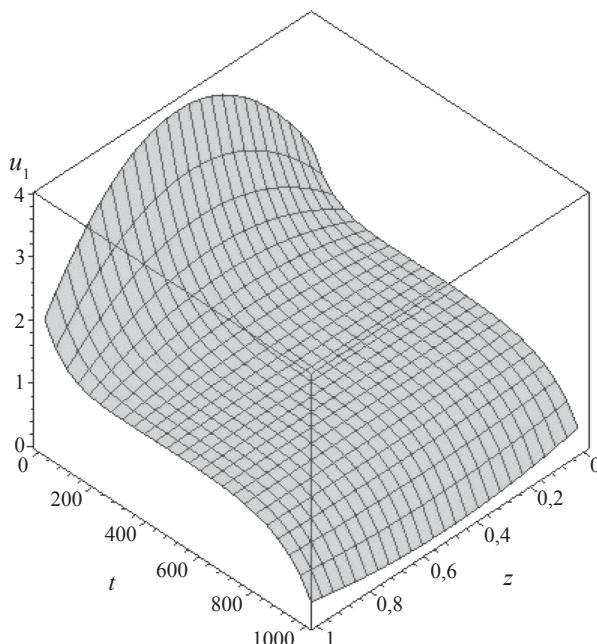


Рис. 4. Функция оптимального управления $u_1(t, z)$

Итак, вопросы нахождения решений задач оптимального управления распределенными системами в первую очередь связаны с непосредственным решением систем оптимальности, записанных в своей сильной форме, то есть в виде краевых задач для сопряженной функции. В ряде случаев, когда вариационная задача линейна относительно

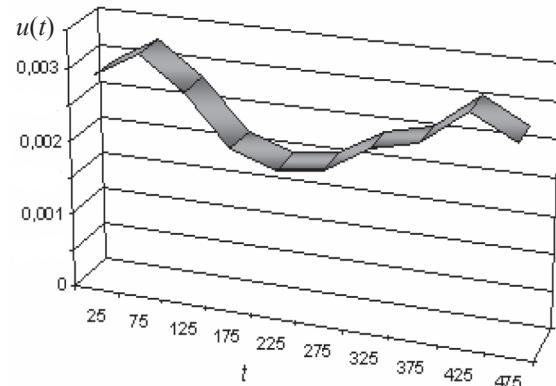


Рис. 5. Функция скорости теплового источника $u(t)$

функции управления и целевой функционал является выпуклым, оптимизационная система несет смысл не только необходимых, но и достаточных условий минимума. Непосредственное решение систем оптимальности для таких постановок наиболее эффективно. Нами рассмотрена задача оптимального управления нелинейной системой с подвижным тепловым источником, решение которой предусматривало решение вспомогательной задачи описанного типа. Полученная система оптимальности решена, и, кроме того, в явном виде найдена функция оптимального управления вспомогательной задачи. Для отыскания решения исходной нелинейной задачи реализован метод градиентного спуска функционала специального вида.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алексеев, Г.В. Разрешимость стационарных задач граничного управления для уравнений тепловой конвекции [Текст] / Г.В. Алексеев // Сиб. мат. журн. – 1998. – Т. 43. – № 1. – С. 84–98.
2. Алексеев, Г.В. Разрешимость краевой задачи для стационарных уравнений тепломассопереноса при смешанных краевых условиях [Текст] / Г.В. Алексеев, А.Б. Смышляев, Д.А. Терешко // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. – 2003. – Т. 43. – № 1. – С. 84–98.
3. Болдырев, В.И. Метод кусочно-линейной аппроксимации для решения задач оптимального управления [Электронный ресурс] / В.И. Болдырев // Дифференция и проц. управл. (Электронный журнал – <http://www.neva.ru/journal>). – 2004. – № 1. – С. 28–123.
4. Егоров, А.И. Оптимальное управление тепловыми и диффузионными процессами [Текст] / А.И. Егоров. – М.: Наука, 1978. – 463 с.
5. Первадчук, В.П. Математическое моделирование оптимального управления процессом легирования оптических волокон [Текст] / В.П. Первадчук, Д.Б. Шумкова, В.В. Сыроватская // Вестник ПГТУ. Математика и прикладная математика. – 2005. – С. 3–9.
6. Фурсиков, А.В. Оптимальное управление распределенными системами. Теория и приложения [Текст] / А.В. Фурсиков. – Новосибирск: Научная книга, 1999. – 350 с.
7. Шумкова, Д.Б. Оптимальное управление в задачах с неизвестными границами и подвижными источниками [Текст]: дисс. ... канд. физ.-мат. наук: 01.01.02: защищена 21.12.2006.: утв. 12.10.2007 / Шумкова Дарья Борисовна. – Пермь, 2006. – 111 с. – Библиогр.: С. 108–110. – 6107-1/276.



УДК 532.516.5:523.529:519.63

А.И. Цаплин, М.Г. Бояршинов

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА МЕТАНА В АТМОСФЕРЕ И ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ЕГО ДЕТОНАЦИИ ПРИ АВАРИЙНОМ СБРОСЕ ДАВЛЕНИЯ В ГАЗОПРОВОДЕ

Метан является основным элементом природного газа (до 95 % объема и более), и в стандартных условиях он в 1,803 раз легче воздуха [16, 18]. При объемной концентрации метана в воздухе более 6,3 % (0,041 кг/м³) создаются условия для детонации при минимальной температуре воспламенения 815 К. Известны факты взрывов воздушно-метановых смесей в ограниченных пространствах: в шахтах при добыче полезных ископаемых, в зданиях, сооружениях.

Природный газ транспортируется по трубопроводам и хранится в искусственных подземных хранилищах при давлении до 80 атм [13]. При таких давлениях метан в соединении с водой образует газовый гидрат – твердое кристаллическое вещество, напоминающее снег или рыхлый лед [11]. Осаждаясь на стенках газопроводов и газоперекачивающих устройств, газовый гидрат образует пробки, для ликвидации которых используются технологии растепления оборудования, в основе которых – подогревание газового гидрата с его обильным разложением и увеличением объема в 160–180 раз.

Для предотвращения разрушения оборудования газ сбрасывается в атмосферу с начальной звуковой скоростью, образуя в смеси с воздухом вихревую структуру, перемещающуюся в атмосфере и сохраняющую возможность детонации на малых, средних и больших высотах.

На процесс переноса легкого газа в атмосфере оказывают влияние такие факторы, как диффузия и конвекция, вязкость, неоднородность давления, атмосферная турбулентность, стратификация свойств атмосферы с примесью газа по высоте. Цель настоящей работы – выяснение потенциальной возможности образования взрывоопасных воздушно-метановых облаков в атмосфере на удалении от источника выброса метана с использованием математической модели переноса и рассеяния легкого газа в атмосфере.

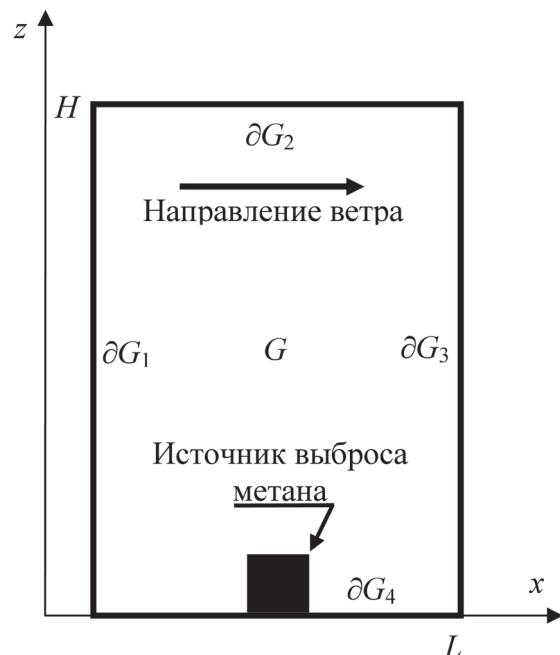
Постановка задачи

Для описания процесса выброса метана в атмосферу и его последующего переноса рассматривается двухмерная (в вертикальной плоскости) задача о движении легкой газовой примеси в потоке воздуха (рис. 1). Допущениями этой модели являются следующие предположения:

движущаяся воздушно-метановая смесь несжимаема [7];

параметры, свойства и характеристики воздушного потока неизменны в направлении, перпендикулярном движению воздуха;

воздушно-метановая смесь считается вязкой, несжимаемой, изотермической средой.

Рис. 1. Схема расчетной области G :

L, H – линейные размеры,
 ∂G_i ($i = \overline{1,4}$) – границы

Математическая модель переноса и рассеяния потоком воздуха газовой примеси включает осредненные дифференциальные уравнения:

движения (уравнения Навье–Стокса с дополнительными слагаемыми, учитывающими импульс $q_v \mathbf{V}_q$ струи метана, которая выбрасывается источником с местной скоростью звука, и с использованием приближения Буссинеска [8], а именно положительной плавучести воздушно-метановой смеси за счет наличия легкой примеси) –

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_x}{\partial t} + U_x \frac{\partial U_x}{\partial x} + U_z \frac{\partial U_x}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \eta_t \frac{\partial U_x}{\partial x} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \eta_t \frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{q_v V_{qx}}{\rho} \delta(x_q, z_q), \\ \frac{\partial U_z}{\partial t} + U_x \frac{\partial U_z}{\partial x} + U_z \frac{\partial U_z}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \eta_t \frac{\partial U_z}{\partial x} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \eta_t \frac{\partial U_z}{\partial z} + \frac{q_v V_{qy}}{\rho} \delta(x_q, z_q) - \frac{g \beta C}{\rho}, \end{aligned} \quad (1)$$

неразрывности (с учетом интенсивности q_v поступления метана) –

$$\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_z}{\partial z} = \frac{q_v}{\rho} \delta(x_q, z_q); \quad (2)$$

энергии турбулентности –

$$\frac{\partial K}{\partial t} + U_x \frac{\partial K}{\partial x} + U_z \frac{\partial K}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \eta_t \frac{\partial K}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \eta_t \frac{\partial K}{\partial z} + F_K(\mathbf{U}), \quad (3)$$

где

$$F_K(\mathbf{U}) = \eta_t \left[2 \left(\frac{\partial U_x}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial U_z}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x} \right)^2 \right] - \varepsilon;$$

скорости диссипации турбулентной энергии –

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + U_x \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + U_z \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} &= \\ = \frac{c_\varepsilon}{2c_0} \left(\frac{\partial}{\partial x} \eta_t \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \eta_t \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + F_\varepsilon(\mathbf{U}), \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \text{где } F_\varepsilon(\mathbf{U}) &= c_{\varepsilon 1} \frac{\eta_t \varepsilon}{K} \left[2 \left(\frac{\partial U_x}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial U_z}{\partial z} \right)^2 + \right. \\ &\left. + \left(\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x} \right)^2 \right] - c_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{K}, \end{aligned}$$

турбулентной вязкости –

$$\eta_t = c K^2 / \varepsilon; \quad (5)$$

турбулентной диффузии (с учетом интенсивности q_v источника метана) –

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + U_x \frac{\partial C}{\partial x} + U_z \frac{\partial C}{\partial z} &= \\ = c_C \left(\frac{\partial}{\partial x} \eta_t \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \eta_t \frac{\partial C}{\partial z} \right) + q_v \delta(x_q, z_q). \end{aligned} \quad (6)$$

В представленных уравнениях U_x, U_z – компоненты вектора скорости \mathbf{U} газовоздушной смеси; P – отклонение давления воздуха от гидростатического; K – кинетическая энергия турбулентности; ε – скорость диссипации турбулентной энергии; C – концентрация легкой газообразной примеси; ρ, η_t, β – плотность, турбулентная вязкость и концентрационный коэффициент плотности; q_v – удельное (отнесенное к единице длины щели) массовое секундное поступление метана; $\delta(\cdot)$ – дельта-функция Дирака; G – рассматриваемая область, $x, z \in G = [0, L] \times [0, H]$; x_q, z_q – координаты источника выброса метана; V_{qx}, V_{qy} – компоненты вектора скорости \mathbf{V}_q струи метана на выходе из источника (местная скорость звука).

В уравнении (3) не учитывается генерация турбулентной энергии за счет сил плавучести, поскольку в известных моделях турбулентности [3, 9, 12] влияние плавучести на генерацию турбулентной энергии определяется градиентом поля плотности сплошной среды, отсутствующим вследствие принятого в постановке задачи допущения о несжимаемости воздушно-метановой смеси.

На входной границе ∂G_1 (см. рис. 1) заданы скорости воздушного потока, распределения энергии турбулентности K , турбулентной вязкости η_t , скорости диссипации ε турбулентной энергии, значения которых определяются решением задачи о горизонтально однородном воздушном стационарном турбулентном потоке над поверхностью с шероховатостью z_0 [10, 15]:

$$\begin{aligned} \bar{U}_x &= (U_* / \kappa) \ln [(z + z_0) / z_0], \\ \bar{\eta}_t &= U_* \kappa (z + z_0), \\ \bar{K} &= U_*^2 / \sqrt{c}, \\ \bar{\varepsilon} &= U_*^3 / \kappa (z + z_0), \end{aligned} \quad (7)$$

где U_* – динамическая скорость ветра [10].

Это позволяет для краевой задачи (1)–(6) определить начальные условия



$$U_x(0, x, z) = \bar{U}_x(z), \quad U_z(0, x, z) = 0,$$

$$P(0, x, z) = 0, \quad C(0, x, z) = C_G(x, z),$$

$$K(0, x, z) = \bar{K}(z), \quad \varepsilon(0, x, z) = \bar{\varepsilon}(z),$$

$$\eta_t(0, x, z) = \bar{\eta}_t(z), \quad x, z \in G,$$

а также следующие граничные условия:

на входной границе ∂G_1 –

$$U_x(t, 0, z) = \bar{U}_x(z), \quad U_z(t, 0, z) = 0,$$

$$P(t, 0, z) = 0, \quad K(t, 0, z) = \bar{K}(z), \quad \varepsilon(t, 0, z) = \bar{\varepsilon}(z);$$

на верхней границе ∂G_2 (на высоте H) вертикальная и горизонтальная составляющие скорости, потоки турбулентной энергии, скорости диссипации и концентрации примеси устанавливаются, что соответствует условиям

$$\partial U_x(t, x, H) / \partial z = 0, \quad \partial U_z(t, x, H) / \partial z = 0,$$

$$\eta_t \partial K(t, x, H) / \partial z = 0,$$

$$\eta_t \partial \varepsilon(t, x, H) / \partial z = 0, \quad \eta_t \partial C(t, x, H) / \partial z = 0;$$

на выходной границе области ∂G_3 (на расстоянии L от входной границы) воздушный поток устанавливается, что будет соответствовать граничным условиям

$$\partial U_x(t, L, z) / \partial x = 0, \quad \partial U_z(t, L, z) / \partial x = 0,$$

$$\eta_t \partial K(t, L, z) / \partial x = 0, \quad \eta_t \partial \varepsilon(t, L, z) / \partial x = 0,$$

$$\eta_t \partial C(t, L, z) / \partial x = 0;$$

на непроницаемой поверхности ∂G_4 (вблизи поверхности земли) компоненты скорости равны нулю, что соответствует остановке газового потока на границе; здесь же задаются условия отсутствия потоков искомых функций в поверхность земли

$$U_x(t, x, 0) = 0, \quad U_z(t, x, 0) = 0,$$

$$\eta_t \partial K(t, x, 0) / \partial z = 0, \quad \eta_t \partial \varepsilon(t, x, 0) / \partial z = 0,$$

$$\eta_t \partial C(t, x, 0) / \partial z = 0.$$

Методика численного решения задачи

Для решения системы уравнений (1)–(6) используется метод геометрического расщепления [14], согласно которому каждое из дифференциальных уравнений (с соответствующими краевыми условиями) на каждом временном шаге Δt заменяется последовательностью одномерных дифференциальных задач. Расщепление первого из уравнений движения (1) приводит к системе одномерных дифференциальных уравнений [4–6, 19]:

$$\begin{cases} \frac{\partial U_{x1}}{\partial t} + A_x U_{x1} = f_x, & U_{x1}(t, x, z) = U_x(t, x, z), \\ U_{x1}(t, 0, z) = \bar{U}_x(z), & \partial U_{x1}(t, L, z) / \partial x = 0, \\ \frac{\partial U_{x2}}{\partial t} + A_z U_{x2} = 0, & U_{x2}(t, x, z) = U_{x1}(\hat{t}, x, z), \\ U_{x2}(t, x, 0) = 0, & \partial U_{x2}(t, x, H) / \partial z = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Здесь использованы обозначения:

$$A_x = U_x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \eta_t \frac{\partial}{\partial x}, \quad A_z = U_z \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \eta_t \frac{\partial}{\partial z},$$

$$f_x = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{q V_{qx}}{\rho} \delta(x_q, z_q),$$

$$\hat{t} = t + \Delta t.$$

Искомое решение $U_x(\hat{t}, x, z)$ первого уравнения (1) для момента времени \hat{t} отличается от решения $U_{x2}(\hat{t}, x, z)$ системы уравнений (8) на величину второго порядка малости, т. е. $U_x(\hat{t}, x, z) = U_{x2}(\hat{t}, x, z) + O(\Delta t^2)$. Аналогичным образом решается второе уравнение движения (1).

Поле давления $P(t, x, z)$ определяется с использованием уравнения неразрывности (2) согласно методике О.М. Белоцерковского [1], согласно которой на каждом временном шаге вычисляется поле дополнительного давления $\delta P(x, z)$, определяемое решением дифференциального уравнения

$$\frac{\partial^2 \delta P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \delta P}{\partial z^2} = \frac{\rho}{\Delta t} \left(\frac{\partial U_{x2}}{\partial x} + \frac{\partial U_{z2}}{\partial z} \right) - \frac{q \delta(x_q, z_q)}{\Delta t}. \quad (9)$$

Найденное распределение $\delta P(x, z)$ позволяет для каждого момента времени \hat{t} уточнить поле давления

$$P(\hat{t}, x, z) = P(t, x, z) + \delta P(x, z)$$

и скорость

$$U_x(\hat{t}, x, z) = U_{x2}(\hat{t}, x, z) - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} \delta P(x, z),$$

$$U_z(\hat{t}, x, z) = U_{z2}(\hat{t}, x, z) - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \delta P(x, z).$$

Для решения стационарного уравнения (9) используется метод установления, то есть $\delta P(x, z)$ определяется как стационарное решение ($\tau \rightarrow \infty$) нестационарного дифференциального уравнения параболического типа [4]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \omega \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial U_{x2}}{\partial x} + \frac{\partial U_{z2}}{\partial z} \right) + \frac{q \delta(x_q, z_q)}{\rho \Delta t}, \quad (10)$$

где $\varphi = \delta P(x, z)/\omega \rho$ (параметр $\omega = \text{const}$ вводится для обеспечения устойчивости вычислительного процесса).

Решение уравнения (10) в свою очередь заменяется решением последовательности двух одномерных задач:

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi_1}{\partial \tau} = \omega \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial x^2} - \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial U_{x2}}{\partial x} + \frac{\partial U_{z2}}{\partial z} \right), \\ \varphi_1(\tau, x, z) = \varphi(\tau, x, z), \quad \varphi_1(\tau, 0, z) = 0, \quad \frac{\partial \varphi_1(\tau, L, z)}{\partial x} = 0; \\ \\ \frac{\partial \varphi_2}{\partial \tau} = \omega \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial z^2}, \quad \varphi_2(\tau, x, z) = \varphi_1(\hat{\tau}, x, z), \\ \frac{\partial \varphi_2(\tau, x, 0)}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial \varphi_2(\tau, x, H)}{\partial z} = 0. \end{cases}$$

Начальное распределение $\varphi(0, x, z)$ может быть произвольным, например $\varphi(0, x, z) = 0$. Получаемое стационарное решение $\varphi_2(x, z)$ аппроксимирует искомое –

$$\varphi(x, z) = \varphi_2(x, z) + O(\Delta \tau^2).$$

Для решения остальных дифференциальных уравнений (3), (4) и (6) также используется метод расщепления.

Исследования возможностей разработанной математической модели, ее адекватности моделируемым процессам [4, 6, 19] показало приемлемую точность вычисления полей скорости, давления,

концентрации и прочих характеристик для широкого диапазона входных параметров (физико-механических свойств и краевых условий).

Закономерности распространения метана в атмосфере

Вычислительные эксперименты проводились для расчетной области с размерами L и H от 1000 до 6000 м на регулярных сетках с числами расчетных ячеек соответственно от 200 до 3000 вдоль каждой из координатных осей при мощностях источника выброса метана от 5,0 до 50 кг/(м·с) и различных направлениях струи метана. Рассечение газа определяется скоростью движения воздушных масс. Наибольшие концентрации легкого газа наблюдаются при малых скоростях ветра или при его отсутствии. Поскольку в реальных условиях всегда присутствует движение воздуха, при проведении расчетов принято, что скорость ветра на границе ∂G_1 рассматриваемой области равна 0,5 м/с, ее распределение по высоте z входной границы ∂G_1 определяется выражением (7).

На рис. 2 показана динамика переноса и рассения метана от источника мощностью 5 кг/(м·с) при условии, что направление выходящей струи метана – горизонтальное. Первоначально, в течение первых 90–100 с, происходит практически горизонтальный перенос метана за счет сообщающего импульса и его рассеяние за счет диффузии. Далее благодаря наличию турбулентной вязкости скорость потока падает, и преобладающее влияние получает положительная плавучесть воздушно-метановой смеси. С течением времени происходит

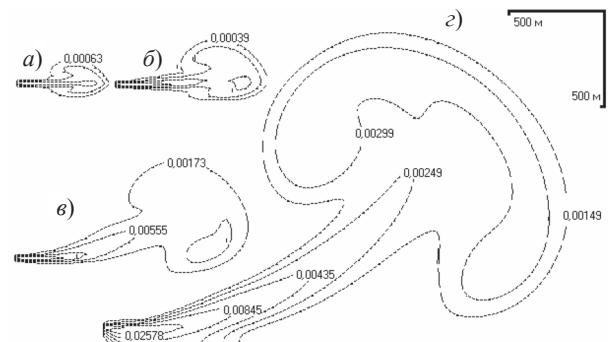


Рис. 2. Динамика изменения концентрации ($\text{kg}/\text{м}^3$) метана, эмитированного горизонтальным источником с интенсивностью $q_v = 5 \text{ кг}/(\text{м} \cdot \text{с})$; моменты времени (с) после начала эмиссии: 50 (a), 100 (b), 200 (c) и 500 (d). Скорость ветра $U = 0,5 \text{ м}/\text{с}$



подъем потока в вертикальном направлении и его вытягивание в грибовидное облако с «лежачей» ножкой; концентрация метана в нем – от 0,0015 до 0,026 кг/м³.

На рис. 3 представлены распределения основных характеристик турбулентного потока воздушно-метановой смеси: горизонтальная и вертикальная компоненты скорости, распределения энергии турбулентности и турбулентной вязкости в рассматриваемой области.

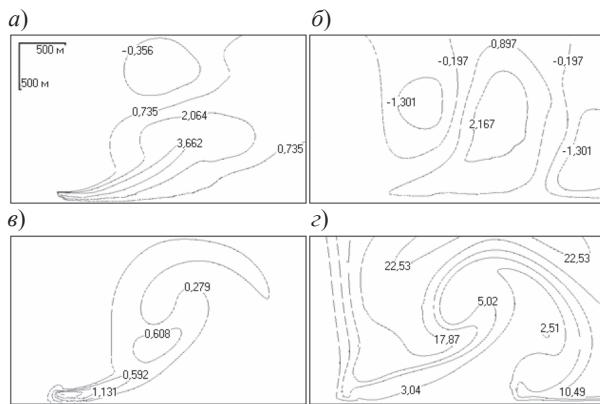


Рис. 3. Компоненты V_x (а) и V_y (б) вектора скорости (м/с) воздушно-метановой смеси; энергия турбулентности, Дж/кг (в) и турбулентная вязкость, м²/с (г)

Мощность горизонтального источника $q_v = 5$ кг/(м·с); момент времени после начала эмиссии – 500 с. Скорость ветра $U = 0,5$ м/с

Эмитируемая источником струя метана вовлекает в движение в попутном направлении значительные массы окружающего воздуха (рис. 3, а, б). Одновременно возникают противоположно направленные потоки над основным облаком воздушно-метановой смеси в горизонтальном направлении (рис. 3, а), слева и справа от него – в вертикальном направлении (рис. 3, б). Это говорит о сложной циркуляционной картине движения воздушных масс, обусловленного влиянием скоростного потока выбрасываемого легкого газа.

Наличие градиентов скорости в потоке воздушно-метановой смеси обеспечивает интенсивную генерацию турбулентной энергии (рис. 3, в) и значительные (по сравнению с молекулярной вязкостью) величины турбулентной вязкости (рис. 3, г). Контуры изолиний турбулентных энергий и вязкости соответствуют контурам изолиний концентрации метана, то есть форме облака воздушно-метановой смеси.

На рис. 4 приведена динамика изменения формы облака воздушно-метановой смеси от источни-

ка вертикальной струи метана той же мощности. В отличие от предыдущего случая импульс, сообщаемый потоку за счет разности атмосферного давления и давления в хранилище газа, совпадает по направлению с направлением действия эффекта положительной плавучести смеси. Как и в первом случае, в течение первых 90–100 с происходит ускоренный вертикальный перенос метана за счет сообщаемого импульса и его рассеяние. За счет турбулентной вязкости скорость потока падает, и преобладающее влияние получает положительная плавучесть воздушно-метановой смеси. Одновременно начинает проявляться действие слабого ветра, сносящего смесь в направлении ветрового напора, что приводит к изгибу «ножки» грибовидного облака; следует отметить усиление изгиба ствола облака за счет циркуляции воздушных масс, окружающих облако. Концентрация метана в вертикальном грибовидном облаке изменяется в пределах от 0,0032 до 0,0829 кг/м³.

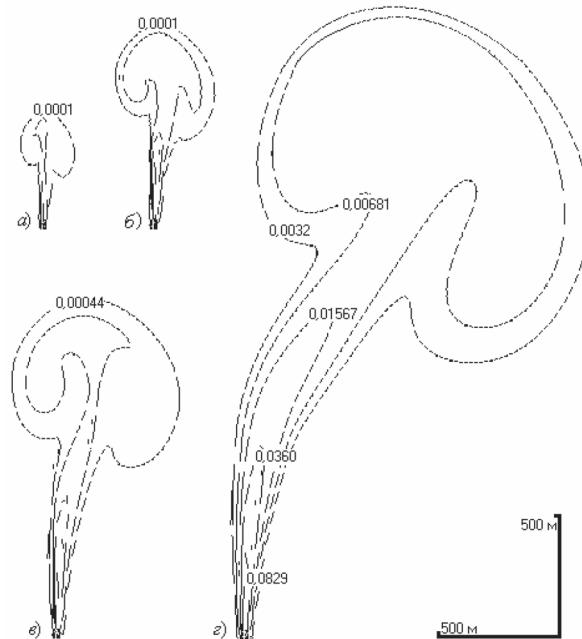


Рис. 4. Динамика изменения концентрации (кг/м³) метана от вертикального источника с интенсивностью $q_v = 5$ кг/(м·с); моменты времени (с) после начала эмиссии: 50 (а), 100 (б), 200 (в) и 500 (г)
Скорость ветра $U = 0,5$ м/с

На рис. 5 представлены распределения основных характеристик потока воздушно-метановой смеси: модуль скорости потока, функция тока (положительные значения соответствуют движению

потока воздушно-метановой смеси в направлении против хода часовой стрелки, отрицательные – движению по ходу часовой стрелки), энергии турбулентности и турбулентной вязкости в рассматриваемой области от вертикального источника выброса метана.

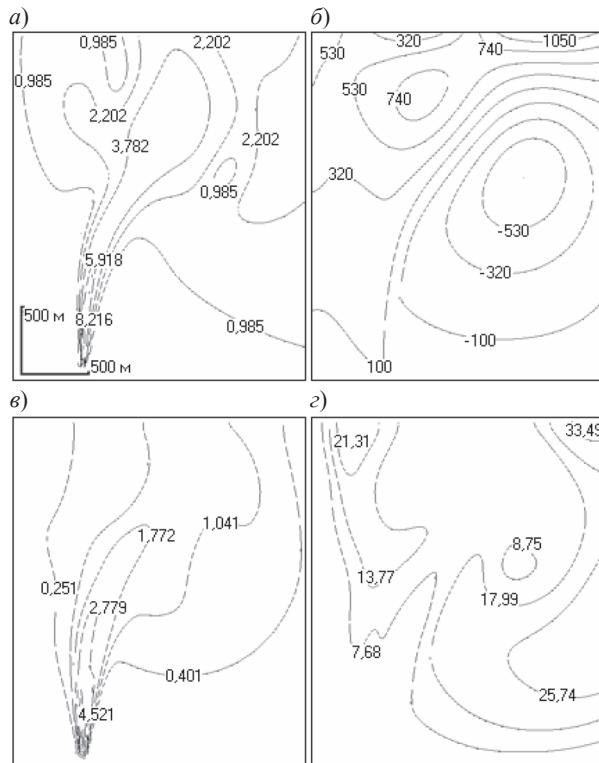


Рис. 5. Модуль скорости, м/с (а); функция тока, $\text{м}^2/\text{с}$ (б); энергия турбулентности, Дж/кг (в) и турбулентная вязкость, $\text{м}^2/\text{с}$ (г) воздушно-метановой смеси
Мощность горизонтального источника $q_v = 5 \text{ кг}/(\text{м}\cdot\text{с})$; момент времени после начала эмиссии – 500 с; скорость ветра $U = 0,5 \text{ м}/\text{с}$

Как и в предыдущем случае, струя метана вовлекает в движение массы окружающего воздуха (рис. 5, а, б). Вследствие этого образуются зоны противоположно направленных потоков, что свидетельствует о сложной циркуляционной картине движения воздушных масс и в этом случае. За счет наличия градиентов скорости в потоке воздушно-метановой смеси происходит интенсивная генерация турбулентной энергии (рис. 5, в) и турбулентной вязкости (рис. 5, г).

Результаты вычислительных экспериментов показывают, что горизонтальный выброс метана из хранилища менее опасен с точки зрения формирования высотной детонационно-опасной концентрации воздушно-метановой смеси. Это

объясняется тем, что вследствие горизонтального начального количества движения, сообщаемого потоку газа, происходит интенсивное рассеяние метана за счет «размазывания» массы газа вдоль поверхности в приземной области. В результате этого подъем воздушно-метановой смеси за счет положительной плавучести осуществляется с большей площади, чем при вертикальном выбросе газа, и, следовательно, при значительно меньшей начальной (приземной) концентрации.

По этой причине в дальнейшем рассматривается эволюция высотного облака воздушно-метановой смеси только от вертикального источника выброса как наиболее опасного варианта с точки зрения формирования детонационно-опасной концентрации метана в атмосферном воздухе. На рис. 6 представлены формы облаков воздушно-метановой смеси при подъеме на высоту до 5 км при действии вертикальных источников метана различной интенсивности.

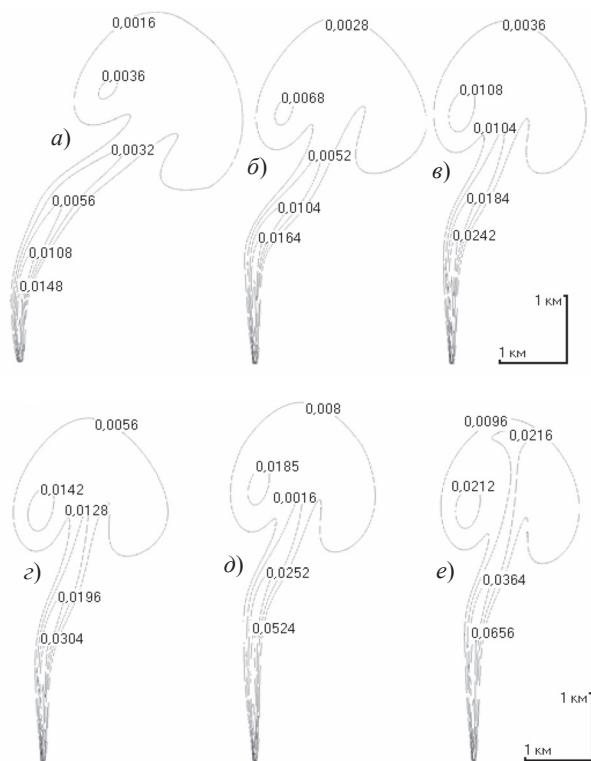


Рис. 6. Динамика изменения концентрации ($\text{кг}/\text{м}^3$) метана, эмитированного вертикальными источниками различной мощности $q_v, \text{кг}/(\text{м}\cdot\text{с})$: 5 (а), 10 (б), 20 (в), 30 (г), 40 (д) и 50 (е). Моменты времени (с) после начала эмиссии: 700 (е), 800 (д), 900 (г), 1100 (в), 1600 (б), 2400 (а)
Скорость ветра $U = 0,5 \text{ м}/\text{с}$



Результаты вычислительного эксперимента показывают, что с увеличением мощности источника время подъема облака на высоту до 5 км существенно изменяется: с 2400 с для источника интенсивностью 5 кг/(м·с) (рис. 6, а) до 700 с для источника интенсивностью 50 кг/(м·с) (рис. 6, е). Одновременно возрастает степень «сопротивления» потока воздушно-метановой смеси ветровому напору, что проявляется в уменьшении степени изгиба вертикальной «ножки» грибовидного облака.

Максимальная концентрация метана у основания «ножки» облака изменяется от 0,092 кг/м³ при интенсивности источника 5 кг/(м·с) до 0,502 кг/м³ при интенсивности источника 50 кг/(м·с) при высокой степени неравномерности распределения концентрации газа по объему облака.

На рис. 7 представлены концентрации метана на высоте до 5 км при достижении потоком воздушно-метановой смеси стационарного состояния. Тонированием выделены зоны детонационно-опасной концентрации метана (свыше 0,041 кг/м³). В зависимости от мощности источника выброса верхняя граница детонационно-опасной концентрации воздушно-метановой смеси занимает различные положения (см. таблицу).

Высота облака с детонационно-опасной концентрацией метана в зависимости от мощности источника газа

Номер варианта	Мощность источника, кг/(м·с)	Высота облака, м
1	5	500
2	10	1000
3	20	1550
4	30	2150
5	40	2800
6	50	3500

На рис. 8 для сравнения представлены результаты определения формы облака воздушно-метановой смеси и области детонационно-опасной концентрации метана через 1500 с после начала эмиссии газа (рис. 8, а) и при стационарном течении газовой смеси (рис. 8, б) от горизонтального источника метана с интенсивностью $q_v = 50$ кг/(м·с). Высота зоны детонационно-опасной концентрации метана не превышает 1200 м над поверхностью земли. Данные вычислений подтверждают предположение о существенно меньших размерах зоны детонационно-опасной

концентрации метана при горизонтальном источнике его эмиссии.

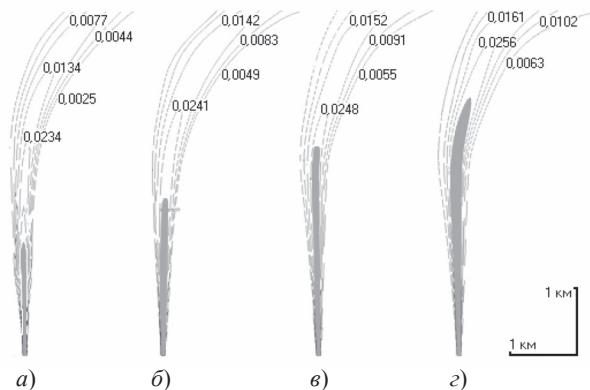


Рис. 7. Концентрация метана (кг/м³) при установившихся режимах движения; детонационно-опасные зоны воздушно-метановой смеси затонированы; мощности вертикального источника q_v , кг/(м·с): 20 (а), 30 (б), 40 (в) и 50 (г)

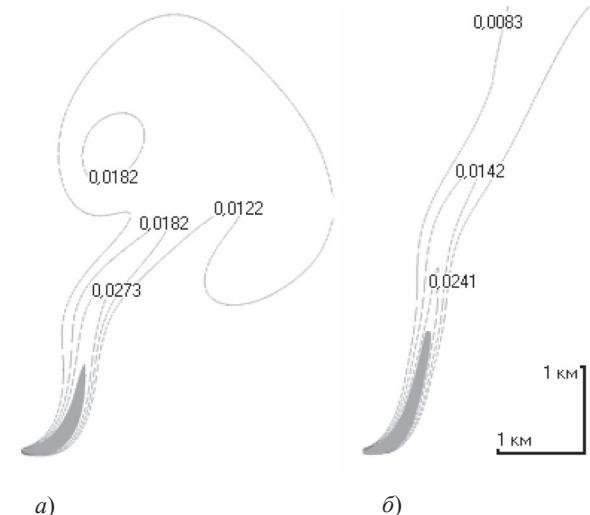
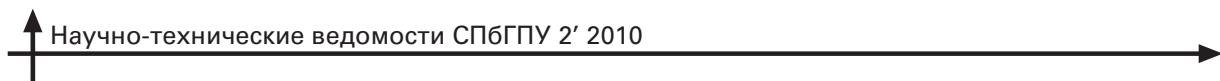


Рис. 8. Концентрация метана (кг/м³) от источника через 1500 с после начала эмиссии (а) и при стационарном движении воздушно-метановой смеси (б). Детонационно-опасные зоны воздушно-метановой смеси затонированы; мощность горизонтального источника $q_v = 50$ кг/(м·с)

Оценка параметров истечения и объемного взрыва

При адиабатном истечении метана из газопровода через щель поперечный размер этой щели прямо пропорционален удельному массовому секундному расходу газа [2]:

$$F = q_v / \sqrt{2P_1 \rho_1 \left[(P/P_1)^{2/k} - (P/P_1)^{(k+1)/k} \right] k/(k-1)}, \quad (10)$$



где F , м² – ширина щели; P , P_1 , Па – величины давления газа – атмосферное и в газопроводе соответственно; k – показатель адиабаты; ρ_1 , кг/м³ – плотность газа в газопроводе.

При больших давлениях скорость истечения газа из непрофилированного отверстия равна местной скорости звука

$$a = \sqrt{kP/\rho},$$

где ρ – плотность газа при атмосферном давлении.

В частном случае при $q_v = 5$ кг/(м·с) ширина щели, полученная по формуле (10) при следующих исходных данных: $P_1 = 80 \cdot 10^5$ Па; $P = 10^5$ Па; $\rho_1 = 65$ кг/м³; $\rho = 0,657$ кг/м³; $k = 1,314$, составляет 2,6 мм. При таких условиях возможно формирование детонационно-опасной концентрации воздушно-метановой смеси на высоте до 500 м.

При детонации этой смеси давление на фронте ударной волны определяется соотношением [17]:

$$\Delta P_{уд} = P_{уд} - P_0 = \frac{2}{k+1} \rho_0 D^2 \left(1 - a^2/D^2\right),$$

где $P_{уд}$, P_0 – величины давления на фронте ударной волны и барометрического; ρ_0 – начальная плотность газовой смеси.

Скорость детонации D определяется по формуле

$$D = \frac{k+1}{k} \sqrt{8310kT_h/M_h},$$

где M_h – средняя молекулярная масса продуктов детонации; T_h – абсолютная температура продуктов детонации.

Найденные по этим формулам скорость детонации и давление на фронте ударной волны при исходных данных для смеси метана и кислорода, взятых в стехиометрических соотношениях [17], составляют соответственно $D = 1720$ м/с; $\Delta P_{уд} = 15,7 \cdot 10^5$ Па.

В результате выполненного исследования можно сделать следующие заключения. При аварийном сбросе метана из газохранилища наиболее опасной является вертикальная струя газа, поскольку это в совокупности с положительной плавучестью воздушно-метановой смеси приводит к быстрому формированию и подъему на значительные высоты детонационно-опасной концентрации метана. Распределение метана в воздухе существенно неоднородно и определяется величиной начального импульса и направлением струи газа, интенсивностью расхода метана, скоростью ветра, турбулентным перемешиванием и прочими факторами.

Взрывоопасная смесь с воздухом на высоте свыше 500 м образуется при минимальном расходе метана 5 кг/(м·с). При минимальной температуре воспламенения воздушно-метановой смеси 815 К скорость детонации объемного взрыва составляет 1720 м/с, а избыточное давление 15,7 атм сопровождается последующим длительным разрежением.

Расчетным путем подтверждается возможность детонации воздушно-метанового облака в атмосфере на высотах до 3,5 км молнией, пролетающим самолетом и другими источниками высокой температуры.

Обнаруженный механизм воздушно-метановых устойчивых вихревых образований из источников повышенного давления (газохранилищ, газопроводов, угольных пластов в шахтах, гидратов метана на дне морей и океанов) объясняет причины некоторых техногенных катастроф и пожаров. Поэтому необходима разработка новых технических условий (стандартов), ограничивающих выбросы метана вблизи аэродромов и других объектов повышенной опасности. Предложенная математическая модель может оказаться полезной и для уточнения методик вентилирования разветвленных подземных сооружений (шахт).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Белоцерковский, О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред [Текст] / О.М. Белоцерковский. – М.: Наука, 1982. – 520 с.
2. Болгарский, А.В. Термодинамика и тепло-передача [Текст]: учебник для вузов / А.В. Болгарский, Г.А. Мухачев, В.К. Щукин. – Изд. 2-е, перераб. и доп. – М.: Высшая школа, 1975. – 495 с.
3. Белов, И.А. Моделирование турбулентных течений [Текст] / И.А. Белов, С.А. Исаев – СПб.: Балт. гос. техн. ун-т, 2001. – 108 с.



4. **Бояршинов, М.Г.** Модели переноса и рассеяния примесей в растительном массиве [Текст] / М.Г. Бояршинов. – Пермь: ПермГТУ, 2000. – 142 с.
5. **Бояршинов, М.Г.** Перенос газовой примеси воздушным потоком через область, содержащую растительный массив [Текст] / М.Г. Бояршинов // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2002. – Т. 42. – № 7. – С. 1094–1104.
6. **Бояршинов, М.Г.** Пространственная модель взаимодействия воздушного потока с лесным массивом [Текст] / М.Г. Бояршинов, В.Д. Горемыкин // Математическое моделирование. – 2004. – Т. 16. – № 7. – С. 31–42.
7. **Валландер, С.В.** Лекции по гидроаэромеханике [Текст] / С.В. Валландер. – Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1978. – 296 с.
8. **Гершуни, Г.З.** Устойчивость конвективных течений [Текст] / Г.З. Гершуни, Е.М. Жуховицкий, А.А. Непомнящий. – М.: Наука, 1989. – 320 с.
9. **Джонс, У.** Модели турбулентных течений с переменной плотностью и горением [Текст] / У. Джонс // Методы расчета турбулентных течений. – М.: Мир, 1984. – С. 349–398.
10. **Зилинкевич, С.С.** О замыкании системы уравнений турбулентного движения для пограничного слоя атмосферы [Текст] / С.С. Зилинкевич, Д.Л. Лайхтман // Тр. Гл. геофиз. обсерв. – Л., 1965. – Вып. 167. – С. 44–48.
11. **Истомин, В.А.** Газовые гидраты в природных условиях [Текст] / В.А. Истомин, В.С. Якушев. – М.: Недра, 1992. – 236 с.
12. **Ковалец, И.В.** Численная трехмерная модель распространения тяжелого газа в атмосфере с использованием консервативных схем расщепления [Текст] / И.В. Ковалец, В.С. Мадерич // Прикладная гидромеханика. – 2001. – Т. 3 (75). – № 1. – С. 28–36.
13. **Мановян, А.К.** Технология первичной переработки нефти и природного газа [Текст] / А.К. Мановян. – М.: Химия, 2001. – 567 с.
14. **Марчук, Г.И.** Методы вычислительной математики [Текст] / Г.И. Марчук. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1980. – 536 с.
15. **Менжулин, Г.В.** О закономерностях трансформации приземного потока в растительности [Текст] / Г.В. Менжулин, И.Б. Циприс // Тр. Гл. геофиз. обсерв. – 1974. – Вып. 318. – С. 59–67.
16. **Павлович, Н.В.** Справочник по теплофизическим свойствам природных газов и их компонентов [Текст] / Н.В. Павлович. – М., Л.: Энергия, 1962. – 119 с.
17. **Баум, Ф.А.** Физика взрыва [Текст] / Ф.А. Баум, Л.П. Орленко, К.П. Станюкович [и др.]; под ред. К.П. Станюкович. – Изд. 2-е. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1975. – 707 с.
18. Физические величины [Текст]: справочник / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский [и др.]; под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мелихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
19. **Цаплин, А.И.** Теплофизика внешних воздействий при кристаллизации стальных слитков на машинах непрерывного литья / А.И. Цаплин. – Екатеринбург: Изд-во «Наука» УрО РАН, 1995. – 238 с.

УДК 539.3

В.М. Жгутов

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, АЛГОРИТМ ИССЛЕДОВАНИЯ И АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ РЕБРИСТЫХ ОБОЛОЧЕК С УЧЕТОМ ПОЛЗУЧЕСТИ МАТЕРИАЛА ПРИ КОНЕЧНЫХ ПРОГИБАХ

Оболочки как элементы строительных конструкций широко применяются в различных областях техники. Зачастую тонкостенная часть оболочки (далее – тонкая оболочка) подкрепляется ребрами

жесткости в одном или двух направлениях. Известно, что под воздействием нагрузок (даже далеких от критических значений) в тонких оболочках образуются прогибы, соизмеримые с их толщиной.



Известно также, что при длительных воздействиях нагрузок (например снеговых) в указанных оболочках может проявиться свойство ползучести материала, т. е. изменение с течением времени деформаций и напряжений при неизменной нагрузке, что приводит к значительному снижению их несущей способности, найденной при упругом поведении материала.

Исследованию напряженно-деформированного состояния и устойчивости оболочек при длительных нагрузках посвящены работы И.Г. Терегулова [1], В.И. Климанова и С.А. Тимашева [2], а также других авторов. В фундаментальной монографии [2] рассматриваются ребристые пологие оболочки, но без учета сдвиговой и крутильной жесткостей ребер или же с помощью «размазывания» этих жесткостей по полям оболочек. В этой и других работах исследования проводятся без учета поперечных сдвигов (модель Кирхгофа-Лява), а также геометрической нелинейности.

В настоящей работе представлены результаты математического и компьютерного моделирования оболочек с учетом ползучести материала.

Рассмотрим оболочки общего вида с краем (пологие на прямоугольном плане и вращения, в частности цилиндрические, конические, сферические, торообразные, а также некоторые другие).

Срединную поверхность оболочки (точнее, ее обшивки) толщиной h принимаем за отсчетную – $z = 0$. Оси x и y криволинейной ортогональной системы координат ($-a/2 \leq x \leq a/2$ и $-b/2 \leq y \leq b/2$) направляем по линиям кривизны отсчетной поверхности, а ось z – по внутренней нормали поверхности $z = 0$ так, чтобы система координат x, y, z была правой (полагаем при этом, что определенная таким образом сеть координатных линий на отсчетной поверхности не имеет особенностей).

С внутренней стороны оболочка подкреплена ребрами жесткости, расставленными вдоль координатных линий.

Ребра задаем дискретно с помощью функции $H = H(x, y)$, характеризующей распределение ребер по оболочке, их ширину и высоту [3, 4]. Таким образом, толщина всей конструкции равна $h + H$ и

$$-h/2 \leq z \leq h/2 + H.$$

Считаем, что оболочка находится под действием механической нагрузки при определенном закреплении ее края (контура).

Будем совместно учитывать геометрическую нелинейность, дискретное расположение ребер,

их ширину, сдвиговую и крутильную жесткости, поперечные сдвиги, а также возможность развития деформации ползучести в материале.

Геометрические соотношения в срединной поверхности $z = 0$ получаются с помощью ковариантного дифференцирования векторного поля перемещений и с учетом геометрической нелинейности имеют вид

$$\varepsilon_x = \frac{1}{A} \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{1}{AB} \frac{\partial A}{\partial y} V - K_x W + \frac{1}{2} \theta_1^2;$$

$$\varepsilon_y = \frac{1}{B} \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{1}{AB} \frac{\partial B}{\partial x} U - K_y W + \frac{1}{2} \theta_2^2;$$

$$\gamma_{xy} = \frac{1}{A} \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{1}{B} \frac{\partial U}{\partial y} - \frac{1}{AB} \left(\frac{\partial A}{\partial y} U + \frac{\partial B}{\partial x} V \right) + \theta_1 \theta_2,$$

где $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \gamma_{xy}$ – деформации удлинения вдоль осей x, y и сдвига в касательной плоскости (dx, dy); U, V, W – компоненты вектора перемещений точек вдоль осей x, y и z соответственно; A, B – метрические коэффициенты Ламе, зависящие от вида оболочки (например, $A = B = 1$ для пологой оболочки и $A = \text{const}, B = B(x)$ в случае оболочки вращения); $K_x = 1/R_1$ и $K_y = 1/R_2$ – главные величины кривизны (R_1, R_2 – ее главные радиусы) оболочки вдоль осей x и y соответственно;

$$\theta_1 = -\left(\frac{1}{A} \frac{\partial W}{\partial x} + K_x U \right); \quad \theta_2 = -\left(\frac{1}{B} \frac{\partial W}{\partial y} + K_y V \right).$$

Деформации поперечных сдвигов определяем по формулам

$$\gamma_{xz} = c f(z) (\Psi_x - \theta_1); \quad \gamma_{yz} = c f(z) (\Psi_y - \theta_2),$$

где Ψ_x, Ψ_y – углы поворота отрезка нормали в плоскостях (dx, dz) и (dy, dz) соответственно; $f(z)$ – функция, характеризующая распределение напряжений τ_{xz} и τ_{yz} вдоль оси z [3–5]; c – константа.

Деформации в слое $z \neq 0$ вычисляем по формулам [3–5]:

$$\varepsilon_x^z = \varepsilon_x + z \chi_1, \quad \varepsilon_y^z = \varepsilon_y + z \chi_2, \quad \gamma_{xy}^z = \gamma_{xy} + 2z \chi_{12},$$

где

$$\chi_1 = \frac{1}{A} \frac{\partial \Psi_x}{\partial x} + \frac{1}{AB} \frac{\partial A}{\partial y} \Psi_y; \quad \chi_2 = \frac{1}{B} \frac{\partial \Psi_y}{\partial y} + \frac{1}{AB} \frac{\partial B}{\partial x} \Psi_x;$$

$$2\chi_{12} = \frac{1}{A} \frac{\partial \Psi_y}{\partial x} + \frac{1}{B} \frac{\partial \Psi_x}{\partial y} - \frac{1}{AB} \left(\frac{\partial A}{\partial y} \Psi_x + \frac{\partial B}{\partial x} \Psi_y \right)$$



суть функции изменения кривизны и кручения.

Ползучесть материала будем учитывать на основе теории упругоползучего тела (линейной наследственной теории, широко применяемой в механике полимеров и для старого бетона, либо наследственной теории старения в общем случае стареющего бетона).

Физические соотношения для ортотропных материалов в этих случаях могут быть представлены в виде [5]

$$\begin{aligned}\sigma_x &= \sigma_x^e - \sigma_x^c, \quad \sigma_y = \sigma_y^e - \sigma_y^c, \quad \tau_{xy} = \tau_{xy}^e - \tau_{xy}^c, \\ \tau_{xz} &= \tau_{xz}^e - \tau_{xz}^c, \quad \tau_{yz} = \tau_{yz}^e - \tau_{yz}^c,\end{aligned}$$

где упругие (в общем случае упругомгновенные) составляющие напряжений (отмечены верхним индексом e), определяются с помощью формул

$$\begin{aligned}\sigma_x^e &= G_1(\varepsilon_x^z + \mu_2 \varepsilon_y^z), \quad \sigma_y^e = G_2(\varepsilon_y^z + \mu_1 \varepsilon_x^z); \\ \tau_{xy}^e &= G_{12} \gamma_{xy}^z, \quad \tau_{xz}^e = G_{13} \gamma_{xz}^z, \quad \tau_{yz}^e = G_{23} \gamma_{yz}^z,\end{aligned}\quad (1)$$

а составляющие, обусловленные ползучестью материала (отмечены верхним индексом c), вычисляются с помощью соотношений

$$\begin{aligned}\sigma_x^c &= \int_{t_0}^t G_1 (\varepsilon_x^z + \mu_2 \varepsilon_y^z) R_1(t, \tau) d\tau, \\ \sigma_y^c &= \int_{t_0}^t G_2 (\varepsilon_y^z + \mu_1 \varepsilon_x^z) R_1(t, \tau) d\tau; \\ \tau_{xy}^c &= \int_{t_0}^t G_{12} \gamma_{xy}^z R_2(t, \tau) d\tau, \quad \tau_{xz}^c = \int_{t_0}^t G_{13} \gamma_{xz}^z R_2(t, \tau) d\tau, \\ \tau_{yz}^c &= \int_{t_0}^t G_{23} \gamma_{yz}^z R_2(t, \tau) d\tau.\end{aligned}\quad (2)$$

Здесь $R_1(t, \tau)$, $R_2(t, \tau)$ – функции влияния материала соответственно при растяжении (сжатии) и сдвиге, t – время, τ – переменная интегрирования (имеющая смысл времени);

$$G_1 = \frac{E_1}{1 - \mu_1 \mu_2}, \quad G_2 = \frac{E_2}{1 - \mu_1 \mu_2};$$

G_{12} , G_{13} , G_{23} – модули сдвига (константы либо переменные коэффициенты (функции t) в общем случае), где E_1 , E_2 и μ_1 , μ_2 – продольные модули упругости и коэффициенты Пуассона (переменные либо константы).

Для изотропных материалов физические соотношения являются частным случаем соотношений (1) и (2) при $E_1 = E_2 = E$ и $\mu_1 = \mu_2 = \mu$, а также $G_1 = G_2 = E/(1 - \mu^2)$, $G_{12} = G_{13} = G_{23} = G = E/2(1 + \mu)$.

Функционал полной энергии деформации оболочки запишем в виде [5–10]

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_e - \mathcal{E}_c, \quad (3)$$

где функционал

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_e &= \frac{G_1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} \left\{ (h + \bar{F}) [\varepsilon_x^2 + (\mu_2 + \bar{G}_2 \mu_1) \varepsilon_x \varepsilon_y + \right. \\ &\quad \left. + \bar{G}_2 \varepsilon_y^2 + \bar{G}_{12} \gamma_{xy}^2 + \bar{G}_{13} k (\psi_x - \theta_1)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \bar{G}_{23} k (\psi_y - \theta_2)^2] \right\} + \bar{S} [2 \varepsilon_x \chi_1 + (\mu_2 + \bar{G}_2 \mu_1) \varepsilon_x \chi_2 + \\ &\quad + (\mu_2 + \bar{G}_2 \mu_1) \varepsilon_y \chi_1 + 2 \bar{G}_2 \varepsilon_y \chi_2 + \\ &\quad + 2 \bar{G}_{12} \gamma_{xy} 2 \chi_{12}] + \left(\frac{h^3}{12} + J \right) [\chi_1^2 + (\mu_2 + \bar{G}_2 \mu_1) \chi_1 \chi_2 + \\ &\quad + 2 \bar{G}_{12} \gamma_{xy} 2 \chi_{12}] + \left(\frac{h^3}{12} + \bar{J} \right) [\chi_1^2 + (\mu_2 + \bar{G}_2 \mu_1) \chi_1 \chi_2 + \bar{G}_2 \chi_2^2] - \\ &\quad - \frac{2}{G_1} (P_x U + P_y V + q W) \Big\} A B dxdy \quad (4)\end{aligned}$$

соответствует линейно упругой постановке задачи [5], а функционал

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_c &= \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} \int_0^t G_1 \left\{ (h + \bar{F}) [\varepsilon_x^2 + (\mu_2 + \bar{G}_2 \mu_1) \varepsilon_x \varepsilon_y + \bar{G}_2 \varepsilon_y^2] + \right. \\ &\quad \left. + \bar{S} (2 \varepsilon_x \chi_1 + (\mu_2 + \bar{G}_2 \mu_1) (\varepsilon_x \chi_2 + \varepsilon_y \chi_1) + 2 \bar{G}_2 \varepsilon_y \chi_2) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{h^3}{12} + \bar{J} \right) [\chi_1^2 + (\mu_2 + \bar{G}_2 \mu_1) \chi_1 \chi_2 + \bar{G}_2 \chi_2^2] \right\} \times \\ &\quad \times R_1(t, \tau) + \left[(h + \bar{F}) (\bar{G}_{12} \gamma_{xy}^2 + \bar{G}_{13} k (\psi_x - \theta_1)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \bar{G}_{23} k (\psi_y - \theta_2)^2) + \bar{S} (2 \bar{G}_{12} \gamma_{xy} 2 \chi_{12}) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{h^3}{12} + \bar{J} \right) \bar{G}_{12} 2 \chi_{12} 2 \chi_{12} \right] R_2(t, \tau) \Big\} A B dxdy d\tau \quad (5)\end{aligned}$$

описывает процесс развития ползучести в материале [5].

В формулах (4) и (5) \bar{F} , \bar{S} , \bar{J} – жесткостные характеристики ребер (погонные площадь поперечного (продольного) сечения ребра, статический момент и момент инерции этого сечения); P_x , P_y , q – продольные и поперечная компоненты внешней механической нагрузки (в дальнейшем полагаем, что

$$P_x = P_y = 0; \bar{G}_2 = \frac{G_2}{G_1}, \bar{G}_{12} = \frac{G_{12}}{G_1}, \bar{G}_{13} = \frac{G_{13}}{G_1}, \bar{G}_{23} = \frac{G_{23}}{G_1}.$$

Для отыскания минимума энергии (3) применяем метод Ритца при разложении искомых функций $U(x, y)$, $V(x, y)$, $W(x, y)$, $\Psi_x(x, y)$, $\Psi_y(x, y)$ в виде [6–10]:

$$\begin{aligned} U &= \sum_{I=1}^N U(I) X1(I) Y1(I); \quad V = \sum_{I=1}^N V(I) X2(I) Y2(I); \\ W &= \sum_{I=1}^N W(I) X1(I) Y1(I); \\ \Psi_x &= \sum_{I=1}^N PS(I) X4(I) Y4(I); \\ \Psi_y &= \sum_{I=1}^N PN(I) X5(I) Y5(I), \end{aligned}$$

где $U(I)$, $V(I)$, $W(I)$, $PS(I)$, $PN(I)$ – неизвестные параметры переменной t , подлежащие определению; $X1(I)Y1(I)$, ..., $X5(I)Y5(I)$ – известные аппроксимирующие функции переменных x и y , удовлетворяющие заданным краевым условиям.

При этом интегралы по переменной τ разбиваем на сумму интегралов по частичным отрезкам $[t_{i-1}, t_i]$ длиной $\Delta t = t_i - t_{i-1} = 1$ сут (сутки) каждый. Указанные интегралы вычисляем приближенно по формуле прямоугольников [6–10].

В результате получаем нелинейную систему алгебраических уравнений, которую кратко можно записать в виде [6–10]

$$F_{\text{л}}(X) - fq = -F_{\text{н}}(X) + F_c(X), \quad (6)$$

где $X = [U(I), V(I), W(I), PS(I), PN(I)]^T$; fq – нагрузочный член (f – коэффициент); $F_{\text{л}}(X)$ и $F_{\text{н}}(X)$ – линейная и нелинейная части системы (6), соответствующие (вместе с нагрузочным членом) функционалу (4); $F_c(X)$ – часть системы (6), отвечающая функционалу (5).

В начальный момент $t = t_0$ $F_c(X) = 0$ и решением исходной задачи является решение упругой задачи [6–10]. Далее решаем систему (6) методом итераций:

$$F_{\text{л}}(X_i) - fq = F_{\text{н}}(X_{i-1}) + F_{\text{н}}(X_{i-1}) + F_c(\bar{X}_{i-1}), \quad (7)$$

где $\bar{X}_{i-1} = \sum_{K=0}^{i-1} X_K$.

Процесс продолжаем по времени t до критического его значения t_K , отвечающего резкому возрастанию прогибов (при заданном значении нагрузки q).

Таким способом может быть построена кривая снижения критической нагрузки, найденной в начальный момент времени $t = t_0$. Заметим, что при нахождении момента времени $t = t_K$, при котором происходит потеря устойчивости оболочки вследствие ползучести, конкретное значение K , принимаемое индексом k (пробегающим значения 1, 2, ..., K), заранее неизвестно. В процессе изменения индекса k вместе со значениями $R1_{k, i-1}$, $R2_{k, i-1}$ пересчитываем все значения, соответствующие функционалу (5) в полученном нами расчетном уравнении (7) [10].

Описанный алгоритм реализован в виде программного комплекса для ЭВМ. В рамках серии вычислительных экспериментов были выполнены (и в настоящее время продолжаются) расчеты для различных вариантов как гладких, так и ребристых оболочек каждого вида, отличающихся геометрическими размерами, кривизной, числом подкрепляющих ребер, материалом изготовления.

Приведем некоторые результаты для пологих изотропных оболочек (на прямоугольном плане), выполненных из оргстекла и железобетона.

Для удобства представления и анализа результатов функционал (4) был записан в безразмерных параметрах, описанных в работах [3, 4], в частности: безразмерных координатах $\xi = x/a$, $\eta = y/b$; безразмерных кривизнах $k_{\xi} = a^2 K_x/h$, $k_{\eta} = b^2 K_y/h$; безразмерных перемещениях $\bar{U} = aU/h^2$, $\bar{V} = bV/h^2$, $\bar{W} = W/h$ и углах $\bar{\Psi}_x = a\Psi_x/h$, $\bar{\Psi}_y = b\Psi_y/h$; безразмерной нагрузке $\bar{P} = a^4 q/Eh^4$.

Варианты и соответствующие параметры проанализированных пологих оболочек представлены в таблице.

Параметры проанализированных пологих оболочек

Вариант оболочки	Параметр			Возможный реальный размер, м		
	$a = b$	$R_1 = R_2$	$k_{\xi} = k_{\eta}$	$a = b$	$R_1 = R_2$	h
I	60h	225h	16	18	67,5	0,30
II	100h	251h	40	18	45,3	0,18
III	200h	503h	79,5	18	45,3	0,09
IV	600h	1510h	238	18	45,3	0,03



Для каждого варианта рассматривались как гладкие оболочки (не имеющие ребер), так и ребристые, подкрепленные регулярным набором из шести либо восемнадцати ребер. Считалось, что ребра расставлены вдоль координатных линий x и y соответственно по три ребра либо по девять в каждом из указанных направлений. Высота ребер принималась $3h$; ширина ребер полагалась равной $2h$, $3,3h$, $6,6h$ и $20h$ соответственно для вариантов оболочек I, II, III и IV.

Кроме того, при проведении расчетов предполагалось, что поперечная нагрузка q равномерно распределена ($q = \text{const}$); край (контур) оболочки закреплен шарнирно-неподвижным способом; число членов разложения в методе Ритца $N = 9$; коэффициент Пуассона $\mu = 0,354$ (для оргстекла) и $0,2$ (для бетона).

Функции влияния для полимерных материалов (в частности оргстекла) были взяты в виде

$$R_l(t, \tau) = A_l e^{-\beta_l(t-\tau)} (t-\tau)^{\alpha_l-1},$$

где A_l , α_l , β_l – константы, определяемые экспериментально ($1 \leq l \leq 2$) [2, 5].

Для старого бетона –

$$R_1(t, \tau) = \gamma E C_0 e^{-\gamma(1+E C_0)(t-\tau)},$$

$$R_2(t, \tau) = 2R_1(t, \tau)G/E,$$

где γ , C_0 – экспериментальные константы; $G = E/2(1+\mu)$ [11].

На рис. 1 в качестве примера представлены зависимости \bar{W} – t для различных вариантов оболочек и значений безразмерной нагрузки.

На рис. 2 для гладких оболочек, выполненных из оргстекла, представлены зависимости q/q_{kp}^m – t_{kp} снижения критической нагрузки вследствие ползучести (q_{kp}^m – мгновенная критическая нагрузка, найденная при решении упругой задачи; $t_{kp} = t_K$). Подобным образом выглядят кривые снижения и для железобетонных оболочек.

Таким образом, с увеличением толщины оболочки кривые снижения критической нагрузки ниспадают быстрее (более круто). Аналогичный вывод справедлив и в случае увеличения числа ребер, подкрепляющих оболочку.

Отметим, что решения, полученные для оболочек, выполненных из оргстекла, хорошо соглашаются с результатами натурных экспериментов, описанных в работе [2].

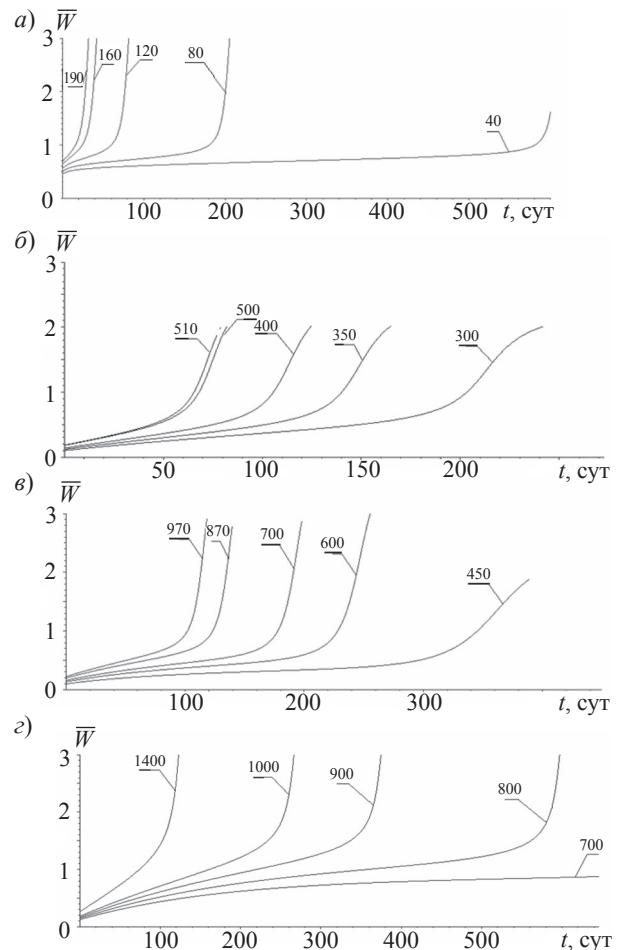


Рис. 1. Временные зависимости безразмерных величин поперечных перемещений (прогибов) для различных значений безразмерных нагрузок в случаях:

а – гладкой оболочки варианта I, выполненной из оргстекла; *б* – гладкой железобетонной оболочки варианта II; *в* – ребристой железобетонной оболочки варианта II с 6 ребрами; *г* – ребристой железобетонной оболочки варианта II с 18 ребрами
Числа над кривыми соответствуют значениям безразмерных нагрузок
Варианты оболочек даны в таблице

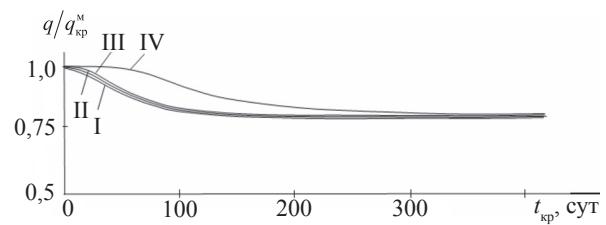


Рис. 2. Расчетные зависимости снижения критических нагрузок (вследствие ползучести) от времени для различных вариантов оболочек, выполненных из оргстекла (номера кривых соответствуют приведенным в таблице вариантам оболочек)

Отдельная серия расчетов для гладких и ребристых оболочек базового варианта III, отличающихся по кривизне [12], показала, что с увеличением кривизны оболочек (при неизменной толщине h) процесс ползучести в их материале (оргстекло, железобетон) развивается быстрее. Иными словами, с увеличением кривизны оболочки влияние деформаций ползучести на снижение критической нагрузки также возрастает.

Расчеты показали также, что вблизи критических нагрузок напряжения в материале оболочек

достигают достаточно высокого уровня. Следовательно, при исследовании устойчивости оболочек всегда необходим контроль их прочности.

Полученные результаты дают возможность рационально подбирать геометрические параметры и материал конструкции, а также задавать коэффициенты запаса прочности при решении задач устойчивости различных оболочек с учетом возможной ползучести материала.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Терегулов, И.Г. Изгиб и устойчивость тонких пластин и оболочек при ползучести [Текст] / И.Г. Терегулов. – М.: Наука, 1969. – 206 с.
2. Климанов, В.И. Нелинейные задачи подкрепленных оболочек [Текст] / В.И. Климанов, С.А. Тимашев. – Свердловск: УНЦ АН СССР, 1985. – 291 с.
3. Карпов, В.В. Нелинейные математические модели деформирования оболочек переменной толщины и алгоритмы их исследования [Текст]: учебное пособие / В.В. Карпов, О.В. Игнатьев, А.Ю. Сальников – М.: АСВ; СПб: СПбГАСУ, 2002. – 420 с.
4. Жгутов, В.М. Нелинейные свободные колебания пологих оболочек ступенчато-переменной толщины [Текст]: дисс. ... канд. техн. наук: 05.23.17: защищена 29.04.04: утв. 09.07.04 / Жгутов Владимир Михайлович. – СПб, 2004. – 177 с. – Библиог.: С. 125 – 145.
5. Жгутов, В.М. Анализ развития деформаций ползучести в материале пологих оболочек при длительном нагружении [Текст] / В.М. Жгутов, В.В. Карпов // XVIII сесс. Междунар. школы по моделям механики сплошной среды: Матер. междунар. конф. Саратов, 27 авг. – 1 сент. 2007 г.; Сарат. гос. ун-т / Под ред. акад. Н.Ф. Морозова. – Саратов: Изд-во Сарат. гос. ун-та, 2007. – 316 с. – С. 121 – 124.
6. Жгутов, В.М. Математические модели и алгоритмы исследования устойчивости пологих ребристых оболочек при учете различных свойств материала [Текст] / В.М. Жгутов // Изв. Орловского гос. техн. ун-та. Сер. «Строительство, транспорт». – 2007. – № 4. – С. 20 – 23.
7. Жгутов, В.М. Исследование прочности и устойчивости ребристых оболочек с помощью вычислительного эксперимента [Текст] / В.М. Жгутов // Проблемы прочности материалов и сооружений на транспорте: Сб. докл. VII Междунар. конф. по проблемам прочности материалов и сооружений на транспорте. 23 – 24 апреля 2008 года. – СПб.: Петерб. гос. ун-т путей сообщения, 2008. – 267 с. – С. 110 – 131.
8. Жгутов, В.М. Математическая модель и алгоритм исследования прочности и устойчивости ребристых оболочек с учетом различных свойств материала [Текст] / В.М. Жгутов // «Инженерные системы – 2008»: Всерос. научно-практ. конф.: Москва, 7 – 11 апреля 2008 года, РУДН. – М.: Изд-во РУДН, 2008. – С. 341 – 346.
9. Жгутов, В.М. Математическая модель деформирования ортотропных и изотропных ребристых оболочек при учете ползучести материала [Текст] / В.М. Жгутов // Инженерно-строительный журнал. – 2009. – № 7. – С. 46 – 54.
10. Жгутов, В.М. Анализ различных подходов к исследованию ползучести в материале пологих ребристых оболочек [Текст] / В.М. Жгутов // Строительная механика инженерных конструкций и сооружений. – 2010. – № 1. – С. 4 – 12.
11. Жгутов, В.М. Устойчивость железобетонных ребристых оболочек при длительных нагрузках [Текст] / В.М. Жгутов // Популярное бетоноведение. – 2010. – № 1.



12. Жгутов, В.М. Математическая модель, алгоритм исследования и анализ устойчивости нелинейно-упругих ребристых оболочек при больших перемещениях [Текст] / В.М. Жгутов //

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Сер. «Физико-математические науки» – 2009. – № 4. – С. 24 – 30.

УДК 519.6

Д.Г. Арсеньев, В.М. Иванов, Н.А. Берковский

АДАПТИВНЫЙ МЕТОД СУЩЕСТВЕННОЙ ВЫБОРКИ ПРИ ОГРАНИЧЕННОМ ЧИСЛЕ ШАГОВ БИСЕКЦИОННОГО ПРОЦЕССА

Адаптивный метод существенной выборки (ACB) является одним из проявлений идеи последовательных методов Монте-Карло для вычисления интегралов; впервые он предложен в работе [4]. Наиболее полно теория этого метода развита в монографии [1]. Там представлены оценки сходимости, гарантирующие при определенных условиях большую эффективность адаптивных методов по сравнению с классическими методами Монте-Карло, такими как метод существенной выборки и метод выделения главной части. Однако теория предполагает возможность сколь угодно точных кусочных аппроксимаций подынтегральной функции, что не может быть реализовано на практике. Особенно в случае интегралов высокой кратности в связи с ограничениями объема памяти вычислительного устройства вычислителя лимитирует число подобластей, на которые следует разбивать исходную область интегрирования.

В данной статье исследуются особенности применения ACB при условии, когда имеются ограничения в мелкости дробления области интегрирования. Разработан алгоритм, который позволяет эффективно применять адаптивную схему при малом числе шагов процесса бисекции. Возможности алгоритма показаны на примере методической одномерной задачи теории фильтрации и сравниваются с результатами, полученными методом Монте-Карло с гауссовой плотностью распределения, а также методом существенной выборки (СВ). Детально разбирается численный пример, в котором адаптивная схема оказывается эффективнее, чем метод СВ. Заметим, что согласно литературным данным адаптация в стохастическом интегрировании может быть основана и на других идеях [6].

Схема ACB в одномерном случае

Общая схема ACB для интегралов любой кратности приведена в работе [1]. Здесь для простоты рассмотрим ее одномерный вариант, предполагая интеграл несобственным с бесконечными пределами. Допустим, что необходимо приближенно вычислить $I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx$, где о функции $f(x)$ известно следующее:

она интегрируема на $[-\infty, \infty]$;
 $f(x) \neq 0$ почти везде на всей числовой оси;
значения $f(x)$ вне фиксированного промежутка $[a, b]$ пренебрежимо малы по сравнению с ее значениями внутри него, так что вклад этих значений в интеграл несуществен.

Последнему требованию можно придать более точную форму, но в этом нет необходимости. Кроме того, будем считать, что $f(x)$ такова, что дисперсия оценки $f(x)/p(x)$ конечна при всех плотностях $p(x)$, которые фигурируют в статье. Рассмотрим следующую схему вычислений.

1. Выберем произвольную плотность распределения $d(x)$ такую, что $d(x) > 0$ (строго) на всей числовой прямой.

2. Разделим $[a, b]$ на две равных части $[a, c]$ и $[c, b]$, возьмем малое число $\delta \geq 0$ и найдем значения

$$f_1 = \left| f\left(\frac{a+c}{2}\right) \right| + \delta, \quad f_2 = \left| f\left(\frac{b+c}{2}\right) \right| + \delta.$$

Обозначим промежутки $[a, c]$ и $[c, b]$ как Δ_1 и Δ_2 соответственно и рассмотрим функцию

$$\hat{f}_1(x) = \begin{cases} \sum_{k=1}^2 f_k \chi_{\Delta_k}(x), & x \in [a, b]; \\ d(x), & x \notin [a, b], \end{cases}$$



где $\chi_{\Delta_k}(x)$ обозначает характеристическую функцию промежутка Δ_k . Далее, введем функцию

$$p_1(x) = \frac{\hat{f}_1(x)}{\int_{-\infty}^{\hat{f}_1(x)}},$$

которая есть первое приближение оптимальной плотности распределения. Этот пункт служит инициализацией следующего итеративного процесса (см. далее п.п. 3, 4)

3. На шаге с номером N генерируем случайную точку x_N с плотностью распределения $p_N(x)$. Вычисляем первичную оценку

$$S_N = \frac{f(x_N)}{p_N(x_N)}.$$

По вычисленным ранее первичным оценкам S_1, S_2, \dots, S_N находим вторичную оценку

$$I_N = \sum_{k=1}^N \alpha_k S_k,$$

где α_k – весовые коэффициенты, которые в случае кусочно-постоянной аппроксимации выражаются как

$$\alpha_k = \frac{3k(k+1)}{N(N+1)(N+2)}.$$

Вычисляется асимптотически несмещенная оценка дисперсии

$$\sigma_N^2 = \sum_{k=1}^N (\alpha_k)^2 |S_k - I_N|^2.$$

При больших значениях N вторичная оценка $I_N \approx N(I, \sigma_N)$ в силу центральной предельной теоремы и утверждений, доказанных в работе [1]; при этом $\sigma_N = O(1/N)$ при дифференцируемой подынтегральной функции [1]. Если а) $N > N_0$ и б) $\sigma_N < \varepsilon/2$ (или $\sigma_N < \varepsilon/3$), где ε – точность вычислений, то процесс останавливается; при этом считаем $I_N \approx I$ с требуемой точностью. Если же конъюнкция а) и б) не имеет места, то переходим к п. 4.

4. Делим промежуток Δ_k , в который попала точка x_N , на две равных части Δ_k^1 и Δ_k^2 (бисекция). Вставляем в уже существующее разбиение

$$\tau_N = \{\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_{N+1}\}$$

промежутки Δ_k^1 и Δ_k^2 вместо Δ_k и получаем новое разбиение

$$\tau_{N+1} = \{\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_{N+2}\}.$$

Обозначим за ξ_k середины промежутков Δ_k , положим $f_k = |f(\xi_k)|$ и составим функцию

$$\hat{f}_{N+1}(x) = \begin{cases} \sum_{k=1}^{N+2} (f_k + \delta) \chi_{\Delta_k}(x), & x \in [a, b]; \\ d(x), & x \notin [a, b], \end{cases}$$

затем введем

$$p_{N+1}(x) = \frac{\int_{-\infty}^{\hat{f}_{N+1}(x)} dx}{\int_{-\infty}^{\hat{f}_{N+1}(x)} dx}$$

и перейдем к п. 3 на шаге $N+1$.

Поясним роль δ , N_0 , и $d(x)$. Параметр δ следует вводить для подынтегральных функций, которые могут быть очень близки к нулю на промежутке $[a, b]$, иначе метод не будет адекватно работать. N_0 – достаточно большое число (например 500) – вводится для того, чтобы исключить неадекватные оценки на первых шагах метода. Функция $d(x)$ нужна, чтобы определить плотность $p_N(x)$ вне промежутка $[a, b]$, на котором ведется адаптивный бисекционный процесс.

Схема АСВ при ограниченном числе шагов бисекционного процесса

Как уже отмечалось, вычислитель всегда ограничен в возможности увеличивать мощность разбиения $\tau_N = \{\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_{N+1}\}$. Будем предполагать, что мы можем разбить $[a, b]$ не более чем на N промежутков. Как показывает вычислительная практика, в некоторых задачах, если действовать согласно схеме, представленной в предыдущем разделе (см. пп. 1–4), и провести N итераций, то иногда удается добиться точного результата, а иногда нет. Заметим, что если дисперсия оценки $I_N = I_N(x_1, x_2, \dots, x_N)$ мала, то можно перейти к оценке

$$\bar{I}_M = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M I_N^k,$$

где I_N^k – k -ая реализация $I_N = I_N(x_1, x_2, \dots, x_N)$, а M – число реализаций I_N^k .



Но в случае большой дисперсии

$$I_N = I_N(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

этот способ не будет эффективен. Обозначим за $p_N^k(x)$ – случайную плотность, полученную при k -ой реализации I_N^k . Рассмотрим для каждой плотности $p_N^k(x)$ случайные величины

$$J_L^k = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \frac{f(x_i)}{p_N^k(i)},$$

которые являются стандартными оценками

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$$

методом Монте-Карло на плотности $p_N^k(x)$. В зависимости от вида $p_N^k(x)$ их дисперсия будет варьироваться от реализации к реализации. Кроме того, по-разному себя будет вести выборочное

стандартное отклонение $\sigma\left\{ \frac{f(x)}{p_N^k(x)} \right\}$. Чрезвычайно

неблагоприятно для вычислений, когда оно совершает относительно большие скачки на итерациях с большими номерами, препятствуя монотонному убыванию стандартных ошибок $\sigma\{J_L^k\}$. Это может сильно увеличивать время работы программы. Требования к оптимальной плотности $p_N^{opt}(x)$, выбираемой из случайных плотностей $p_N^k(x)$, можно сформулировать как следующие:

случайная величина $f(x)/p_N^{opt}(x)$ должна иметь минимальную дисперсию среди прочих плотностей $p_N^k(x)$;

оценка $\sigma\{J_L^k\}$ должна монотонно убывать с ростом L .

Практически это означает, что если с какой-то (не очень малой) вероятностью при определенном N генерируется эффективная для вычислений плотность $p_N^k(x)$, то можно попытаться «поймать» эту плотность и провести вычисления на ней стандартным методом Монте-Карло. Метод отслеживания плотностей может быть разным, и возможно, что это отдельная тема исследований.

В данной работе предлагается производить отбор статистическими методами, которые на первый взгляд занимают много времени. Однако, как это показано в разделе численных экспериментов, в отдельных ситуациях статистический подход оправдывает себя; именно при его использовании значительно быстрее вычисляется интеграл

и требуется меньше обращений к подынтегральной функции, чем при стандартном методе Монте-Карло и методе СВ. Алгоритм применения АСВ при ограниченном числе N шагов бисекционного процесса может быть следующим.

1. Генерируется небольшое число (3–5) случайных плотностей $p_N^k(x)$, и по малой выборке (200–300 точек) оцениваются величины $\sigma\left\{ \frac{f(x)}{p_N^k(x)} \right\}$.

Запоминается функция плотности $p_N^{\text{med}}(x)$, которая соответствует медиане

$$\text{Med} = \text{med}\left(\sigma\left\{ \frac{f(x)}{p_N^k(x)} \right\} \right).$$

Плотность с минимальной величиной $\sigma\left\{ \frac{f(x)}{p_N^k(x)} \right\}$ брать опасно, так как эта малость может быть неадекватной оценкой вследствие малости выборки. Вычисляется верхний порог max для последующих значений $\sigma\left\{ \frac{f(x)}{p_N^k(x)} \right\}$, равный этой медиане (или 120–150 % от нее для страховки).

2. Начинаются вычисления стандартным методом Монте-Карло с плотностью $p_N^{\text{med}}(x)$, т. е. вычисляется оценка

$$J_L^{\text{med}} = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \frac{f(x_i)}{p_N^{\text{med}}(i)}$$

и ее выборочное стандартное отклонение $\sigma\{J_L^{\text{med}}\}$. На каждом шаге, начиная с некоторого L_0 (300–500) вычисляется отношение

$$R = \left\{ \sigma_L \left[\frac{f(x)}{p_N^{\text{med}}(x)} \right] \right\} \Big/ \left\{ \sigma_{L-1} \left[\frac{f(x)}{p_N^{\text{med}}(x)} \right] \right\}.$$

Если $R < R_0$, то переходим к п. 3; R_0 – контрольное число ($1 < R_0 < 1,5$). Кроме того, каждые 100 итераций вычисляется

$$\text{diff} = \sigma\{J_L^{\text{med}}\} - \sigma\{J_{L-100}^{\text{med}}\},$$

если $\text{diff} < 0$, переходим к п. 3.

Этот двойной контроль отменяется, если требуемая точность уже почти достигнута, например, если

$$\sigma\{J_L^{\text{med}}\} < m\varepsilon/2,$$

где $1 < m < 1,5$.

Если на L -й итерации

$$\sigma\{J_L^{\text{med}}\} < \varepsilon/2,$$

то вычисления заканчиваются и $J_L^{\text{med}} \approx I$.

3. Генерируются новые плотности $p_N^k(x)$ до первой плотности $p_N^{\text{new}}(x)$, для которой

$$\sigma\left\{\frac{f(x)}{p_N^{\text{new}}(x)}\right\} < \max.$$

Величины $\sigma\left\{\frac{f(x)}{p_N^k(x)}\right\}$ оцениваются по небольшой выборке (200–300) точек. Далее для плотности $p_N^{\text{new}}(x)$, прошедшей отбор, повторяются действия по п. 2 с плотностью $p_N^{\text{new}}(x)$ вместо $p_N^{\text{med}}(x)$ и т. д.

Характерные черты и возможности схемы АСВ в условиях фиксированного числа шагов процесса бисекции

Следует заметить, что процедура, предложенная в предыдущем разделе, не обязана заканчиваться. Программа может перебирать плотность за плотностью. Эта проблема решается с помощью установки ограничений по времени, вывода на монитор различных сообщений о стадиях работы программы и т. п.

Предложенная схема легко комбинируется с методом существенной выборки, так как плотность, вычисляемая в соответствии с последним, может пройти такую же селекцию, как и плотности $p_N^{\text{new}}(x)$ (см. предыдущий раздел).

От стандартной схемы АСВ при неограниченном числе N (см. раздел «Схема АСВ в одномерном случае») остается, по существу, только метод подгонки плотности, главная черта которого – та, что промежутки $\{\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_N\}$ автоматически сгущаются в областях наибольших значений модуля подынтегральной функции; а это дает преимущества при вычислении интегралов от функций, имеющих резкие изолированные максимумы [2]. Оценки $I_N = \sum_{k=1}^N \alpha_k S_k$ не вычисляются, хотя, вероятно, можно составить алгоритм, аналогичный предложенному в предыдущем разделе, где они будут эффективно использоваться.

Кусочно-постоянные аппроксимации в процессе бисекции можно заменить более точными

аппроксимациями с использованием, например, формулы Тейлора.

Алгоритм выгодно применять в случае функций с резкими, почти сингулярными максимумами, расположение которых в области определения известно с точностью до достаточно крупной подобласти, содержащей экстремум. Примерами таких функций служат подынтегральные функции задачи оптимального оценивания, рассмотренной далее.

Параметры δ , N_0 , L_0 , R_0 и вспомогательную плотность $d(x)$ вычислитель выбирает по своему усмотрению. Для неопытного пользователя или в том случае, если программа вызывается автоматически как подпрограмма, их можно установить по умолчанию.

Постановка задачи оптимального оценивания

Рассмотрим следующую одномерную задачу оптимального оценивания.

Пусть случайная величина X распределена нормально с плотностью распределения $p(x) = N(x, \bar{x}, \sigma)$, а результат измерения Y при $X=x$ распределен с плотностью $p(y|x) = N(y, x, r)$. Допустим, что измерение положения X дало результат y . При этом условии требуется найти оптимальную оценку для значения X . Эта оценка находится по формуле

$$x^{opt}(y) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} xp(y|x)p(x)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} p(y|x)p(x)dx} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} f_1(x)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} f_2(x)dx}. \quad (1)$$

Известно точное решение задачи (1), а именно

$$x^{opt}(y) = \bar{x} + \frac{\sigma^2}{\sigma^2 + r^2} (y - \bar{x}). \quad (2)$$

Допустим, что интегралы в формуле (1) вычисляются каким-либо приближенным методом. Пусть δ_1 – относительная погрешность вычисления I_1 , а δ_2 – вычисления I_2 . Исходя из общей формулы абсолютной погрешности частного [5] для $\Delta_{x^{opt}(y)} = |x^{opt}(y) - x^{opt}(y)|$ имеем оценку:

$$\Delta_{x^{opt}(y)} \leq x^{opt}(y)(\delta_1 + \delta_2). \quad (3)$$

Пусть $\tilde{I}_1, \tilde{I}_2, \tilde{x}^{opt}(y) = \tilde{I}_1/\tilde{I}_2$ – это приближенные значения величин $I_1, I_2, x^{opt}(y)$. Учитываем, что



$$\delta_1 = \frac{|I_1 - \tilde{I}_1|}{I_1}, \quad \delta_2 = \frac{|I_2 - \tilde{I}_2|}{I_2},$$

и заменяем в оценке (3) точные значения приближенными; тогда имеем следующую оценку для теоретической погрешности:

$$\Delta_{x^{opt}(y)} = \left| \tilde{x}^{opt}(y) - x^{opt}(y) \right| \leq \frac{\tilde{I}_1}{I_2} \left(\frac{|I_1 - \tilde{I}_1|}{\tilde{I}_1} + \frac{|I_2 - \tilde{I}_2|}{\tilde{I}_2} \right). \quad (4)$$

Подразумевается, что абсолютные погрешности $|I_1 - \tilde{I}_1|$ и $|I_2 - \tilde{I}_2|$ можно эффективно оценить в процессе вычислений. Заметим, что при использовании стохастических методов оценка (4) носит вероятностный характер. Допустим, что

$$P(|I_1 - \tilde{I}_1| < \varepsilon) = \beta_1 \text{ и } P(|I_2 - \tilde{I}_2| < \varepsilon) = \beta_2.$$

Тогда при независимых выборках, используемых для числителя и знаменателя, с вероятностью $\beta_1 \beta_2$ будет верна оценка

$$\Delta_{x^{opt}(y)} \leq \frac{\tilde{I}_1 \varepsilon}{I_2} \left(\frac{1}{\tilde{I}_1} + \frac{1}{\tilde{I}_2} \right).$$

Однако, как показала вычислительная практика, использовать независимые выборки неэффективно. Лучше использовать одну выборку для числителя и знаменателя, при этом оказывается, что погрешности $|I_1 - \tilde{I}_1|$ и $|I_2 - \tilde{I}_2|$ коррелируют таким образом, что для достаточно малых ε условная вероятность

$$P(|I_1 - \tilde{I}_1| < \varepsilon \mid |I_2 - \tilde{I}_2| < \varepsilon) \approx 1,$$

следовательно, формулой (4) можно пользоваться с той же степенью достоверности, что и оценками для числителя и знаменателя по методу Монте-Карло. К сожалению, оценка (4) оказывается сильно завышенной (см. далее), и альтернативы ей, кроме различных эмпирических подходов, пока не разработано.

Раздел численных экспериментов

Основные результаты. Задача оптимального оценивания, сформулированная в предыдущем разделе, решалась при случайной величине X , распределенной нормально с плотностью $p(x) = N(x, 1, 1)$, при условии, что известен результат измерения $y = 1,1$. Графики подынтегральных

функций числителя и знаменателя при различных значениях r представлены на рис. 1. Видно, что с уменьшением значения r обе подынтегральные функции становятся все более похожими на дельта-функцию, и соответственно, становятся проблемой для численного интегрирования. В данной задаче оба интеграла вычисляются аналитически (точные значения см. в табл. 1).

Таблица 1

Зависимость точных значений оценки и интегралов формул (1) от значения r

r	$x^{opt}(y)$	I_1	I_2
1	1,05000	0,29546	0,2813904
0,1	1,099010	0,43411	0,3950021
0,01	1,0999900	0,43662	0,3969524
0,001	1,0999990	0,43655	0,3969524

Обозначения: $I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x) dx$, $I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} f_2(x) dx$

Вычисления проводились в системе MATLAB, на тактовой частоте 3 ГГц. Рассмотрено три метода, обозначенные как МК Гаусс, СВ и АСВ.

МК Гаусс – это стандартный метод Монте-Карло, где плотность распределения вбрасываемых точек суть $p(x) = N(x, 1, 1)$.

СВ – это метод существенной выборки, в котором $I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$ с плотностью

$$p_N(x) = \frac{\tilde{f}_N(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}_N(x) dx},$$

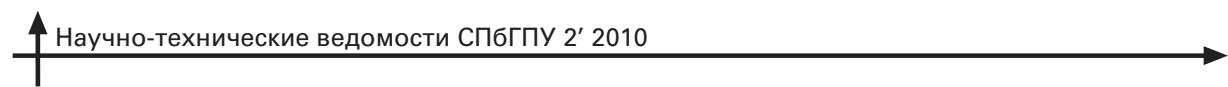
где

$$\tilde{f}_N(x) = \begin{cases} \sum_{k=1}^N (f_k + \delta) \chi_{\Delta_k}(x), & x \in [-2, 4]; \\ N(x, 1, 1), & x \notin [-2, 4]; \end{cases}$$

при этом

$$\Delta_k = \left[-2 + \frac{6(k-1)}{N}, -2 + \frac{6k}{N} \right],$$

а f_k – значения модуля функции в серединах Δ_k . Таким образом, имеем кусочно-постоянную аппроксимацию на промежутке $[-2, 4]$, где равны



промежутки постоянства Δ_k . Промежуток $[-2, 4]$ выбран из того соображения, что по правилу «трех сигм» случайная величина X почти достоверно в нем находится. Как и прежде, величина $\delta \geq 0$ введена во избежание больших дисперсий при подынтегральных функциях, близких к нулю на промежутке $[-2, 4]$ (в данных примерах это имеет место).

ACB – адаптивный метод существенной выборки, применяемый согласно схеме, описанной во втором разделе данной статьи, причем $d(x) = N(x, 1, 1)$. И в ACB, и в СВ число $N = 1000$ (ограничение на мощность разбиения), $\delta = 0,005$; это обеспечивало корректное сравнение методов. Представляло интерес выяснить, в каких случаях переход от метода СВ к более алгоритмически

сложному АСВ оправдан в отношении трудоемкости вычислений. В табл. 2 и 3 приведены результаты численных экспериментов. Ввиду того, что на месте простых интегrandов могли оказаться более сложные функции, вычисление которых заняло бы больше времени, чем вычисление функций данной задачи, сравнение методов проведено по времени и числу обращений к подынтегральным функциям. В табл. 3 представлено сравнение параметров выигрыша. При этом в столбце «Параметр выигрыша по f » записаны отношения числа обращений к интегrandам методом МК Гаусс к числу обращений рассматриваемым методом (СВ или АСВ). Аналогичные показатели для времени содержатся в столбце «Параметр выигрыша по t ».

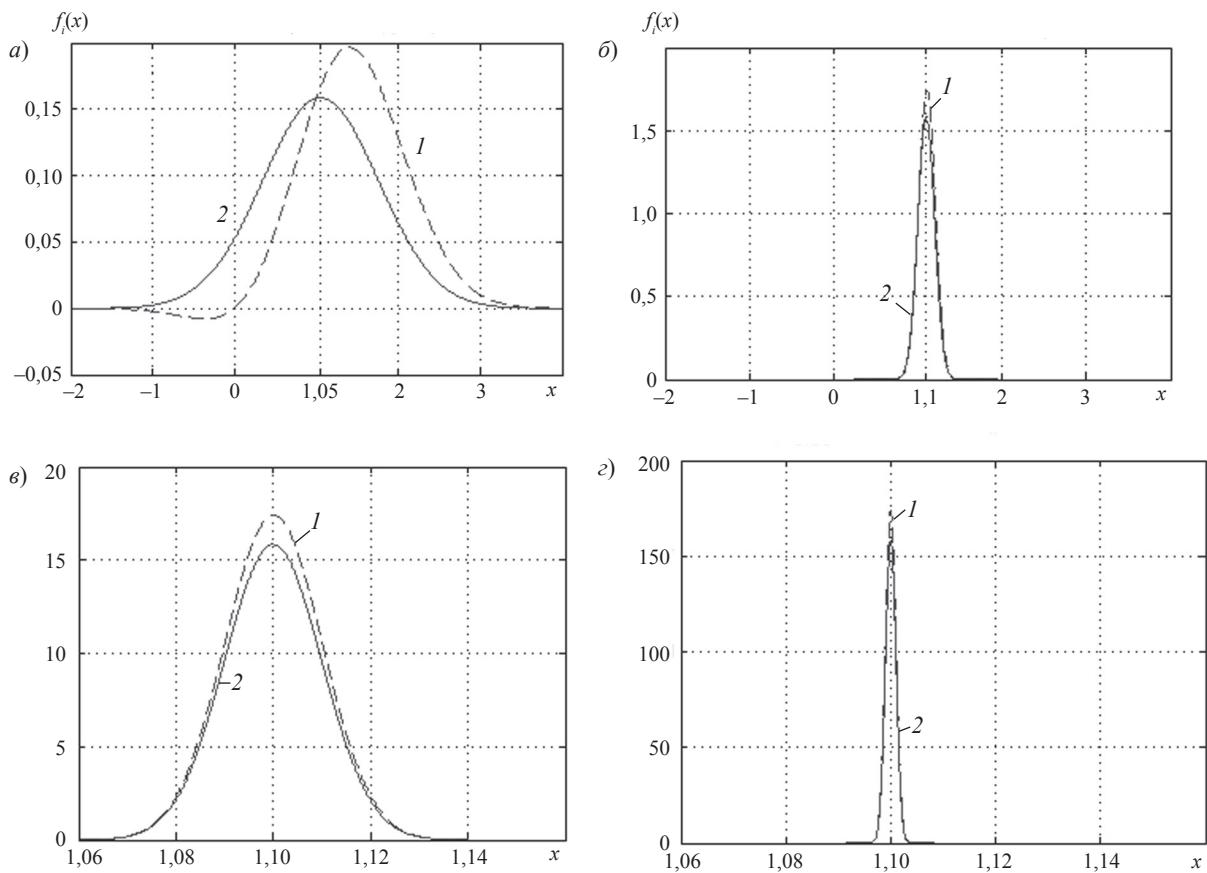


Рис. 1. Графики подынтегральных функций $f_1(x)$ (1) и $f_2(x)$ (2) (интегrandов числителя и знаменателя соответственно) при различных значениях среднеквадратичного отклонения r : 1 (a); 0,1 (b); 0,01 (c); 0,001 (d)
(Следует обратить внимание на разные масштабы по обеим осям)



Таблица 2

Результаты численных экспериментов, проведенных тремя методами

Параметр сравнения	Значение параметра для различных значений r											
	1			0,1			0,01			0,001		
	МК Гаусс	СВ	ACB	МК Гаусс	СВ	ACB	МК Гаусс	СВ	ACB	МК Гаусс	СВ	ACB
Абсолютная погрешность	$1,66 \cdot 10^{-3}$	$1,04 \cdot 10^{-3}$	$1,03 \cdot 10^{-3}$	0,000	$1,6 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	0,000	0,000	0,000
Число обращений к функциям, тыс.	378	86	90	9337	116	123	106957	168	171	1081095	110342	305
Время, с	9	48	45	208	35	35	2738	47	48	24252	30281	92
Теоретическая погрешность	$7,3 \cdot 10^{-3}$	$7,3 \cdot 10^{-3}$	$7,3 \cdot 10^{-3}$	$5,3 \cdot 10^{-3}$	$4,9 \cdot 10^{-3}$	$5,3 \cdot 10^{-3}$						

Обозначения: МК Гаусс – метод Монте-Карло с гауссовой плотностью распределения, СВ и АСВ – традиционный и аддитивный методы существенной выборки; r – среднеквадратичное отклонение измерений

Таблица 3

Сравнение параметров выигрыша в зависимости от среднеквадратичного отклонения r для трех вычислительных методов

r	Значение параметра выигрыша					
	по f			по t		
	МК Гаусс	СВ	ACB	МК Гаусс	СВ	ACB
1	1,0	4,4	4,2	1,0	0,2	0,2
0,1		80,3	75,5		5,9	5,9
0,01		633,3	623,4		50,6	49,5
0,001		9,8	3533,6		0,8	263,6

Примечание. Параметр выигрыша – это число обращений к функции или время счета методом МК Гаусс, деленное на соответствующий показатель рассматриваемого метода

Счет по всем методам (см. табл. 2 и 3) прекращался по достижении точности 0,001 для обоих интегралов. Отметим, что в методах СВ и АСВ при $r = 1$ аппроксимировались плотности и в числителе, и в знаменателе. При остальных значениях r аппроксимировалась только оптимальная плотность знаменателя ввиду подобия интегrandов. Это позволило сэкономить время, хотя и незначительно. Для метода АСВ взяты средние значения по 100 просчетам.

Из данных табл. 3 видно, что только при $r = 1$ стандартный метод МК Гаусс имеет преимущество перед методом АСВ во времени за счет простоты программной реализации. При уменьшении значения r это преимущество теряется; кроме того, при этом резко увеличивается преимущество

метода АСВ перед методом МК Гаусс как по времени, так и по малости числа обращений к функции. Более сложная ситуация возникает при сравнении методов АСВ и СВ: когда $r > 0,001$, результаты примерно одинаковы, а при $r = 0,001$ АСВ оказывается значительно эффективнее. Объяснение этого результата дано в следующем подразделе. Наконец, отметим, что значения теоретической погрешности (см. табл. 2), полученные по формуле (4), оказываются сильно завышенными, так что оценка (4) в данном случае неэффективна. Поиск формулы, которая бы без избытка оценивала погрешность частного в данной задаче, остается актуальной проблемой, очевидного решения которой пока не найдено. Данные табл. 3 убедительно показывают преимущества метода АСВ в случае малых значений величины r .

Анализ результатов численных экспериментов. По итогам вычислительной практики была получена следующая зависимость среднего количества плотностей распределения, перебираемых методом АСВ в процессе решения задачи, от значения среднеквадратичного отклонения r :

r	Количество плотностей
$>0,01$	1
0,01	3
0,001	30

Другими словами, при ограничении мощности разбиения значением $N = 1000$ при $r > 0,01$ достоверно генерируется «удачная» плотность распределения, при $r = 0,01$ она генерируется с вероятностью $1/3$, а при $r = 0,001$ – такая вероятность мала и составляет всего $1/30$.

На рис. 2 показаны гистограммы двух плотностей, сгенерированных методом ACB при $r = 0,01$: одна – «неудачная», которая удаляется согласно алгоритму отбора, другая – «удачная», благоприятная для вычислений. Кроме того, на рис. 2 показана гистограмма плотности, полученной по методу СВ.

Заметим, что на рис. 2 в качестве «неудачной» плотности для наглядности показан очень неблагоприятный случай, который встречается с малой вероятностью, однако критерий отбора, заложенный в ACB, удаляет плотности даже более похожие на нормальное распределение, т. е. отбор ведется весьма строго. Видно, что плотность, полученная методом СВ (рис. 2, δ), менее точно подогнана под интегрируемую функцию, чем «удачная» плотность ACB (рис. 2, δ). Однако, за счет

равномерного измельчения промежутка метод СВ достаточно точно повторяет поведение интегranda, в частности, симметрию, поэтому метод СВ эффективен при значении $r = 0,01$. Иная картина наблюдается при $r = 0,001$ (рис. 3). Видим, что из-за недостаточно мелкого разбиения плотность, построенная в соответствии с методом СВ (рис. 3, δ), не повторяет важнейшую особенность поведения интегranda, а именно резкий максимум при $x = 1,10$, из-за чего метод СВ становится неэффективным при $r = 0,001$. На рис. 3, a показана гистограмма одной из немногочисленных плотностей, прошедших отбор в методе ACB; видно, что она воспроизводит поведение подынтегральной функции гораздо точнее. Аналогичная ситуация наблюдалась в работе [2] для многомерного случая. На процедуру отбора тратится немалое

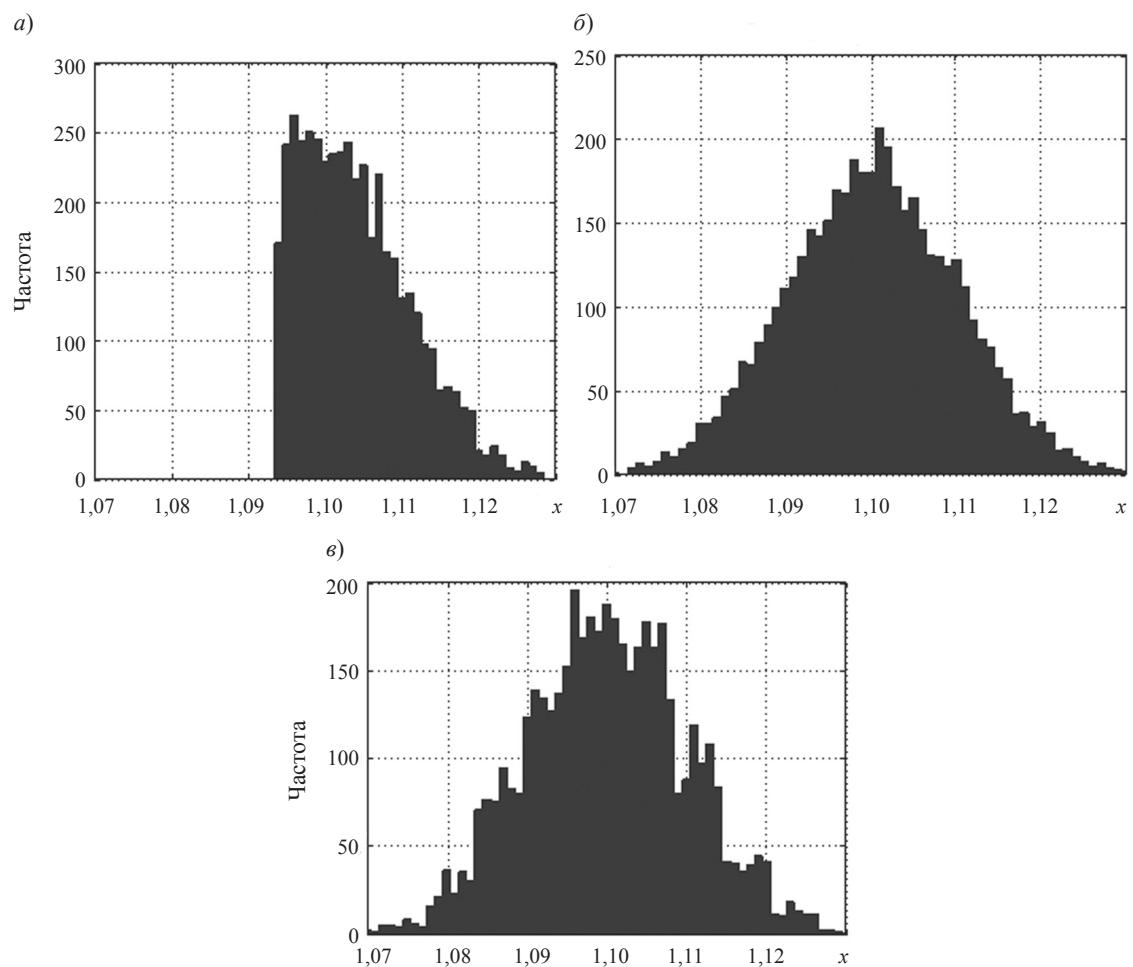


Рис. 2. Гистограммы плотностей распределения, полученных при $r = 0,01$ методами ACB (a, δ) и СВ (δ);
 a, δ – «неудачное» и «удачное» распределения плотности

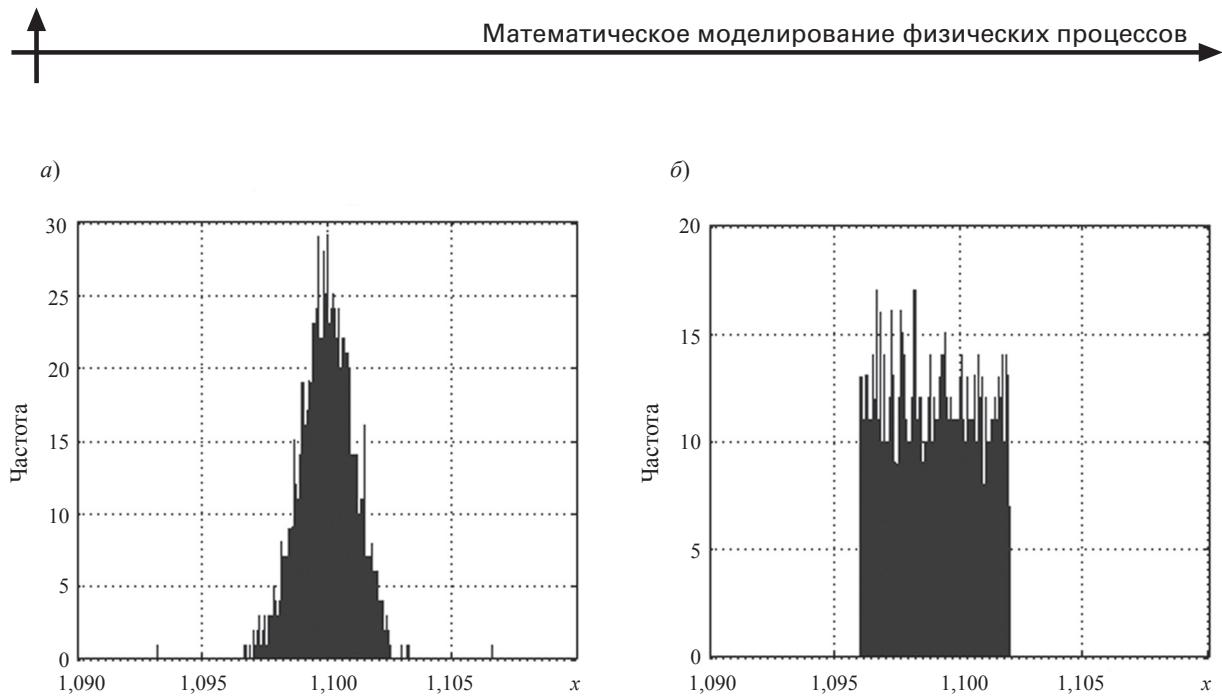


Рис. 3. Гистограммы плотностей распределения, полученных при $r = 0,001$ методами АСВ (а) и СВ (б);
а, б – «удачное» и «неудачное» распределения плотности

машинное время, однако в среднем это время оказывается значительно меньшим, чем затраченное на счет для одной плотности методами МК Гаусс или СВ.

Итак, нами предложен практический алгоритм численного стохастического интегрирования, основанный на идее адаптации плотности распределения. По сравнению с основными предшествующими источниками акцент был сделан не на скорости сходимости адаптивного метода

в бесконечности, а на возможностях адаптивного подхода в естественных условиях ограниченной мощности разбиения области интегрирования.

Этот алгоритм следует применять в сложных задачах, не поддающихся быстрому решению при использовании стандартной схемы метода существенной выборки; последняя может входить в данный алгоритм как частный случай. На примере задачи оптимального оценивания показаны преимущества предложенной схемы и объяснен механизм возникновения этого преимущества.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Арсеньев, Д.Г. Адаптивное управление в стохастических методах вычислительной математики и механики [Текст] / Д.Г. Арсеньев, В.М. Иванов, М.Л. Кореневский. – 2-е изд., испр. и доп. – СПб.: Наука, 2008 – 423 с.
2. Арсеньев, Д.Г. Анализ эффективности адаптивного метода существенной выборки [Текст] / Д.Г. Арсеньев, В.М. Иванов, Н.А. Берковский // Научно-технические ведомости СПбГПУ. – 2009. – № 4 (88). – С. 43–50.
4. Halton, J.H. Sequential Monte Carlo [Text] / J.H. Halton// Proc. Cambridge Philos. Soc. – 1962. – Vol. 58. – № 1. – P. 57–78.
5. Демидович, Б.П. Основы вычислительной математики [Текст]: Учеб. пос. для студ. / Б.П. Демидович, И.А. Марон. – СПб: «Лань», 2009. – 672 с.
6. Ohl, T. Vegas revisited: Adaptive Monte Carlo integration beyond factorization [Text] / T. Ohl // Comput. Phys. Commun. – 1999. – Vol.120. – № 1. – P. 13–19.



Физика молекул, кластеров и наноструктур

УДК 539.193/194; 544.163.2

Т.П. Степанова, А.С. Артамонова, В.М. Капралова

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И КОНФОРМАЦИЯ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ПОЛИ- γ -БЕНЗИЛ-L-ГЛУТАМАТА И ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА В РАЗБАВЛЕННОМ РАСТВОРЕ

В настоящее время приобрело большое практическое значение получение полимеров с жидкокристаллическими свойствами, макромолекулы которых имеют в главной цепи чередующиеся жесткие (например мезогенные) и гибкоцепные участки [1]. Известно [2], что явление надмолекулярного структурообразования как в полимерных пленках и волокнах, так и в концентрированных растворах (лиотропное жидкокристаллическое состояние), определяется в первую очередь химической природой полимера и конформационными свойствами его макромолекул. Удобной моделью для изучения свойств и термотропных, и лиотропных жидкокристаллических систем являются блок-сополимеры, полученные на основе синтетических полипептидов и гибких карбоцепных полимеров.

В работе представлено исследование статической диэлектрической поляризации блок-сополимеров типа АВА на основе α -спирального поли- γ -бензил-L-глутамата П- γ -БГ (А) и гибкоцепного полиметилметакрилата ПММА (В) двух составов, а также гомополимеров А и В в растворах в хлороформе.

Методика эксперимента

Синтез блок-сополимеров на основе П- γ -БГ (А) и ПММА (В) описан в работах [3, 4]. Синтезировали блок-сополимеры двух составов А : В (СІ и СІІ). По результатам элементоорганического анализа содержание блоков А и В в сополимерах СІ и СІІ было 1 : 2,5 и 1 : 9 соответственно. Степень

полимеризации компонента А в обоих сополимерах составляла 114; степень полимеризации компонента В в СІ и в СІІ – 570 и 2050 соответственно.

Измерения диэлектрической проницаемости проводили в ячейке, представляющей собой бюкс из стекла пирекс, в крышку которого была вмонтирована система платиновых пластинчатых электродов [5]. Собственная электрическая емкость конденсатора составляла 55,7 пФ при паразитной емкости 2,4 пФ; объем заполнения – приблизительно 8 см³. Анализатором электрической емкости и электропроводности изучаемых растворов служил точный полуавтоматический мост TESLA ВМ-484. Диэлектрическая проницаемость на частоте 1,594 кГц определялась с точностью 0,1 %.

Область весовых концентраций растворов с линейной концентрационной зависимостью диэлектрической проницаемости устанавливали экспериментально: $w_2 \leq 4 \cdot 10^{-4}$ г/г для П- γ -БГ, $w_2 \leq 1,2 \cdot 10^{-3}$ г/г для блок-сополимеров АВА и $w_2 \leq 2 \cdot 10^{-2}$ г/г для ПММА.

Плотности растворов определяли в бикапиллярном пикнометре-дилатометре. Объем заполнения пикнометра при комнатной температуре – 4 см³. Погрешность определения плотности – не более 0,05 %.

Общая погрешность определения дипольного момента составляла не более $\pm 0,1$ Д.

Температура поддерживалась постоянной с точностью $\pm 0,1$ °С в объеме ультратермостата U-3.

Хлороформ использовали очищенный, высушенный и фракционно перегнанный по стандартной методике.



Методика обработки экспериментальных данных

Наличие гибкоцепного клубка полимера В, соединяющего два жестких компонента А, определяет конформацию макромолекулы блок-сополимера как конформацию шарнирно соединенных стержней (блоки А – стержни, блок В – шарнир). В макромолекулах блок-сополимеров АВА с компонентом В различной молекулярной массы среднестатистические углы между жесткими стержнями необразными компонентами А, обладающими значительными дипольными моментами, должны различаться. Оценку этого угла провели методом дипольных моментов описанным далее способом.

Основной вклад в средний дипольный момент макромолекул блок-сополимеров АВА дает компонент А, и величина дипольного момента макромолекулы блок-сополимера будет определяться мольной концентрацией блоков полипептида. Вклад компонента А в молярную ориентационную поляризацию макромолекулы блок-сополимера АВА определяли по формуле

$$P_{2A} = \frac{P_{2\text{соп}} - x_B P_B}{x_A}, \quad (1)$$

где P_{2A} – молярная ориентационная поляризация компонента А в растворе блок-сополимера АВА; P_B – молярная ориентационная поляризация компонента В; x_A и x_B – мольные концентрации компонентов А и В соответственно. Молярную ориентационную поляризацию сополимера в растворе $P_{2\text{соп}}$ рассчитывали, используя формулу Барриоль-Вайсбекера [6]:

$$\frac{\overline{\mu_{\text{соп}}^2}}{M_{\text{соп}}} = \frac{9kT}{4\pi N_A} \cdot \frac{2\epsilon_1^2 + n_1^4}{\epsilon_1^2(n_1^2 + 2)^2 \rho_1} \cdot \frac{\epsilon_{12}}{w_2}; \quad (2)$$

$$P_{2\text{удсоп}} = \frac{2\epsilon_1^2 + n_1^4}{\epsilon_1^2(n_1^2 + 2)^2 \rho_1} \cdot \frac{\epsilon_{12}}{w_A}; \quad (3)$$

$$P_{2\text{соп}} = \overline{M}_{\text{соп}} P_{2\text{удсоп}}, \quad (4)$$

где ϵ_1 , n_1 , ρ_1 – диэлектрическая проницаемость, показатель преломления, плотность растворителя; ϵ_{12} – диэлектрическая проницаемость раствора, w_2 – массовая концентрация полимера в растворе; $P_{2\text{удсоп}}$ – удельная ориентационная поляризация сополимера; $\overline{M}_{\text{соп}}$, $\overline{\mu_{\text{соп}}^2}$ – средняя молекулярная масса сополимера на мономерное звено и средний

квадрат дипольного момента макромолекулы сополимера соответственно.

Средняя молекулярная масса сополимера на мономерное звено выражается как

$$\overline{M}_{\text{соп}} = x_A M_A + x_B M_B, \quad (5)$$

где M_A , M_B – молекулярная масса мономерного звена компонентов А и В соответственно; k , T , N_A – постоянная Больцмана, абсолютная температура и число Авогадро.

Ориентационную поляризацию компонента В определяли из измерений эффективного дипольного момента гомополимера ПММА $\mu_{\text{эф}}$ в растворе в хлороформе по формуле Бакингейма для бинарного раствора в условиях бесконечного разбавления [7]:

$$\begin{aligned} \mu_{\text{эф}}^2 = & \frac{kT}{4\pi N_A} \times \\ & \times \left\{ \frac{(\epsilon_1 - 1)(2\epsilon_1 + 1)}{\epsilon_1} \left[(M_2 - M_1)v_{\text{уд}} + M_1 \frac{\partial v_{12\text{уд}}}{\partial x_2} \Big|_{x_2=0} \right] + \right. \\ & + M_1 v_{1\text{уд}} \frac{2\epsilon_1^2 + 1}{\epsilon_1^2} \cdot \frac{\partial \epsilon_{12}}{\partial x_2} \Big|_{x_2=0} - \frac{6(n_1^2 - 1)}{(2\epsilon_1 + n_1^2)^2} V_1 \frac{\partial \epsilon_{12}}{\partial x_2} \Big|_{x_2=0} + \\ & \left. + \frac{3(2\epsilon_1 + 1)(n_1^2 - 1)}{2\epsilon_1 + n_1^2} V_1 - \frac{3(2\epsilon_1 + 1)(n_2^2 - 1)}{2\epsilon_1 + n_2^2} V_2 \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

где ϵ , n , $v_{\text{уд}}$, V , M – диэлектрическая проницаемость, показатель преломления, удельный объем, молярный объем, молекулярная масса; индексы 1, 2 относятся к растворителю и полимеру соответственно;

$\frac{\partial \epsilon_{12}}{\partial x_2} \Big|_{x_2=0}$ и $\frac{\partial v_{12\text{уд}}}{\partial x_2} \Big|_{x_2=0}$ – инкременты диэлектрической проницаемости и удельного объема раствора полимера при бесконечном разбавлении.

Таким образом, при исследовании статической диэлектрической проницаемости растворов сополимера АВА и гомополимера В по формулам (1) – (6) определена молярная ориентационная поляризация P_{2A} – вклад компонента А в ориентационную поляризацию раствора макромолекул АВА.

Теперь заменим макромолекулу блок-сополимера АВА гипотетической макромолекулой полипептида с некоторой степенью полимеризации n_A^* так, чтобы молярная ориентационная поляризация гипотетического полипептида была равна молярной ориентационной поляризации P_{2A} компонента А в блок-сополимере.

Таблица 1

Температурная зависимость свойств хлороформа

Дипольный момент $\bar{\mu}_A$ и молекулярная масса макромолекулы полипептида M_A прямо пропорциональны степени полимеризации n_A^* :

$$\bar{\mu}_A = \mu_{0A} n_A^*; M_A = M_{0A} n_A^*, \quad (7)$$

где μ_{0A} , M_{0A} – дипольный момент макромолекулы П- γ -БГ на мономерное звено и молекулярная масса мономерного звена П- γ -БГ соответственно. Дипольный момент макромолекулы П- γ -БГ (гомополимера A) на мономерное звено μ_{0A} определили по результатам изучения диэлектрической поляризации гомополимера A в растворе в хлороформе.

Используя выражения (7) и формулу Барриоля–Вайсбекера для гомополимера A в виде

$$\frac{\bar{\mu}_A^2}{M_A} = \frac{9kT}{4\pi N_A} P_{2A\text{уд}}, \quad (8)$$

получим для искомой степени полимеризации гипотетического полипептида выражение

$$n_A^* = \frac{9kT}{4\pi N_A} P_{2A} \frac{1}{\mu_{0A}^2}, \quad (9)$$

где $P_{2A} = P_{2A\text{уд}} M_{0A}$.

По известным значениям n_A и n_A^* рассчитывали угол α между блоками A в блок-сополимерах АВА для конформации шарнирно соединенных стержней:

$$\alpha = 2 \arcsin \frac{n_A^*}{2n_A}. \quad (10)$$

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Дипольный момент хлороформа. В табл. 1 представлены значения диэлектрической проницаемости и удельного объема хлороформа, измеренные при различных температурах, а также значения молекулярного дипольного момента μ , рассчитанные по формуле Онзагера [8]:

$$\mu^2 = \frac{9kT}{4\pi N_A} \frac{M}{\rho} \cdot \frac{(2\epsilon + n^2)(\epsilon + 2)}{3\epsilon(n^2 + 2)} \left(\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} - \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \right), \quad (11)$$

где ϵ , n , ρ , M – диэлектрическая проницаемость, показатель преломления, плотность и молекулярная масса хлороформа.

$t, ^\circ\text{C}$	ϵ	$v, \text{см}^3/\text{г}$	$\mu, \text{Д}$
10	5,15 ₅	0,6643	1,27 ₄
15	5,05	0,6688	1,27 ₄
20	4,95	0,6735	1,27 ₄
25	4,85	0,6780	1,27 ₄
30	4,75	0,6825	1,27 ₃
35	4,65	0,6871	1,27
40	4,54 ₅	0,6917	1,26 ₆
50	4,34	0,7010	1,25 ₆

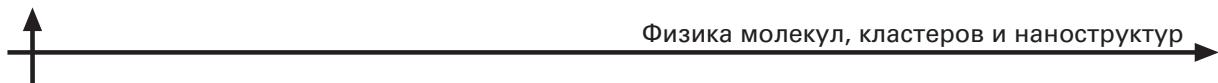
Показатели преломления рассчитывали по значениям молярной рефракции R_D :

$$R_D = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \cdot \frac{M}{\rho},$$

где n , ρ , M – показатель преломления, плотность и молекулярная масса вещества.

Молярную рефракцию определяли по молярным рефракциям связей [9]. Как видно из таблицы, величина дипольного момента хлороформа при 20 °C составляет 1,27 Д, что находится в хорошем согласии с известным из литературы значением дипольного момента чистого хлороформа [10]. Величина дипольного момента молекулы хлороформа, определенная по методу разбавленных растворов Дебая в неполярном растворителе (бензоле), составляет 1,13 Д. Повышенное значение дипольного момента чистого хлороформа обусловлено межмолекулярным взаимодействием: ассоциированием молекул хлороформа водородными связями.

Дипольный момент ПММА. На рис. 1 представлены температурно-концентрационные зависимости диэлектрической проницаемости (а) и удельных объемов (б) растворов ПММА в хлороформе, а также температурная зависимость дипольного момента (в) макромолекулы ПММА на мономерное звено μ , рассчитанного по формуле (6). Видно, что величина μ изменяется от 2,47 Д при 20 °C до ~2,7 Д при 50 °C. В неполярных и слабополярных растворителях в бензole и в толуоле значения μ для ПММА составляют при тех же температурах 1,32 и 1,40 Д [13]. Более высокие значения μ ПММА в хлороформе обусловлены тем, что полиэфиры акриловой и метакриловой кислот, а также их мономеры образуют с молекулами хло-



роформа комплексы за счет водородных связей, что подтверждается исследованиями методом ИК спектроскопии [11, 12]. Некоторое увеличение значения μ ПММА может быть обусловлено полярными концевыми группами его макромолекул, специально введенными для проведения реакции ПММА с полипептидом.

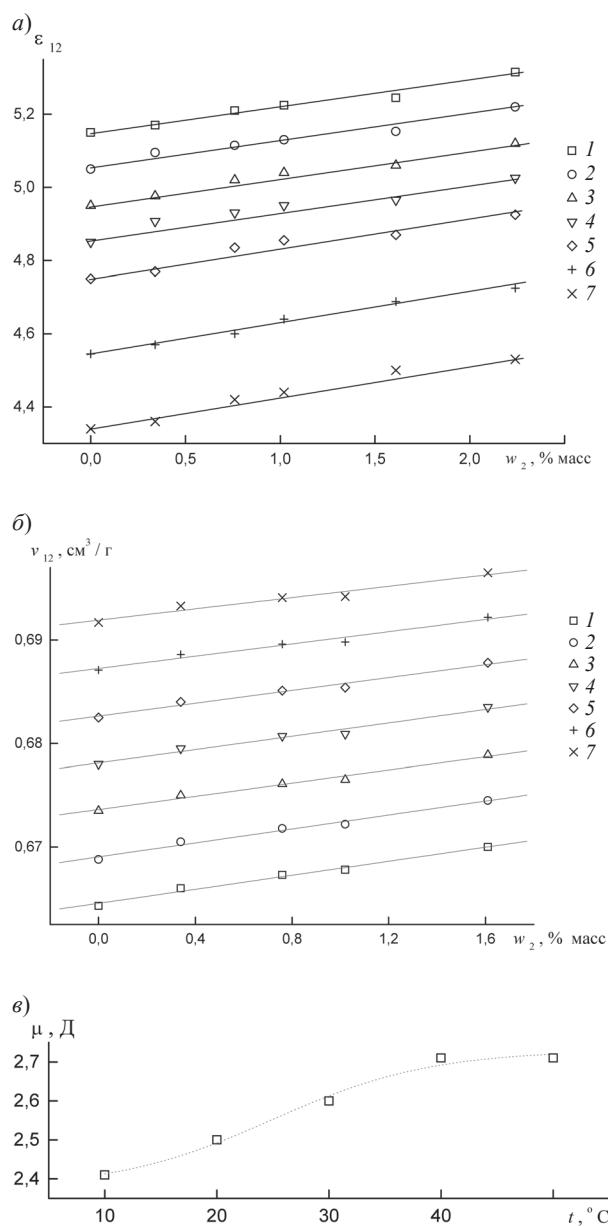


Рис. 1. Концентрационные зависимости диэлектрической проницаемости (а) и удельного объема (б) растворов ПММА в хлороформе при температурах t , °С: 10 (1); 15 (2); 20 (3); 25 (4); 30 (5); 35 (6); 40 (7); температурная зависимость дипольного момента на мономерное звено ПММА (в)

Дипольный момент П- γ -БГ в расчете на пептидный остаток. На рис. 2 представлены температурно-концентрационные зависимости диэлектрической проницаемости растворов П- γ -БГ в хлороформе. Как уже упоминалось, определение диэлектрической поляризации П- γ -БГ было предпринято с целью оценки величины дипольного момента П- γ -БГ на пептидный остаток в растворе в хлороформе. В табл. 2 представлены инкремент диэлектрической проницаемости П- γ -БГ в условиях бесконечного разбавления в хлороформе, удельная поляризация, вычисленная по формуле (3). В последнем столбце таблицы представлены значения μ_{0A} , вычисленные при использовании выражения (8) и степени полимеризации блока П- γ -БГ, равной 114. Величина дипольного момента П- γ -БГ на пептидный остаток μ_{0A} , рассчитанная по Барриолю–Вайсбекеру, равна при 20 °С 3,48 Д (см. табл. 2), что хорошо совпадает со значениями этой величины, полученными при исследовании дипольных моментов П- γ -БГ в смесях растворителей, обеспечивающих молекулярную дисперсность П- γ -БГ [13–16], а также с теоретическим значением дипольного момента α -спирали на пептидный остаток 3,8 Д [17].

Таблица 2

Температурная зависимость основных параметров П- γ -БГ в хлороформе

t , °С	α	$p_{2уд}$, см ³ /г	μ_{0A} , Д
10	1375	118	3,25
20	1485	131	3,48
30	1590	144	3,72
40	1695	158	3,95
50	1805	173	4,21

Примечание. $\alpha = (\Delta\epsilon/w_2)_{w2=0}$ – инкремент диэлектрической проницаемости

Полученный результат показывает, что определение μ_{0A} для П- γ -БГ в растворителе в хлороформе дает его правильное значение при использовании для расчета диэлектрической поляризации полипептида формулы Барриоля–Вайсбекера. Напротив, использование формулы Вада [18, 19] для расчета удельной поляризации растворенного полипептида дает завышенное значение $\mu_{0A} = 5,55$ Д при 20 °С. Наблюдаемое изменение μ_{0A} с температурой от 3,25 до 4,00 Д в области температур

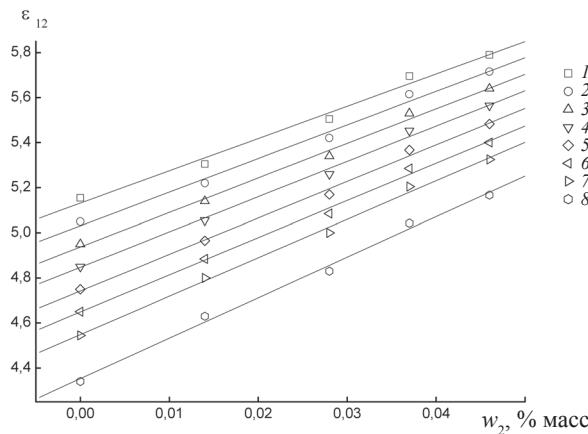


Рис. 2. Концентрационные зависимости диэлектрической проницаемости растворов П- γ -БГ в хлороформе при температурах t , $^{\circ}\text{C}$:

10 (1); 15 (2); 20 (3); 25 (4); 30 (5); 35 (6); 40 (7); 50 (8)

10–50 $^{\circ}\text{C}$ может быть обусловлено увеличением подвижности боковой цепи при повышении температуры, в результате чего отрицательный вклад дипольного момента боковой цепи в дипольный момент α -спирали уменьшается [20], и значение дипольного момента на остаток возрастает; следует иметь в виду также частичную десорбцию полярных молекул хлороформа, водородно-связанных с молекулами полипептида, с повышением температуры.

Диэлектрическая поляризация блок-сополимеров П- γ -БГ и ПММА. На рис. 3 представлены температурно-концентрационные зависимости диэлектрической проницаемости растворов блок-сополимеров СІ и СІІ в хлороформе. На рис. 4 приведены температурные зависимости инкрементов диэлектрической проницаемости для П- γ -БГ, блок-сополимеров СІ и СІІ (а) и для ПММА (б).

Зависимости $\frac{\partial \epsilon_{12}}{\partial w_2} \Big|_{x_2=0}$ от температуры имеют ли-

нейный характер, что свидетельствует о постоянстве стехиометрического состава компонентов раствора в указанном интервале температур. В табл. 3 приведены значения удельной и молярной ориентационной поляризации для компонента А в блок-сополимерах СІ, СІІ и для компонента В, вычисленные по формулам (2)–(6). На рис. 5 приведены отношения среднего квадрата дипольного момента к молекулярной массе для всех исследованных полимеров в зависимости от молярного содержания α -спирального компонента ПБГ в макромолекуле полимера.

Таблица 3

Температурные зависимости удельной и молярной диэлектрических поляризаций ПММА и блок-сополимеров СІ и СІІ

t , $^{\circ}\text{C}$	ПММА		СІ		СІІ	
	$p_{2\text{уд}}$	$P_{2\text{мол}}$	$p_{2\text{удСІ}}$	$P_{2\text{молСІ}}$	$p_{2\text{удСІІ}}$	$P_{2\text{молСІІ}}$
10	1,249	124,9	61,36	8221,6	21,88	2450,9
20	1,299	129,69	67,55	9051,5	23,84	2670,1
30	1,358	135,8	73,52	9852,1	26,33	2949,4
40	1,428	142,8	79,92	10708,6	28,51	3192,8
50	1,574	157,4	87,12	11673,9	30,32	3396,2

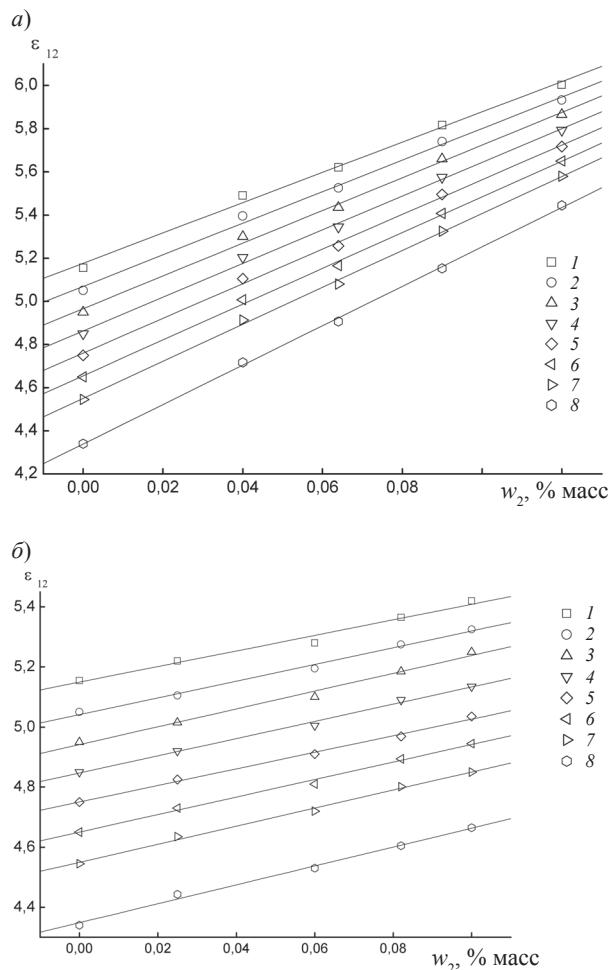
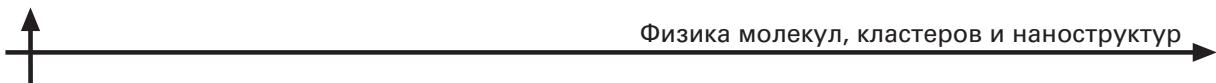


Рис. 3. Концентрационные зависимости диэлектрической проницаемости растворов блок-сополимеров СІ (а) и СІІ (б) в хлороформе при температурах t , $^{\circ}\text{C}$:



Как видно из формулы (2), использованной для определения этого отношения, величина μ_M^2/M характеризует диэлектрические свойства полимера в растворе и не требует детальных знаний о строении диэлектрически активных частиц, подчиняющихся закону бесконечного разбавления (ему подчиняются все исследованные в работе объекты).

Полученная зависимость μ_M^2/M от состава блок-сополимеров может быть использована как

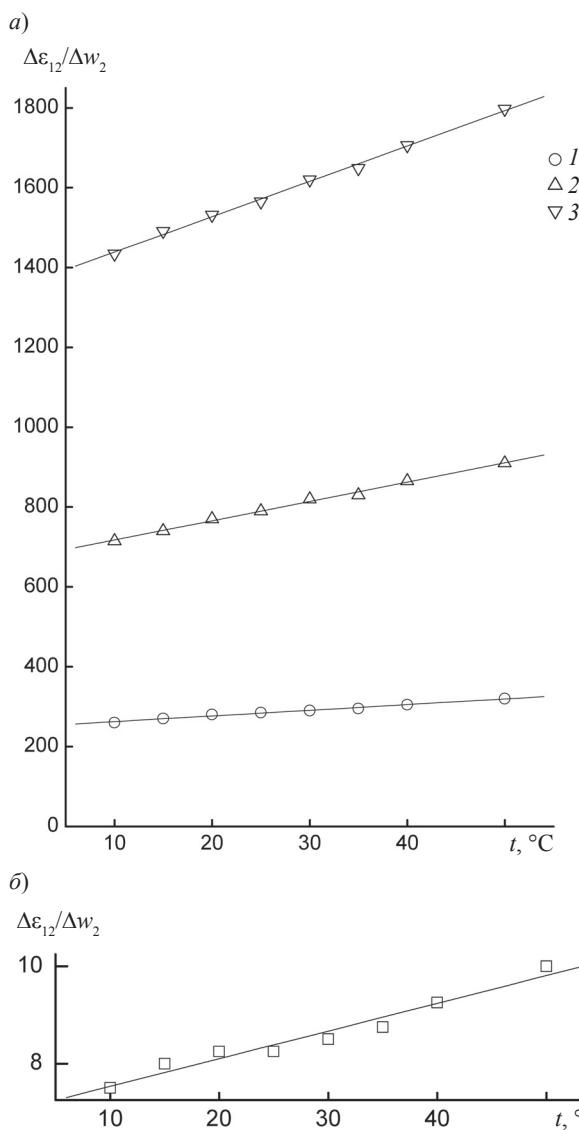


Рис. 4. Температурные зависимости инкрементов диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon/\Delta w_2$ для П- γ -БГ (1), блок-сополимеров СІ (2), СІІ (3) (а) и для ПММА (б)

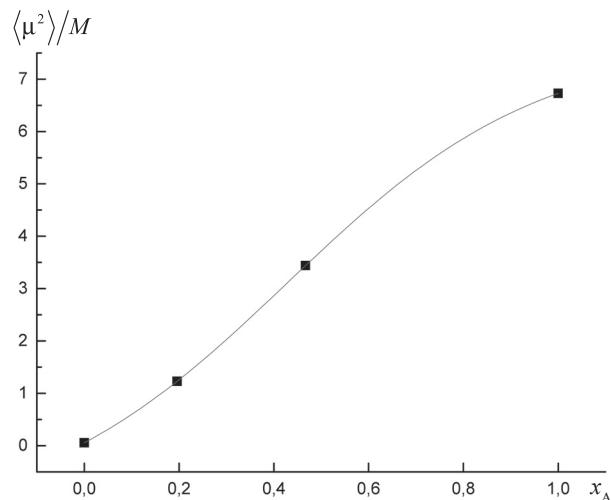
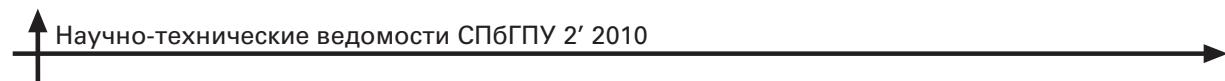


Рис. 5. Зависимость отношения среднеквадратичного дипольного момента макромолекулы к ее молекулярной массе от мольной доли П- γ -БГ в блок-сополимере

экспресс-метод определения состава блок-сополимера, синтезированного на основе П- γ -БГ и ПММА.

О конформации молекул блок-сополимеров АВА. По данным табл. 2 и 3 и формуле (1) были рассчитаны величины молярной поляризации, обусловленной компонентом А, в блок-сополимерах I и II. Эти величины представлены в табл. 4 наряду с величинами дипольных моментов на пептидный остаток, полученными при исследовании диэлектрических свойств гомополимера П- γ -БГ (см. табл. 2). В последних двух столбцах табл. 4 приведены расчетные величины степеней полимеризации для двух гипотетических гомополимеров П- γ -БГ, молекулы которых имеют ту же молярную поляризацию, что и α -спиральный компонент А в блок-сополимере. Как видно из табл. 4, величины n_{A1}^* и n_{AII}^* фактически постоянны в исследованной области температур и равны 76 и 51 соответственно. В величине n_A^* учтено через μ_{0A} взаимодействие пептидного остатка с растворителем. Кроме того, данные, полученные для блок-сополимеров АВА методом светорассеяния, свидетельствуют об отсутствии ассоциации этих макромолекул блок-сополимеров в хлороформе, поскольку величины их характеристической вязкости в хлороформе и диметилформамиде совпадают. Если принять за конформацию макромолекулы блок-сополимера АВА шарнирно-соединенные стержни, где роль шарнира выполняет клубок гибкоцепного



полимера, то можно оценить угол, образованный жесткими α -спиральными блоками А в макромолекуле АВА. Для степени полимеризации блоков П- γ -БГ, равной 114, степени полимеризации гипотетического гомополимера П- γ -БГ составляют $n_{\text{AI}}^* = 76$ и $n_{\text{AII}}^* = 51$, при этом углы между блоками А в сополимерах СI и СII оказываются равными $\alpha_{\text{I}} = 39^\circ$ и $\alpha_{\text{II}} = 26^\circ$ соответственно. Независимость n_{A}^* от температуры свидетельствует о том, что средняя конформация макромолекул блок-сополимеров I и II сохраняется неизменной в условиях бесконечного разбавления в исследованной области температур, причем статистические значения телесных углов α в конформациях блок-сополимеров с различным размером клубка ПММА и постоянной длиной блока А заметно (на $\sim 33\%$) различаются.

Исследование диэлектрических свойств блок-сополимеров типа АВА на основе П- γ -БГ (А) и ПММА (В) и их гомополимеров в чистом хлороформе показало следующее:

использование выражения для диэлектрической поляризации по Барриолю–Вайсбекеру при расчете инкремента диэлектрической поляризации в условиях бесконечного разбавления дает возможность получить величину дипольного момента пептидного остатка, совпадающую в пределах погрешности с теоретической;

отношение среднего квадрата дипольного момента растворенного вещества к его молекулярной массе является величиной, чувствительной к содержанию α -спирального полярного компо-

нента А в макромолекуле блок-сополимера, что может быть использовано для оценки состава блок-сополимеров;

оценка средней степени полимеризации гипотетического гомополимера П- γ -БГ, обладающего той же молярной диэлектрической поляризацией, что и компонент А в блок-сополимере, свидетельствует о сохранении в растворе в условиях бесконечного разбавления средней конформации макромолекулы блок-сополимера в виде шарнирно-соединенных стержней, причем роль шарнира играет клубок гибкоцепного полимера, а угол между стержнями зависит от молекулярной массы клубка.

Таблица 4

Температурная зависимость молярной диэлектрической поляризации компонента А в блок-сополимерах АВА

$t, ^\circ\text{C}$	$\mu_{0\text{A}}, \text{Д}$	$P_{2\text{ACI}}$	$P_{2\text{ACII}}$	$\mu_{2\text{ACI}}^2, \text{Д}$	$\mu_{2\text{ACII}}^2, \text{Д}$	n_{AI}^*	n_{AII}^*
10	3,25	17352,6	11754,6	806,65	546,2	76	52
20	3,48	19112,2	12832,0	919,80	617,5	76	51
30	3,72	20808,7	14203,6	1035,66	706,2	75	51
40	3,95	22623,2	15392,9	1163,10	791,4	75	51
50	4,20	24660,6	16351,3	1308,40	867,5	74	49

Примечание. Мольные доли компонентов А и В в блоксополимерах СI и СII составляли соответственно $x_{\text{A}} = 0,47$, $x_{\text{B}} = 0,53$ и $x_{\text{A}} = 0,2$, $x_{\text{B}} = 0,8$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жидкокристаллический порядок в полимерах [Текст]; под ред. А. Блюмштейна. – М.: Мир, 1981. – 687 с.
2. Платэ, Н.А. Гребнеобразные полимеры и жидкие кристаллы [Текст] / Н.А. Платэ., В.П. Шибаев. – М.: Химия, 1980. – 455 с.
3. Рудковская, Г.Д. Синтез и исследование блок-сополимеров, полученных на инициаторе поли- γ -бензилглутамате, содержащем внутренние связи N=N и S–S [Текст] / Г.Д. Рудковская, Л.А. Овсянникова, И.А. Барановская // Высокомолек. соед. Б. – 1981. – Т. 23. – № 11. – С. 842–846.
4. Власов, Г.П. Синтез блок-сополимеров, содержащих карбоцепные и полиаминокислотные
5. А.с. 1023233 СССР / Измерительная ячейка [Текст] / Т.П. Степанова, Л.Л. Бурштейн (СССР) // Бюл. изобр. 1983. – № 22. – С. 105.
6. Barriol, J. Contribution a la théorie de la constante dielectrique des solutions [Text] / J. Barriol, A. Weisbecker // C.R. Acad. Si., Paris. – 1964. – Vol. 259. – P. 2831.
7. Buckingham, A.D. A theory of the dielectric polarization of polar substances [Text] / A.D. Buckingham // Proc. Roy. Soc. A., Mathem. a. Phys. Sci. – 1956. – № 1213. – P. 235–239.



8. **Onsager, L.** Electrical moments of molecules in liquids [Text] / L. Onsager // J. Amer. Chem. Soc. – 1936. – Vol. 58. – № 8. – P. 1468–1475.
9. **Иоффе, Б.В.** Рефрактометрические методы химии [Текст] / Б.В. Иоффе. – Л.: Госхимиздат, 1960. – 384 с.
10. **Barelay, G.A.** The apparent dipole moments of the chlorinated methanes in the liquid, dissolved, and gaseous states [Text] / G.A. Barelay, R.J-W. Le Fevre // J. Chem. Soc. – 1950. – № 2. – P. 556.
11. **Михайлов, Г.П.** Исследование молекулярного взаимодействия в полимерах и их гидрированных мономерах по инфракрасным спектрам [Текст] / Г.П. Михайлов, А.Л. Смолянский // Оптика и спектроскопия. – 1963. – Т. 15. – Вып. 4. – С. 471–475.
12. **Михайлов, Г.П.** О температурной зависимости дипольного момента и конформационных переходах в полиметилметакрилате [Текст] / Г.П. Михайлов, Л.Л. Бурштейн, Т.П. Андреева // Высокомолек. соед. А. – 1967. – Т. 9. – № 12. – С. 2693.
13. **Kihara, H.** Dielectric study of polypeptides in solution. I. Aggregation of poly(γ -benzyl-*L*-glutamate) in ethylene dichloride [Text] / H. Kihara // Polym. J. – 1975. – Vol. 7. – № 3. – P. 406.
14. **Kihara, H.** Dielectrical properties of polypeptides in solution. II. Aggregation of poly(γ -benzyl-*L*-glutamate) in various helicogenic solvents [Text] / H. Kihara// Polym. J. – 1977. – Vol. 9. – № 5. – P. 443.
15. **Gupta, A.K.** Aggregation of poly(γ -benzyl-*L*-glutamate) in dioxane: molecular-weight dependence of critical concentration [Text] / A.K. Gupta, C. Strazielle, E. Marchal [et al.] // Biopolymers. – 1977. – Vol. 16. – № 5. – P. 1159.
16. **Gupta, A.K.** Effect of concentration on the aggregation of poly(γ -benzyl-*L*-glutamate) in dioxane: critical concentration and maximum length for linear head to tail aggregates [Text] / A.K. Gupta // Biopolymers. – 1976. – Vol. 15. – № 8. – P. 1543.
17. **Sharp, M.** Dielectric study of dilute solutions of poly- γ -benzyl-*L*-glutamate [Text] / M. Sharp // J. Chem. Soc. A. – 1970. – P. 1596.
18. **Wada, A.** Dielectric properties of polypeptide solutions. V. Molecular association of the α -helix in solution [Text] / A. Wada // J. Polymer Sci. – 1960. – Vol. 45. – № 1. – P. 145.
19. **Wada, A.** Chain regularity and dielectric properties of poly- α -amino acids in solution [Text] / A. Wada // Polyamino Acids, Polypeptides, Proteins. – Madison: 1962. – P. 131.
20. **Mitsui, J.** Side-chain interaction between the α -helices of poly- γ -benzyl-*L*- and *D*-glutamates [Text] / J. Mitsui, Y. Jitaka, M. Tsuboi // J. Mol. Biology. – 1967. – Vol. 24. – № 1. – P. 15.

Математическая физика

УДК 621.746.62

А.И. Цаплин, И.Л. Никулин

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ РЕЖИМОВ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЛОПАТОК ГАЗОТУРБИННЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

Развитие авиационного двигателестроения требует постоянного улучшения эксплуатационных свойств жаропрочных сплавов для создания лопаток газотурбинных двигателей, совершенствования и создания новых технологий для их производства [1].

Наиболее перспективными считаются лопатки с монокристаллической структурой, обладающие высокой длительной прочностью; их получают из жаропрочных никелевых сплавов прецизионным литьем в оболочковые формы; последние делают по выплавляемым моделям. Керамические формы, изготовленные по выплавляемым моделям и собранные в блоки (рис. 1), помещают в установку для высокоскоростной направленной кристаллизации с охлаждением форм в жидкокометаллическом теплоносителе – расплавленном алюминии. После заливки металла в формы и выдержки, необходимой для прекращения движения расплава, формы опускают с регулируемой скоростью 2–20 мм/мин из печи подогрева формы (ППФ) (поз. 5 на рис. 1) через графитовый экран 6 в расплавленный алюминий 8. Формирование лопатки начинается на затравке 4, где определяется пространственная ориентация ее кристаллографической структуры и создаются условия теплоотвода. При дальнейшем охлаждении формы кристалл растет через стартовый конус 3 к перу лопатки и замковой части 1.

Практика изготовления лопаток показала, что в отливках, получаемых данным способом, обнаруживается более десятка различных дефектов. Так например, при неудачно выбранных параметрах процесса охлаждения отливки возникают дефекты кристаллической структуры, приводящие к снижению выхода годной продукции; на настоящий момент он составляет всего 50–60 %.

Решение проблемы повышения качества лопаток, сокращение сроков и стоимости подготовки технологического процесса в значительной мере зависит от достоверности и эффективности автоматизированных методов проектирования теплофизических условий литья.

Целью настоящей работы является разработка методики математического моделирования теплофизики процесса, позволяющей на основе вычислительного эксперимента прогнозировать нестационарные режимы направленной кристал-

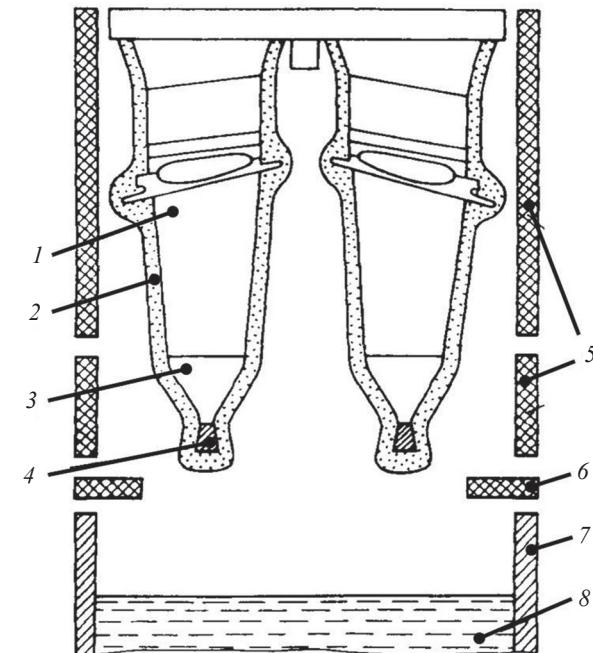


Рис. 1. Схема теплового узла и литейного блока для получения монокристаллических лопаток:
1 – лопатка; 2 – литевая форма; 3 – стартовый конус; 4 – затравка;
5 – верхний и нижний нагреватели ППФ; 6 – графитовый экран;
7 – стена ванны; 8 – расплавленный теплоноситель



лизации, обеспечивающие повышение выхода годной продукции.

Монокристаллической отливкой называют изделие, «выросшее» из одного зародыша и не имеющее границ зерен. При этом в монокристаллическом изделии имеются включения различных фаз, когерентно связанных с матрицей.

За критерии качества, характеризующие процесс направленной кристаллизации, приняты осевой температурный градиент на фронте кристаллизации G (К/см) (рис. 2) и скорость перемещения фронта кристаллизации u (мм/мин). Произведение этих величин Gu определяет тип формирующейся структуры монокристалла. Кроме того, оптимальные условия для получения монокристаллической отливки создаются в том случае, когда в установке обеспечивается плоский в макроскопическом масштабе фронт роста монокристалла и когда его положение относительно нагревателя остается неизменным при кристаллизации.

Изгиб фронта кристаллизации приводит к отклонению кристаллографических осей монокристалла от вертикальной оси отливки и характеризуется углом разориентации θ (см. рис. 2). Допустимый интервал значений угла θ составляет от 0 до 3 град.

Для оценки влияния технологии процесса на критерии качества нами разработана математи-

ческая модель теплофизики формирования монокристаллической отливки, учитывающая следующие факторы:

неоднородность теплофизических характеристик материалов жаропрочного сплава, керамической формы и жидкокометаллического охладителя;

анизотропию теплопроводности в затвердевшем монокристалле;

конвекцию в жидкой фазе отливки, захватывающей часть двухфазной зоны, а также в расплавленном охладителе;

радиационный механизм теплопередачи между оболочкой формой и ППФ, а также в усадочном зазоре.

В расчетную область модели включены отливка, литейная форма и часть питателя отливки. Математическая формулировка задачи в цилиндрической системе координат включает уравнение переноса энергии

$$\rho c_{\text{эфф}} \frac{\partial T}{\partial \tau} = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda^{(r)} r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda^{(z)} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right), \quad (1)$$

где ρ – плотность материала; $\lambda^{(r)}$, $\lambda^{(z)}$ – соответственно коэффициенты теплопроводности затвердевшего монокристалла в радиальном (r) и аксиальном (z) направлениях; $c_{\text{эфф}}$ – эффективная теплоемкость, которая учитывает квазиравновесное выделение теплоты кристаллизации L в интервале температур солидуса T_s и ликвидуса T_L и рассчитывается по соотношению

$$c_{\text{эфф}}(T) = \begin{cases} c(T), & T < T_s, T > T_L; \\ c(T) + \frac{L}{T_L - T_s}, & T_s \leq T \leq T_L. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь $c(T)$ – удельная теплоемкость.

Краевые условия для получения единственного решения уравнения (1) включают начальное условие

$$T(r, z)|_{\tau=0} = \Theta(r, z), \quad (3)$$

где $\Theta(r, z)$ – распределение температуры в начальный момент времени, а также граничные условия, сформулированные для расчетной области, разбитой на зоны с различными видами теплообмена.

Верхняя граница питателя отливки и прилегающая к ней форма считаются изотермическими, так как постоянно находятся в печи подогрева формы:

$$T(r, H_{\phi} + H_o + H_{\text{пр}}) = T_{\text{печ}}, \quad (4)$$

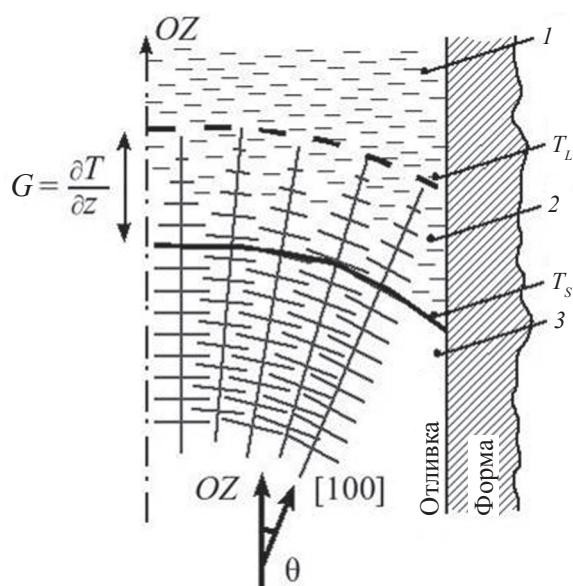
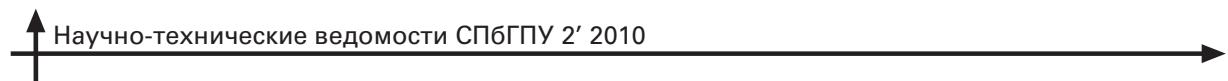


Рис. 2. Определение угла разориентации θ и градиента температуры G на фронте кристаллизации;
 T_s , T_L – температуры солидуса и ликвидуса; 1, 2, 3 – зоны с различными видами теплообмена



где H_ϕ , H_o , H_{np} – величины высот дна формы, отливки и прибыльной части, входящей в расчетную область; T_{pech} – температура печи.

Внутри печей боковые поверхности формы находятся в условиях радиационного теплообмена с нагревателями 5:

$$-\lambda_\phi \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_\phi} = \varepsilon_2^* \sigma_0 (T_\phi^4(R_\phi, z) - T_{pech}^4(z)), \quad (5)$$

где R_ϕ , λ_ϕ – внешний радиус и коэффициент теплопроводности керамической формы, T_ϕ – температура на поверхности формы, ε_2^* – приведенная степень черноты в зазоре между формой и печами, σ_0 – постоянная Стефана–Больцмана.

Экран 6, изготовленный из графитового войлока с низким коэффициентом теплопроводности, обеспечивает адиабатическую границу:

$$-\lambda_\phi \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_\phi} = 0. \quad (6)$$

В области между графитовым экраном и жидкокометаллическим охладителем форма находится в состоянии радиационного теплообмена с графитовым экраном 6, стенкой ванны и тонким слоем шлака, покрывающим поверхность жидкокометаллического охладителя 8:

$$-\lambda_\phi \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_\phi} = \sigma_0 \sum_j \varepsilon_j^* \phi_j (T_\phi^4(R_\phi, z) - T_j^4), \quad (7)$$

где ε_j^* , ϕ_j , T_j – приведенная степень черноты, локальный угловой коэффициент излучения и абсолютная температура j -й поверхности.

Теплоотвод с поверхности формы, погруженной в жидкокометаллический охладитель, осуществляется как за счет теплопроводности, так и за счет конвективных потоков расплава охладителя вблизи оболочковой формы:

$$-\lambda_\phi \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_\phi} = \alpha_{kon} (T_\phi(R_\phi, z) - T_{oxhl}), \quad (8)$$

где T_{oxhl} – температура жидкокометаллического охладителя, α_{kon} – коэффициент теплоотдачи путем конвекции, определяемый через число Нуссельта $Nu = \alpha_{kon} h_{oxhl} / \lambda_{oxhl}$ для ламинарного режима [2]; число Нуссельта для этого режима выражается как

$$Nu = 0,78(Gr_{oxhl} \cdot Pr_{oxhl})^{0,25} (Pr_{oxhl} / Pr_\phi)^{0,25}, \quad (9)$$

где h_{oxhl} – высота охладителя над нижним краем формы, λ_{oxhl} – коэффициент теплопроводности

жидкокометаллического охладителя, Pr_{oxhl} , Pr_ϕ – числа Прандтля при температурах охладителя и поверхности формы соответственно; Gr_{oxhl} – число Грасгофа при температуре охладителя;

при турбулентном режиме указанное число следует выражению

$$Nu = 0,15(Gr_{oxhl} \cdot Pr_{oxhl})^{0,33} (Pr_{oxhl} / Pr_\phi)^{0,25}. \quad (10)$$

Нижняя грань формы погружена в жидкокометаллический охладитель, и здесь теплоотдача происходит только за счет теплопроводности:

$$\lambda_\phi \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_\phi = \lambda_{oxhl} \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{oxhl}. \quad (11)$$

Ось симметрии представляет собой адиабатическую границу:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} = 0. \quad (12)$$

На внутренней поверхности оболочковой формы плотности теплового потока в расплаве и форме, а также температуры соприкасающихся поверхностей сплава (T_o) и формы (T_ϕ) равны:

$$\begin{aligned} \lambda_o \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_o &= \lambda_\phi \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_\phi; \\ T_o(R_o, z) &= T_\phi(R_o, z), \end{aligned} \quad (13)$$

где λ_o – коэффициент теплопроводности сплава, R_o – радиус отливки.

В усадочном зазоре в условиях вакуума имеет место только радиационный теплообмен:

$$\begin{aligned} -\lambda_o \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_o} &= -\lambda_\phi \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_o} = \\ &= \varepsilon_1^* \sigma_0 (T_o^4(R, z) - T_\phi^4(R, z)). \end{aligned} \quad (14)$$

Нижняя торцевая поверхность отливки прижата к форме в общем случае неплотно:

$$-\lambda_o \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_o = -\lambda_\phi \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_\phi = \frac{(T_o - T_\phi)}{\rho_{kont}}, \quad (15)$$

где ρ_{kont} – контактное термическое сопротивление между отливкой и формой.

К уравнениям (1)–(8) следует добавить кинематическое соотношение для граничных условий:

$$h_{oxhl} = \int_0^\tau w(\tau^*) d\tau^*, \quad (16)$$



где $w(\tau^*)$ – скорость погружения формы в жидкокометаллический охладитель, τ – реальное время, τ^* – переменная интегрирования.

Математическая модель реализована в пакете прикладных программ, написанных авторами на языке FORTRAN 95. Конечно-разностный аналог уравнения переноса тепловой энергии (1) решался на регулярных сгущающихся сетках [3]. В работе [4] показано, что модель адекватно описывает процесс роста монокристалла из никелевого жаропрочного сплава ЖС36 в условиях высокоскоростной направленной кристаллизации; для установленного теплобмена погрешность расчетов не превышает 3 %.

На рис. 3 представлены расчетные температурные поля и распределение плотности тепловых потоков.

Для изучения отклика критериев качества на динамическое изменение параметров технологического процесса проведены вычислительные эксперименты, в которых ступенчато менялись скорость выдвижения, температура печи и толщина боковой стенки формы. Ступенчатое изменение одного из технологических параметров происходило в момент времени, когда решение краевой задачи относительно критериев качества становилось квазистационарным.

На рис. 4 приведены зависимости угла отклонения θ и градиента температуры G , рассчитанные для трех режимов. Режим охлаждения (кривая 3) состоял из двух этапов: на первом скорость выдвижения была равна $w_1 = 5$ мм/мин, на втором она ступенчато уменьшалась до $w_2 = 2$ мм/мин. Для сравнения на графиках приведены зависимости, соответствующие режимам охлаждения с постоянными скоростями выдвижения $w_1 = 5$ и $w_2 = 2$ мм/мин (кривые 1 и 2).

Видно, что в режиме 3 выбранные критерии качества постепенно переходят от квазистационарных значений, реализующихся при постоянной скорости 5 мм/мин, к значениям, характерным для скорости 2 мм/мин. Следует отметить, что времена установления для внутренних параметров одинаковы.

При ступенчатом изменении температуры ППФ и толщины стенки формы критерии качества ведут себя аналогичным образом.

На основании результатов вычислительных экспериментов можно заключить, что перестроения температурного поля при нестационарном процессе охлаждения ограничены квазистационарными

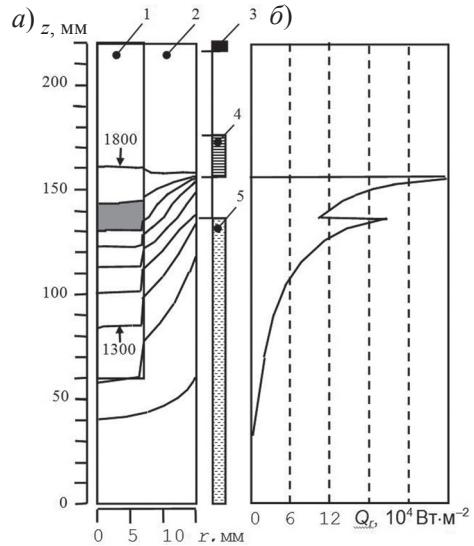


Рис. 3. Температурные поля в отливке и форме (а) и распределение плотности теплового потока по высоте формы (б)

1 – отливка; 2 – форма; 3 – печь; 4 – графитовый экран; 5 – жидкокометаллический охладитель

Изотермы построены с интервалом 100 К, тонированием выделена двухфазная зона

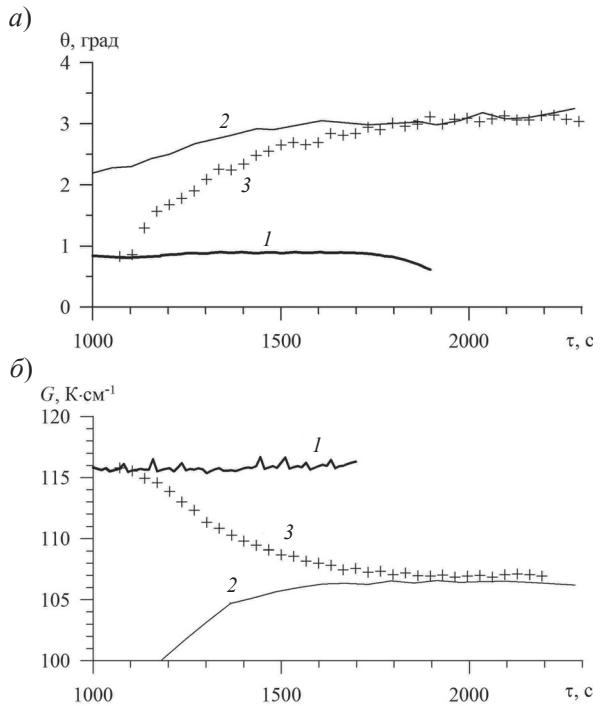
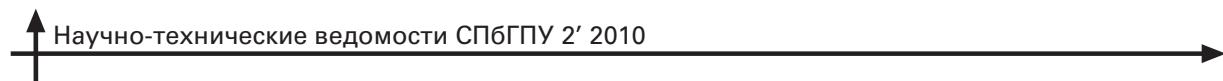


Рис. 4. Изменение угла разориентации θ (а) и аксиального градиента температуры G на фронте кристаллизации (б) в процессе затвердевания при различных скоростях выдвижения формы из печи:

1, 2 – постоянные скорости $w = 5$ и 2 мм/мин; 3 – ступенчатое снижение скорости от 5 до 2 мм/мин



решениями, которые реализуются в режимах охлаждения с постоянными скоростями выдвижения формы.

Предварительно рассчитываются значения угла отклонения θ , градиента температуры G при квазистационарных режимах охлаждения для различных частей системы отливка-форма. Таким образом, получается набор предельных значений искомых параметров.

При известных временах перестроения параметров между предельными значениями в результате расчета выбираются моменты времени для изменения скорости выдвижения и температуры

печи, которые должны обеспечить удовлетворительный режим затвердевания монокристаллической отливки.

Результаты расчетного анализа применялись для назначения технологических режимов формирования монокристаллических лопаток газотурбинных двигателей и приводили к повышенному выходу годной продукции.

Таким образом, применение разработанной математической модели оказывается полезным для ускоренного проектирования динамических режимов направленной кристаллизации монокристаллических лопаток.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каблов, Е.Н. Литые лопатки газотурбинных двигателей (сплавы, технология, покрытия) [Текст] / Е.Н. Каблов. – М.: «МИСИС», 2001. – 632 с.
2. Кутателадзе, С.С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление [Текст]: справ. пос. / С.С. Кутателадзе. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 367 с.
3. Цаплин, А.И. Теплофизика в металлургии [Текст]: учеб. пос. / А.И. Цаплин. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2008. – 230 с.
4. Никулин, И.Л. Математическое моделирование роста монокристалла в промышленных условиях [Текст] / И.Л. Никулин, А.И. Цаплин, А.С. Коряковцев // Вестн. Перм. гос. техн. ун-та. – 2005. – № 1. – С. 3–8.

УДК 517.988

А.Р. Абдуллаев, Э.В. Плехова, А.А. Савочкина

РАЗРЕШИМОСТЬ КВАЗИЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ С МОНОТОННЫМ ОПЕРАТОРОМ

Рассмотрим уравнение

$$Lx = Fx \quad (1)$$

с линейным ограниченным оператором $L: X \rightarrow Y$ и вполне непрерывным оператором $F: X \rightarrow Y$, где X, Y – банаховы пространства.

В случае обратимости оператора L вопрос о разрешимости уравнения (1) эффективно решается исследованием эквивалентного уравнения

$$x = L^{-1}Fx$$

с применением теорем о неподвижных точках. В ситуации, когда оператор L не обратим, квазилинейное уравнение (1) принято называть резонансным [1, 2].

Интерес к операторному уравнению в резонансном случае обусловлен тем, что в представленном виде (1) можно рассматривать многие классы периодических краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений и краевые задачи для уравнений с частными производными в критических случаях. Уравнение (1) в случае резонанса активно изучалось многими авторами (см. библиографию к работам [3–8]). При этом основные методы исследования на разрешимость уравнения (1) используют предварительное применение преобразования Ляпунова – Шмидта [9, с. 18], и проблема разрешимости уравнения (1) сводится к вопросу о существовании неподвижной точки вспомогательного оператора. Применение теорем



о неподвижных точках позволяют получить достаточные признаки разрешимости уравнения (1).

В предлагаемой работе получены новые достаточные условия разрешимости уравнения (1) в случае, когда вспомогательный оператор, связанный с уравнением (1), является монотонным в смысле скалярного произведения [10, с. 79]. Эффективность основного утверждения работы показана на примере периодической задачи для скалярного обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка.

Вспомогательные утверждения и конструкции

Для удобства чтения содержание этого параграфа разделено на пункты.

1. Символом $V(r)$ обозначим замкнутый шар радиуса $r > 0$ с центром в нулевом элементе. Для непрерывного оператора $F: X \rightarrow Y$ рассмотрим функциональную характеристику $b_F(r) = \sup_{\|x\| \leq r} \|Fx\|$.

В случае линейного ограниченного оператора $L: X \rightarrow Y$ имеет место равенство $b_L(r) = \|L\|r$. Для нелинейного оператора F удовлетворяющего условию $\|Fx\| \leq a + b\|x\|$, $x \in X$ с некоторыми неотрицательными константами a и b , справедлива оценка $b_F(r) \leq a + br$. Если $b_F(r) < \infty$, то справедливо вложение $F(V(r)) \subset V(r_1)$, где $r_1 = b_F(r)$. Отметим, что такое вложение играет ключевую роль при использовании теорем о неподвижных точках.

2. Пусть H – действительное гильбертово пространство со скалярным произведением (\cdot, \cdot) , Z – банахово пространство, и $\Phi: Z \times H \rightarrow H$ – непрерывный оператор. Рассмотрим уравнение

$$\Phi(z, u) = \theta \quad (2)$$

и введем в рассмотрение оператор $\Phi_0: Z \rightarrow H$, $\Phi_0 z = \Phi_0(z, \theta)$.

В следующем вспомогательном утверждении, предполагается сильная монотонность оператора $\Phi(\cdot, \cdot)$ по второму аргументу.

Лемма 1. Пусть существует такая положительная константа $c > 0$, что для любых пар $u, v \in H$ и произвольного $z \in Z$ выполнено неравенство

$$(\Phi(z, u) - \Phi(z, v), u - v) \geq c\|u - v\|^2. \quad (3)$$

Тогда существует такой непрерывный оператор $T: Z \rightarrow H$, что:

1) для любого $z \in Z$ $u = Tz$ есть решение уравнения (2), то есть $\Phi(z, Tz) = \theta$;

$$2) b_T(r) \leq \frac{1}{c} b_{\Phi_0}(r).$$

Доказательство. Произвольно зафиксируем $z \in Z$. Оператор $\Phi(z, \cdot)$ является строго монотонным [11, с. 459]. Пусть λ – некоторое число, удовлетворяющее условию

$$\lambda > \frac{1}{c} \|\Phi(z, \theta)\|.$$

Для любого $u \in H$, $\|u\| > \lambda$ справедливо неравенство

$$\begin{aligned} (\Phi(z, u), u) &= (\Phi(z, u) - \Phi(z, \theta), u - \theta) + \\ &+ (\Phi(z, \theta), u) \geq (c\|u\| - \|\Phi(z, \theta)\|)\|u\| > 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Таким образом, оператор $\Phi(z, \cdot)$ удовлетворяет условиям теоремы о существовании единственного решения уравнения первого рода со строго монотонным оператором [11, с. 468], согласно которой уравнение (2) имеет единственное решение $u \in H$ при каждом фиксированном $z \in Z$. Иными словами, существует оператор $T: Z \rightarrow H$, который каждому $z \in Z$ ставит в соответствие $u \in H$ – решение уравнения (2), то есть для любого $z \in Z$ выполнено равенство $\Phi(z, Tz) = \theta$.

Если положить $u_1 = Tz_1$, $u_0 = Tz_0$, $z_0, z_1 \in Z$, то в силу условия (3) справедливо соотношение

$$\begin{aligned} \|Tz_1 - Tz_0\| &\leq \frac{1}{c} \|\Phi(z_1, Tz_1) - \Phi(z_1, Tz_0)\| = \\ &= \frac{1}{c} \|\Phi(z_1, Tz_0)\| = \frac{1}{c} \|\Phi(z_0, Tz_0) - \Phi(z_1, Tz_0)\|. \end{aligned}$$

Из последнего неравенства следует непрерывность оператора T .

Полагая в неравенстве (4) $u = Tz$, получим

$$0 = (\Phi(z, Tz), Tz) \geq (c\|Tz\| - \|\Phi(z, \theta)\|)\|Tz\|.$$

Таким образом, $\|Tz\| \leq \frac{\|\Phi(z, \theta)\|}{c}$.

Переходя в последнем неравенстве к супремуму по всем $z \in V(r)$, получим оценку для $b_T(r)$:

$$\begin{aligned} b_T(r) &= \sup_{\|z\| \leq r} \|Tz\| \leq \frac{1}{c} \left(\sup_{\|z\| \leq r} \|\Phi(z, \theta)\| \right) = \\ &= \frac{1}{c} \left(\sup_{\|z\| \leq r} \|\Phi_0 z\| \right) = \frac{1}{c} b_{\Phi_0}(r). \end{aligned}$$

Лемма доказана.

Отметим, что в случае уравнения $\Phi(u) - z = \theta$ с оператором $\Phi: H \rightarrow H$ утверждение леммы 1 совпадает с широко известной теоремой о существовании обратного оператора [10, с. 97].

3. В этом пункте приведем описание схемы исследования на разрешимость уравнения (1). Пусть $L: X \rightarrow Y$ – линейный ограниченный оператор с дополняемыми ядром $\text{Ker } L$ и образом $R(L)$, т. е. существуют такие замкнутые подпространства $X_0 \subset X$ и $Y_0 \subset Y$, что

$$X = X_0 \oplus \text{Ker } L, \quad Y = R(L) \oplus Y_0.$$

Пусть $P: X \rightarrow X$ – проектор на $\text{Ker } L$, и $K_P: R(L) \rightarrow X$ – обобщенно обратный к оператору L , ассоциированный с проектором P [12]. Пусть $Q: Y \rightarrow Y$ – проектор на $R(L)$, Q^c – дополнительный проектор. Определим оператор $Q_0^c: Y \rightarrow Y_0$ равенством $Q_0^c y = Q^c y, y \in Y$.

Вместе с уравнением (1) рассмотрим вспомогательное уравнение

$$x = K_P F(x + Tx). \quad (5)$$

Если будет установлено существование такого оператора $T: X \rightarrow X$, что $T(X) \subset \text{Ker } L$ и $F(x + Tx) \in R(L)$ для любого $x \in X$, то из разрешимости уравнения (5) будет следовать разрешимость уравнения (1).

Для доказательства существования требуемого оператора T рассмотрим уравнение

$$Q_0^c F(x + u) = 0 \quad (6)$$

и докажем, что при каждом фиксированном $u \in \text{Ker } L$ существует единственное решение $x = x(u)$ уравнения (6). Для реализации этого этапа применяется лемма 1.

Теорема существования

Основной результат работы будет доказан в следующих предположениях:

a1) ядро и образ линейного ограниченного оператора L дополнены, т. е. $X = X_0 \oplus \text{Ker } L$, $Y = R(L) \oplus Y_0$;

a2) подпространство Y_0 нетривиально и изоморфно некоторому подпространству $\text{Ker } L$;

a3) ядро $\text{Ker } L = H_0$ оператора L является гильбертовым пространством со скалярным произведением $(\cdot, \cdot)_{H_0}$, причем $\|x\|_{H_0} = \|x\|_X$;

a4) оператор $F: X \rightarrow Y$ является вполне непрерывным.

В значительной части работ, посвященных исследованию уравнения (1) в случае резонанса, оператор L предполагается фредгольмовым или нетеровым неотрицательного индекса. Для таких классов операторов выполнены условия a1) и a2), причем $\dim \text{Ker } L < \infty$. В данной работе не предполагается конечномерность ядра линейного оператора. С другой стороны, сформулированные условия исключают случай, когда оператор L имеет ненулевое ядро и сюръективен. По классификации, предложенной в работе [13], такой случай резонанса относится к устойчивому, и в данной работе не рассматривается.

При выполнении условия a2) существует инъективное отображение $J: Y_0 \rightarrow \text{Ker } L$, которое далее предполагается выбранным.

Теорема 1. Пусть существует такая константа $c > 0$, что неравенство

$$(JQ_0^c(F(x + u) - F(x + v)), u - v)_{H_0} \geq c \|u - v\|_{H_0}^2 \quad (7)$$

справедливо для всех $x \in X$ и произвольных $u, v \in H_0$.

Тогда существует такой непрерывный оператор $T: X \rightarrow H_0$, что для любого $x \in X$ имеет место включение $F(x + Tx) \in R(L)$ и справедлива оценка

$$b_T(r) = \sup_{\|x\| \leq r} \|Tx\|_{H_0} \leq \frac{1}{c} \|JQ_0^c\| b_F(r). \quad (8)$$

Доказательство. Оператор $\Phi: X \times H_0 \rightarrow H_0$, определенный равенством

$$\Phi(x, u) = JQ_0^c F(x + u),$$

удовлетворяет условиям леммы 1. Поэтому существует непрерывный оператор $T: X \rightarrow H_0$ такой, что

$$JQ_0^c F(x + Tx) = 0.$$

Так как оператор J инъективен, то

$$Q_0^c F(x + Tx) = 0$$

для любого $x \in X$. Это означает справедливость включения $F(x + Tx) \in R(L)$ для любого $x \in X$. С использованием утверждения 2) леммы 1, имеем:

$$b_T(r) \leq \frac{1}{c} \left(\sup_{\|x\| \leq r} \|JQ_0^c F(x)\| \right) \leq \frac{1}{c} \|JQ_0^c\| b_F(r).$$

Теорема доказана.



Теорема 2. Пусть выполнены условия:

1) существует такая константа $c > 0$, что неравенство

$$\left(JQ_0^c (F(x+u) - F(x+v)), u - v \right)_{H_0} \geq c \|u - v\|_{H_0}^2$$

выполнено для всех $x \in X$ и произвольных $u, v \in H_0$;

2) существуют константы $a \geq 0, b > 0$ такие, что выполнено неравенство $\|Fx\| \leq a + b\|x\|$, для всех $x \in X$;

$$3) b\|K_P\| \left(1 + \frac{b\|JQ_0^c\|}{c} \right) < 1.$$

Тогда уравнение (1) имеет хотя бы одно решение.

Доказательство. Согласно теореме 1, условие 1) теоремы 2 гарантирует существование непрерывного оператора $T: X \rightarrow H_0$, обладающего свойством $F(x+Tx) \in R(L)$, для любого $x \in X$. При этом справедлива оценка

$$b_T(r) \leq \frac{1}{c} \|JQ_0^c\| b_F(r) \leq \frac{1}{c} (a + br) \|JQ_0^c\|.$$

Рассмотрим операторное уравнение

$$x = K_P F_0 x, \quad (9)$$

где K_P – обобщенный обратный к оператору L , а оператор $F_0: X \rightarrow R(L)$ определен равенством $F_0 x = F(x+Tx)$.

Оператор F_0 обладает свойством полной непрерывности как произведение линейного ограниченного оператора K_P , вполне непрерывного оператора F и непрерывного оператора $(I+T)$.

Переходя в неравенстве

$$\|F(x+Tx)\| \leq a + b\|x+Tx\|$$

к супремуму по всем $x \in V(r)$, получим оценку:

$$\begin{aligned} b_{F_0}(r) &= \sup_{\|x\| \leq r} \|F(x+Tx)\| \leq a + b(r + b_T(r)) \leq \\ &\leq a + b \left(r + \frac{\|JQ_0^c\|}{c} (a + br) \right). \end{aligned}$$

В силу условия 3) неравенство

$$\|K_P\| (a + b(r + b_T(r))) < r$$

имеет положительное решение r_0 . Это означает справедливость вложения

$$K_P F_0(V(r_0)) \subset V(r_0).$$

Таким образом, выполнены условия теоремы Шаудера, согласно которой уравнение (9), а вместе с ним и уравнение (1) имеют хотя бы одно решение.

Приложение

Приведем пример, показывающий эффективность применения теоремы 2.

Рассмотрим периодическую краевую задачу для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка

$$\begin{cases} \ddot{x}(t) = f(t, x(t)), & t \in [0, T]; \\ x(0) = x(T), \quad \dot{x}(0) = \dot{x}(T), \end{cases} \quad (10)$$

где функция $f: [0, T] \times \mathbb{R}^1 \rightarrow \mathbb{R}^1$ удовлетворяет условию Каратеодори.

На пространстве $W = W_2[0, T]$ функций $x: [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^1$, имеющих абсолютно непрерывную производную, таких, что $\dot{x} \in L_2 = L_2[0, T]$, норму определим равенством

$$\|x\|_W = |x(0)| + |\dot{x}(0)| + \|\dot{x}\|_{L_2},$$

где L_2 – пространство суммируемых с квадратом функций $x: [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^1$. Под решением задачи будем понимать функцию $x \in W$, почти всюду удовлетворяющую дифференциальному уравнению и периодическим краевым условиям задачи (10).

Пусть $X = \{x \in W / x(0) = x(T), \dot{x}(0) = \dot{x}(T)\}$, $Y = L_2$. Определим операторы $L, F: X \rightarrow Y$ равенствами

$$Lx = \ddot{x}, \quad (Fx)(t) = f(t, x(t)). \quad (11)$$

Это позволяет представить краевую задачу (10) в виде операторного уравнения (1).

Для линейного оператора L имеем:

$$\text{Ker } L = \{x \in X / x(t) = \text{const}\},$$

$$R(L) = \left\{ y \in Y / \int_0^T y(s) ds = 0 \right\}.$$



Таким образом, для рассматриваемого примера оператор L является фредгольмовым с одномерным ядром.

Условия разрешимости краевой задачи (10) сформулируем в виде следующей теоремы существования.

Теорема 3. Пусть выполнены условия:

1) существует такая константа $c_1 > 0$, что справедливо неравенство

$$(f(t, u_1) - f(t, u_2))(u_1 - u_2) \geq c_1(u_1 - u_2)^2$$

для любого $t \in [0; T]$ и произвольных $u_1, u_2 \in R^1$;

2) существуют такие константы $a_1 \geq 0, b_1 > 0, b_1 > 0$, что неравенство

$$|f(t, u)| \leq a_1 + b_1 |u|$$

выполнено для любых $t \in [0; T], u \in R^1$;

$$3) b_1 \gamma (\sqrt{T} + b_1 \gamma / c_1) (1 + \sqrt{T/3}) < 1, \text{ где}$$

$$\gamma = \max \{1, T, \sqrt{T/3}\}.$$

Тогда краевая задача (10) имеет хотя бы одно решение.

Доказательство. Если проектор $P : X \rightarrow X$ на $\text{Ker } L$ определить равенством $Px = x(0)$, то обобщенный обратный к L оператор, ассоциированный с данным проектором, будет действовать по правилу

$$(K_P y)(t) = \frac{t}{T} \int_0^T s y(s) ds + \int_0^t (t-s) y(s) ds.$$

Известно [2], что для нормы оператора K_P справедлива оценка

$$\|K_P\| \leq 1 + \sqrt{T/3}.$$

Непосредственная проверка показывает, что оператор, определенный равенством

$$(Qy)(t) = y(t) - \frac{1}{T} \int_0^T y(s) ds,$$

является проектором на $R(L)$, тогда оператор $Q_0^C : Y \rightarrow Y_0$ имеет вид

$$(Q_0^C y)(t) = \frac{1}{T} \int_0^T y(s) ds.$$

Изоморфизм между одномерными подпространствами Y_0 и $\text{Ker } L$ определим равенством $Jy = y$. Можно показать, что $\|JQ_0^C\| = \frac{1}{\sqrt{T}}$.

Будем рассматривать одномерное пространство $\text{Ker } L$, состоящее из тождественных констант, как пространство со скалярным произведением

$$(u_1, u_2) = C_1 C_2,$$

где $u_1(t) \equiv C_1, u_2(t) \equiv C_2$.

Из условия 1 теоремы следует выполнение условия 1 теоремы 2 с константой $c = c_1$. Условие 2 обеспечивает не более чем линейный рост оператора F , т. е. выполнение второго условия теоремы 2 с константами $a = a_1 \sqrt{T}$ и $b = b_1 \gamma$. При выполнении условия 3 теоремы справедливо соответствующее условие теоремы 2.

Таким образом, все условия теоремы 2 выполнены, поэтому операторное уравнение (1) с операторами L, F , определенными равенствами (11), имеет хотя бы одно решение. Для краевой задачи (10) это означает существование хотя бы одного решения в пространстве W .

Теорема доказана.

Полученный результат уточняет, в частности, теорему 3 работы [2].

В заключение отметим, что применение теоремы существования (теорема 2) оказывается гораздо эффективнее традиционных подходов, применяемых в теории краевых задач для уравнений в частных производных.

Работа выполнена при финансовой поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России», регистрационный номер проекта 2.1.2/6150.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Martelli, M. A note on boundary value problems at resonance [Text] / M. Martelli // Atti. Accad. Naz. Lincei. Rend. Cl. Sci. Fis. Mat. Natur. – 1978. – Vol. 64. – № 4. – P. 356–362.
2. Абдуллаев, А.Р. Об одной схеме исследования на разрешимость резонансных краевых задач [Текст] / А.Р. Абдуллаев, А.Б. Бурмистрова // Изв. вузов. Математика. – 1996. – № 11. – С. 14–22.
3. Bonheure, D. Problems at resonance for equations with periodic nonlinearities / D. Bonheure, C. Fabry, D. Ruiz // Nonlinear Analysis. – 2003. – № 55. – P. 557–581.



4. **Fucik, C.** Ranges of nonlinear operators [Text] : monography / C. Fucik. – Prague: UCP, 1977. – 133 p.
5. **Furi, M.** Contributions to the spectral theory for nonlinear operators in Banach spaces [Text] / M. Furi, M. Martelli, A. Vignoli // Ann. Math. Pura Appl. – 1978. – Vol. 118 – P. 229–294.
6. **Mawhin, J.** Landesman–Lazer's type problems for nonlinear equations [Text] / J. Mawhin // Conf. Sem. Math. Univ. Bary. – Bary, 1977. – № 147. – 50 p.
7. **Nirenberg, L.** Variational and topological methods in nonlinear problems [Text] / L. Nirenberg // Bull. Amer. Math. Soc. – 1981. – Vol. 4 – № 3. – P. 267–302.
8. **Tarafdar, E.** On the existence of solutions of the equation $Lx = Nx$ and a coincidence degree theory [Text] / E. Tarafdar, S. K. Teo // J. Austral. Math. Soc. – 1979. – Ser. A. – Vol. 28. – P. 139–173.
9. **Вайнберг, М.М.** Теория ветвления решений нелинейных уравнений [Текст] : монография / М.М. Вайнберг, В.А. Треногин. – М.: Наука, 1969. – 529 с.
10. **Гаевский, Х.** Нелинейные операторные уравнения и операторные дифференциальные уравнения [Текст] : монография / Х. Гаевский, К. Грекер, К. Захариас. – М.: Мир, 1978. – 336 с.
11. **Треногин, В.А.** Функциональный анализ [Текст] : монография / В.А. Треногин. – М.: Наука, 1980. – 496 с.
12. **Абдуллаев, А.Р.** Элементы теории топологически нетеровых операторов [Текст] : монография / А.Р. Абдуллаев, А.Б. Бурмистрова. – Челябинск, 1994. – 93 с.
13. **Бурмистрова, А.Б.** Краевые задачи для нелинейных функционально-дифференциальных уравнений в случае резонанса [Текст] : дис. ...канд. физ.-мат. наук: 01.01.02: защ. 16.10.1991: утв. 23.04.1992 / Бурмистрова Алла Борисовна. – Свердловск, 1991. – 134 с. – Библиогр: с. 123–134.

УДК 535.233.43/535.321.54/536.52

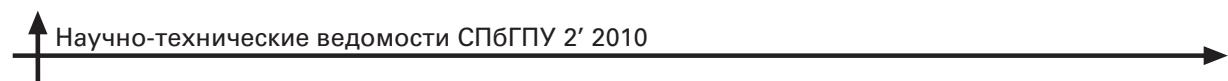
В.И. Иордан, А.А. Соловьев

РЕДУКЦИЯ ТЕМПЕРАТУРНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ ГЕТЕРОГЕННЫХ ПОТОКОВ МЕТОДОМ «ОБРАЩЕНИЯ» ИХ ИНТЕГРАЛЬНОГО ТЕПЛОВОГО СПЕКТРА

В современном машиностроении и других отраслях промышленности важное место занимают газотермические технологии обработки материалов концентрированными потоками энергии [1], напыления защитных и восстановительных покрытий [2], синтеза материалов с заданными функциональными характеристиками [1]. Чаще других используются плазменное, газоплазменное и детонационно-газовое напыление (ДГН) покрытий, которые производятся с помощью мелкодисперсного порошка частиц металлов или их оксидов, распыленных дозатором в процессе загрузки порошка, например, в струю плазмотрона или струю ДГН, истекающую из выходного «сопла» технологической установки напыления. Объемная плотность напыляемых частиц в транспортирующей струе обычно не велика, поэтому такие гетерогенные многофазные потоки называют «запыленными» струями [2]. Контроль скорости и температуры дисперсной фазы потока в технологии ДГН за-

труднен в связи с проявлениями характерных особенностей процессов взрыва и горения. При этом оптические методы требуют учета гетерогенности и излучательных характеристик материала частиц в потоке.

Кроме этого, не всегда учитываются дисперсность сред, высокая температура, быстротечность при разработке большинства приборов контроля температурно-скоростных параметров высокотемпературных быстропротекающих технологических процессов получения покрытий и синтезируемых материалов. Помимо этого, напыляемые частицы в различных сечениях струи (рассматриваются как конденсированная фаза потока в сочетании с существенными динамической и тепловой неравновесностями фаз многофазного потока) характеризуются распределениями по размерам, температурам и скоростям. Поэтому измерение и контроль только лишь одного «эффективного» (осредненного) значения температуры или скорости



потока частиц в непосредственной близости к напыляемому покрытию не может считаться достаточным, так как кроме частиц потока с «эффективными» значениями температуры и скорости, на функциональные характеристики покрытия оказывают влияние и все остальные частицы потока с отличающимися значениями температур и скоростей. Следует заметить, что на самом деле в потоке может и не оказаться частиц с «осредненными» значениями температуры и скорости, например, когда распределение температуры частиц состоит из неперекрывающихся, разнесенных между собой двух мод и «осредненное» значение температуры частиц приходится на промежуток между ними.

Автоматические измерительные системы с быстroredействующими фотоприемниками, способные проводить оперативную диагностику состояний дисперсной и газовой фаз в потоке и на напыляемой поверхности, обладают возможностью обеспечивать оптимальную настройку технологического оборудования на базе банка накопленных данных и программ, предоставляя тем самым возможность решения технологической задачи получения покрытий и синтезируемых материалов с заданными функциональными характеристиками.

В настоящей статье рассматриваются обоснование и идея по сути «виртуального» метода измерения температуры как распределенного параметра по потоку частиц, распыленных в процессе загрузки порошка в струю плазмотрона или детонационно-газовую струю, посредством решения обратной задачи на основе регистрации суммарного (интегрального) теплового спектра излучения от всего ансамбля частиц двухфазного потока.

Модельные представления сигнала интегрального теплового спектра потока частиц и измерительное уравнение

Допущения о низкой концентрации частиц в «запыленной» струе [2], однородных по размеру и находящихся в изотермическом состоянии с неизменной температурой за время прохождения частицей зоны регистрации, позволяют для каждой частицы как «серого» тела использовать модель излучательной способности частицы:

$$r(\lambda, T) = \varepsilon(\lambda, T)\phi(\lambda, T), \quad (1)$$

где $\varepsilon(\lambda, T)$ – поглощающая способность (коэффициент излучения [3]), или относительная излучательная способность частицы, равная отношению ее излучательной способности к спектральной плотности излучения «абсолютно черного тела» (функции Планка $\phi(\lambda, T)$);

$$\phi(\lambda, T) = C_1 \lambda^{-5} / (e^{\frac{c_2}{\lambda T}} - 1). \quad (2)$$

Функцию спектрального разрешения спектропротометра можно аппроксимировать, например, функцией Гаусса

$$Q(\lambda' - \lambda) = Q_0 e^{-\frac{(\lambda' - \lambda)^2}{2\sigma^2}},$$

а сигнал на выходе оптического канала будет определяться сверткой

$$R(\lambda, T) = \int_0^{\infty} Q(\lambda' - \lambda) r(\lambda', T) d\lambda'. \quad (3)$$

При использовании спектрального прибора, способного расщеплять спектральные линии с высокой степенью монохроматичности ($\sigma \rightarrow 0$), выполняется условие $R(\lambda, T) \rightarrow r(\lambda, T)$, так как функцию Гаусса $Q(\lambda' - \lambda)$ в этом случае можно рассматривать в виде обобщенной «дельта-функции».

Выходной сигнал $B(\lambda)$ линейного многоэлементного фотоприемника, установленного в фокальной плоскости спектрального регистратора, пропорционален суммарному тепловому спектру частиц $G(\lambda)$, прошедших зону регистрации, и определяет «измерительное уравнение»

$$B(\lambda) = \gamma(\lambda)G(\lambda), \quad (4)$$

в котором интегральный спектр частиц определяется следующим образом:

$$G(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\lambda, T) X(T) dT = \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} R(\lambda, T) X(T) dT, \quad (5)$$

где $X(T)$ – искомая функция плотности температурного распределения частиц порошка дисперсно-фазной струи.

Функция $X(T)$, если исходить из физических соображений, вне определенного диапазона (T_{\min}, T_{\max}) должна быть равной нулю. Функция $\gamma(\lambda)$ есть по сути «аппаратная функция мультиплексивных искажений» сигнала на выходе канала регистрации, учитывая спектральную неод-



нородность коэффициента пропускания оптического тракта и неоднородность чувствительности фотоприемника, а также нелинейность развертки спектра диспергирующим элементом спектроанализатора. Аддитивные искажения отражаются непосредственно в функции $B(\lambda)$. С помощью уравнения (4) функцию $\gamma(\lambda)$ можно определить на этапе калибровки по известному спектру эталонного излучателя $G_{\text{эт}}(\lambda)$ и по зарегистрированному для него фотоприемником сигналу $B_{\text{эт}}(\lambda)$.

Таким образом, выражения (4), (5), с учетом использования спектрального прибора с высокой разрешающей способностью ($\sigma \rightarrow 0$), позволяют записать «измерительное уравнение» в виде

$$\begin{aligned} B(\lambda) &= \gamma(\lambda) \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} r(\lambda, T) X(T) dT = \\ &= \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} A(\lambda, T) X(T) dT, \end{aligned} \quad (6)$$

где функция

$$A(\lambda, T) = \gamma(\lambda) r(\lambda, T) = \gamma(\lambda) \varepsilon(\lambda, T) \phi(\lambda, T)$$

согласно выражению (1), а интегральный тепловой спектр частиц можно записать в виде

$$G(\lambda) = B(\lambda) / \gamma(\lambda) = \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \varepsilon(\lambda, T) \phi(\lambda, T) X(T) dT. \quad (7)$$

Уравнения (6) и (7) представляют собой интегральные уравнения Фредгольма 1-го рода, обращение которых определяет искомую функцию плотности температурного распределения частиц. Задача обращения уравнений оказывается «некорректной» и требует применения методов «регуляризации» решения [4].

Сигнал $B(\lambda)$ многоэлементного фотоприемника представляет собой набор дискретных отсчетов. Тепловой спектр является «сплошным», поэтому каждая «приемная» площадка фотоприемника на самом деле интегрирует небольшой непрерывный участок теплового спектра и тем самым, хотя и в малой степени, но все-таки искажает «контур» спектра. Следовательно, конечный размер элемента фотоприемника и остаточная неопределенность при выборе «оптимального регуляризующего» функционала в составе обратного оператора налагает ограничение на разрешающую способность метода «восстановления» функции плотности

распределения частиц по температуре. Поэтому для обеспечения более высокой степени устойчивости численной процедуры «обращения» интегрального уравнения Фредгольма еще на этапе постановки обратной задачи необходимо осуществить «редукцию (сокращение числа отсчетов)» непрерывной функции плотности температурного распределения частиц в ее представление гистограммой распределения, определяющейся конечным набором участков разбиения диапазона температур (T_{\min}, T_{\max}) .

Редукция температурного распределения частиц в виде гистограммы

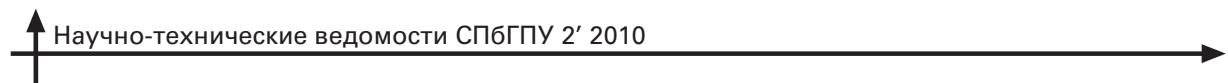
В силу аппаратных ограничений при $\lambda \rightarrow 0$ и при $\lambda \rightarrow \infty$ функция $\gamma(\lambda)$ стремится к нулю, что способствует «регуляризации» при обращении интегрального уравнения Фредгольма 1-го рода (6) с ядром $A(\lambda, T) = \gamma(\lambda) r(\lambda, T)$. Напротив, переход к модельному спектру $G(\lambda)$ может привести к неустойчивости процедуры обращения интегрального уравнения (7), так как с учетом стремления $\gamma(\lambda)$ к нулю в асимптотике $\lambda \rightarrow 0$ и $\lambda \rightarrow \infty$ отсчеты $G(\lambda)$, пересчитываемые по формуле $G(\lambda) = B(\lambda) / \gamma(\lambda)$, могут в асимптотике вместо стремления к нулю, наоборот, увеличиваться.

Номера N_i ячеек фотоприемника согласно дисперсионной (нелинейной) характеристике спектрального прибора «привязаны» к длинам волн $N_i = N(\lambda_i)$, где $i = 1, 2, \dots, n$. Тогда можно записать следующую систему:

$$\begin{cases} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} A(N_1, T) X(T) dT = B(N_1); \\ \dots \\ \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} A(N_n, T) X(T) dT = B(N_n). \end{cases} \quad (8)$$

В соответствии со свойством аддитивности интеграла для каждого $i = 1, 2, \dots, n$ имеем строгое равенство

$$\begin{aligned} &\int_{T_{\min}}^{T_{\max}} A(N_i, T) X(T) dT = \\ &= \sum_{j=1}^n \int_{\hat{T}_{j-1}}^{\hat{T}_j} A(N_i, T) X(T) dT = B(N_i), \end{aligned} \quad (9)$$



где \hat{T}_j – узловые точки разбиения температурного диапазона $[T_{\min}, T_{\max}]$ с шагом $\Delta T_j = \hat{T}_j - \hat{T}_{j-1}$, чаще всего – с постоянным шагом, т. е. $\Delta T_j = \Delta T$.

Редукция функции плотности температурного распределения частиц в виде ее гистограммы «в строгом смысле» обосновывается известной в математическом анализе теоремой «о среднем», а именно с учетом принятых здесь обозначений далее формулируется теорема.

Теорема. *Если функции $A(N_i, T)$ и $X(T)$ являются непрерывными по переменной T и $A(N_i, T) \geq 0$ (в нашем случае и $X(T) \geq 0$), то существует такое значение $\tilde{T}_j^{(1)} \in [\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]$, что*

$$\int_{\hat{T}_{j-1}}^{\hat{T}_j} A(N_i, T) X(T) dT = X(\tilde{T}_j^{(1)}) \int_{\hat{T}_{j-1}}^{\hat{T}_j} A(N_i, T) dT. \quad (10)$$

Без доказательства.

С учетом формулировки теоремы и ее уравнения (10) выражение (9) принимает вид

$$\begin{aligned} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} A(N_i, T) X(T) dT &= \\ &= \sum_{j=1}^n X(\tilde{T}_j^{(1)}) \int_{\hat{T}_{j-1}}^{\hat{T}_j} A(N_i, T) dT = B(N_i). \end{aligned} \quad (11)$$

С другой стороны, уравнение (11) будет выполнимо и его правая часть останется без изменений в том же виде, если вместо непрерывной функции плотности температурного распределения $X(T)$ в левую часть уравнения подставить подчиненную определенному условию ступенчатую функцию (гистограмму). Согласно этому условию на каждом j -м элементарном участке $[\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]$, где $j = 1, 2, \dots, n$, гистограмма должна иметь постоянное значение X_j , равное «среднему» значению $X(\tilde{T}_j^{(1)})$ функции плотности распределения в той точке $\tilde{T}_j^{(1)}$ этого участка, которая удовлетворяет с учетом теоремы «о среднем» уравнениям (10) и (11). Иначе говоря, «средние» значения $X(\tilde{T}_j^{(1)})$ функции плотности температурного распределения $X(T)$ на каждом j -м участке $[\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]$ однозначно определяют постоянные уровни X_j (высоты столбцов) ее гистограммы, т. е. $X_j = X(\tilde{T}_j^{(1)})$. Поэтому далее будем использовать упрощенное выражение уравнения (11), общее как для варианта непрерывной функции плотности температурно-

го распределения, так и для ее гистограммы (они определяют один и тот же спектр):

$$\begin{aligned} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} A(N_i, T) X(T) dT &= \\ &= \sum_{j=1}^n X_j \int_{\hat{T}_{j-1}}^{\hat{T}_j} A(N_i, T) dT = B(N_i). \end{aligned} \quad (12)$$

В работе [5] система измерительных уравнений (записывалась в матричном виде) получена повторным применением теоремы «о среднем» к каждому уравнению вида (12), где $i = 1, 2, \dots, n$. Таким образом и в данном случае согласно теореме «о среднем» должны существовать такие определенные значения $\tilde{T}_j^{(2)}$, входящие в отрезки $[\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]$, чтобы для каждого интеграла с индексом j в выражении (12) выполнялось строгое равенство

$$\begin{aligned} \int_{\hat{T}_{j-1}}^{\hat{T}_j} A(N_i, T) dT &= A(N_i, \tilde{T}_j^{(2)}) \int_{\hat{T}_{j-1}}^{\hat{T}_j} dT = \\ &= A(N_i, \tilde{T}_j^{(2)}) \Delta T. \end{aligned} \quad (13)$$

Следовательно, с учетом упрощения в (13) обозначенний набора температур $\{T_j = \tilde{T}_j^{(2)}; j = 1, 2, \dots, n\}$ уравнения (12) можно перезаписать в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta T} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} A(N_i, T) X(T) dT &= \\ &= \sum_{j=1}^n A(N_i, T_j) X_j = \tilde{B}(N_i), \end{aligned} \quad (14)$$

где $\tilde{B}(N_i) = B(N_i) / \Delta T$.

Существует неопределенность при нахождении значений температур в наборе $\{T_j = \tilde{T}_j^{(2)}; j = 1, 2, \dots, n\}$, которые обеспечивают строгое равенство в уравнениях вида (13) для компонент гистограммы $X_j = X(\tilde{T}_j^{(1)})$; последние «адекватны» реальной функции плотности температурного распределения частиц в дисперснофазной струе. Предпочтительным и более вероятным может быть выбор таких значений температуры, которые расположены в центрах участков разбиения $[\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]$, т. е. соответствующих условиям

$$T_j = (\hat{T}_{j-1} + \hat{T}_j) / 2. \quad (15)$$



Это условие тем не менее внесет «искажения» в значения элементов $A(N_i, T_j)$ матрицы системы линейных алгебраических уравнений (записана на основе уравнения (14) с учетом условия (15) [5]):

$$\begin{cases} A(N_1, T_1)X_1 + A(N_1, T_2)X_2 + \dots + A(N_1, T_n)X_n = \tilde{B}(N_1); \\ \dots \\ A(N_n, T_1)X_1 + A(N_n, T_2)X_2 + \dots + A(N_n, T_n)X_n = \tilde{B}(N_n). \end{cases} \quad (16)$$

Иначе говоря, при «обращении» системы уравнений (16) «искажения» элементов $A(N_i, T_j)$ и «остаточные искажения» в отсчетах $\tilde{B}(N_i)$ преобразуются в «искажения» искомых компонентов X_j гистограммы распределения температур частиц. Это замечание (уточнение) и составляет суть понятия «некорректной» задачи на обращение системы (16). В операторном (матричном) виде с учетом выражения

$$\tilde{B}(N_i) = B(N_i) / \Delta T$$

систему (16) можно записать как $A \cdot X = \tilde{B}$.

В работе [5] решение обратной «некорректной» задачи выполнялось в соответствии с процедурой регуляризации по Тихонову:

$$\|X_j\| = \|A(N_k, T_j) + \alpha P_{k,j}\|^{-1} \cdot \|\tilde{B}(N_k)\|,$$

где α – параметр регуляризации по Тихонову; матричный оператор P соответствует разностной схеме Эйлера [4].

Задача (12)–(16) может быть сведена к «симметричной» форме путем домножения уравнения (6) на «ядро» интегрального оператора $A(\lambda, t)$ и интегрированием по λ (с учетом изменения порядка интегрирования):

$$\begin{aligned} & \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \left(\int_0^{\infty} A(\lambda, t) A(\lambda, T) d\lambda \right) X(T) dT = \\ &= \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} C(t, T) X(T) dT = \\ &= \int_0^{\infty} A(\lambda, t) B(\lambda) d\lambda = D(t), \end{aligned} \quad (18)$$

где t – параметр, имеющий также размерность температуры, а ядро интегрального оператора

$$C(t, T) = \int_0^{\infty} A(\lambda, t) A(\lambda, T) d\lambda$$

симметрично к перестановке местами параметров t и T .

Таким образом, «новое» интегральное уравнение Фредгольма

$$\int_{T_{\min}}^{T_{\max}} C(t, T) X(T) dT = D(t)$$

определяет уравнение в матричном виде $CX = D$ с симметричной матрицей C , имеющей преимущество по свойству «обусловленности» перед несимметричной матрицей A . Поэтому решение матричного уравнения $CX = D$ численно более устойчиво и позволяет добиться большего температурного разрешения гистограммы распределения в процессе редукции.

В отличие от подхода, использованного в статье [5], где измерительное уравнение (6) было представлено в виде системы линейных уравнений (12), в настоящей работе на основе указанного уравнения реализован другой подход редукции функции плотности температурного распределения частиц в ее гистограмму. В данном случае для ядра интегрального оператора

$$A(\lambda, T) = \gamma(\lambda) r(\lambda, T) = \gamma(\lambda) \varepsilon(\lambda, T) \phi(\lambda, T)$$

используется разложение функции Планка (2) в ряд по «виновским» спектрам

$$\omega(\lambda, T_i) = C_1 \lambda^{-5} e^{-c_2/\lambda T_i}$$

фиксированного набора температур $T_i = T/i$, а именно:

$$\begin{aligned} \phi(\lambda, T) &= C_1 \lambda^{-5} \left/ \left(e^{\frac{c_2}{\lambda T}} - 1 \right) \right. = C_1 \lambda^{-5} e^{-\frac{c_2}{\lambda T}} \left/ \left(1 - e^{-\frac{c_2}{\lambda T}} \right) \right. = \\ &= C_1 \lambda^{-5} e^{-\frac{c_2}{\lambda T}} \sum_{i=0}^{\infty} e^{-i \frac{c_2}{\lambda T}} = C_1 \lambda^{-5} \sum_{i=1}^{\infty} e^{-i \frac{c_2}{\lambda T}} = \\ &= C_1 \lambda^{-5} \sum_{i=1}^{\infty} e^{-\frac{c_2}{\lambda T_i}} = \sum_{i=1}^{\infty} \omega(\lambda, T_i). \end{aligned} \quad (19)$$

Необходимо отметить, что верхняя температурная граница T_{\max} в технологиях напыления обычно не превышает 2500–3000 К и верхняя граница λ_{\max} длин волн, регистрируемых кремниевыми фотоприемниками, ограничена в ближнем ИК-диапазоне значением 1 мкм, в силу чего в разложении (19) слагаемые для $i \geq 2$ малы по сравнению с первым слагаемым

$$\omega(\lambda, T_1) = \omega(\lambda, T) = C_1 \lambda^{-5} e^{-\frac{c_2}{\lambda T}},$$

которое и является «приближением Вина» для функции Планка [3].



На практике металлы считают «серыми» телами в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах, и относительную излучательную способность частиц $\varepsilon(\lambda, T)$ оценивают константой в силу того, что график функции $\varepsilon(\lambda, T)$ при фиксированных температурах $T = T_j$ относительно своего «среднего» постоянного уровня отклоняется не более, чем на единицы процентов, т. е. $\varepsilon(\lambda, T)$ является «слабоменяющейся» функцией [3]. Поэтому в указанном спектральном диапазоне функцию $\varepsilon(\lambda, T)$ для некоторых металлов заменяют на функцию $\varepsilon(T)$ (ее называют коэффициентом «черноты» серого тела). Для металлов в этом спектральном диапазоне графики функции $\varepsilon(\lambda, T_j) = \varepsilon_j(\lambda)$ с ростом температуры ($T_j > T_{j-1}$) смещаются вверх не очень существенно [3]. Участки длин волн, на которых для различных значений T_j графики $\varepsilon(\lambda, T_j) = \varepsilon_j(\lambda)$ монотонно растут или убывают, практически соответствуют друг другу [3].

Следовательно, с учетом приведенных замечаний и обеспечения заданной точности в модельном представлении (6) спектра функцию $\varepsilon(\lambda, T)$ можно аппроксимировать произведением

$$\varepsilon(\lambda, T) \approx \varepsilon_1(\lambda)\varepsilon_2(T)$$

по результатам калибровки (ее особенности изложены в следующем разделе настоящей статьи).

Тогда интегральный тепловой спектр излучения частиц потока будет определяться выражением вида

$$\begin{aligned} B(\lambda) &= \gamma(\lambda) \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \varepsilon(\lambda, T) \phi(\lambda, T) X(T) dT = \\ &= \xi_1(\lambda) \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \phi(\lambda, T) Z(T) dT, \end{aligned} \quad (20)$$

где

$$\xi_1(\lambda) = \gamma(\lambda)\varepsilon_1(\lambda), \quad (21)$$

$$Z(T) = \varepsilon_2(T)X(T). \quad (22)$$

С учетом разложения (19) функции Планка по «виновским» спектрам уравнение (20) запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} B(\lambda) &= \xi_1(\lambda)C_1\lambda^{-5} \sum_{i=1}^{\infty} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} e^{-i\frac{c_2}{\lambda T}} \cdot Z(T) dT = \\ &= \xi_2(\lambda) \sum_{i=1}^{\infty} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} e^{-i\frac{c_2}{\lambda T}} Z(T) dT, \end{aligned} \quad (23)$$

где

$$\xi_2(\lambda) = C_1\lambda^{-5}\xi_1(\lambda) = C_1\lambda^{-5}\varepsilon_1(\lambda)\gamma(\lambda). \quad (24)$$

В силу свойства аддитивности интеграл (23) можно представить суммой аналогичных интегралов по интервалам разбиения $[\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]$, где $j = 1, 2, \dots, n$ и $T_0 = T_{\min}$, $T_n = T_{\max}$:

$$B(\lambda) = \xi_2(\lambda) \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^n \int_{\hat{T}_{j-1}}^{\hat{T}_j} e^{-i\frac{c_2}{\lambda T}} Z(T) dT. \quad (25)$$

Замена переменной интегрирования на $t = 1/T$, откуда $T = 1/t$, $dT = -dt/t^2$, дает

$$B(\lambda) = -\xi_2(\lambda) \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^n \int_{1/\hat{T}_{j-1}}^{1/\hat{T}_j} e^{-i\frac{c_2 t}{\lambda}} Z_1(t) dt, \quad (26)$$

где

$$Z_1(t) = Z(1/t)/t^2. \quad (27)$$

Очевидно, что условия теоремы «о среднем» применимы к интегралам в выражении (26), поэтому существует набор значений t_j (т. е. существует набор $\hat{T}_j = 1/t_j$), для которого верно уравнение

$$\begin{aligned} B(\lambda) &= -\xi_2(\lambda) \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^n \int_{1/\hat{T}_{j-1}}^{1/\hat{T}_j} e^{-i\frac{c_2 t}{\lambda}} Z_1(t) dt = \\ &= -\xi_2(\lambda) \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^n Z_1(t_j) \int_{1/\hat{T}_{j-1}}^{1/\hat{T}_j} e^{-i\frac{c_2 t}{\lambda}} dt. \end{aligned} \quad (28)$$

Обратная подстановка переменной $t = 1/T$ в функцию (27) и учет равенства

$$\int_{1/\hat{T}_{j-1}}^{1/\hat{T}_j} e^{-i\frac{c_2 t}{\lambda}} dt = -\frac{\lambda}{iC_2} \left(e^{-i\frac{c_2}{\lambda \hat{T}_j}} - e^{-i\frac{c_2}{\lambda \hat{T}_{j-1}}} \right)$$

позволяют переписать уравнение (28):

$$B(\lambda) = \frac{\lambda \xi_2(\lambda)}{C_2} \sum_{i=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i} \sum_{j=1}^n \beta_j Z_j \left(e^{-i\frac{c_2}{\lambda \hat{T}_j}} - e^{-i\frac{c_2}{\lambda \hat{T}_{j-1}}} \right) \right), \quad (29)$$

где $\beta_j = \hat{T}_j^2$. На основании теоремы «о среднем» величина β_j представляет собой «осредненное» значение квадрата температуры из j -го участка разбиения $[\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]$. Значение β_j можно оценить,



например, в соответствии с методом Монте-Карло, как среднее арифметическое значение последовательности квадратов «псевдослучайных» чисел, сгенерированных датчиком «рандом» в диапазоне $[\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]$, где $j = 1, 2, \dots, n$. Уравнение (29) можно записать в эквивалентном виде

$$B(\lambda) = \frac{\lambda}{C_2} \xi_2(\lambda) \sum_{i=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i} \sum_{j=0}^n \gamma_j e^{-\frac{c_2}{\lambda \hat{T}_j}} \right), \quad (30)$$

где

$$\begin{cases} \gamma_0 = -Z_1 \beta_1; \\ \dots, \\ \gamma_j = Z_j \beta_j - Z_{j+1} \beta_{j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, n-1; \\ \dots, \\ \gamma_n = Z_n \beta_n. \end{cases} \quad (31)$$

С учетом того, что $e^{-\frac{c_2}{\lambda \hat{T}_j}} = e^{-\frac{c_2}{\lambda \hat{T}_{j,i}}}$, а температуры

$$\hat{T}_{j,i} = \hat{T}_j / i, \quad (32)$$

и на основании равенства (24) можно записать уравнение (30) в виде

$$\begin{aligned} B(\lambda) &= \frac{\lambda}{C_2} \xi_1(\lambda) C_1 \lambda^{-5} \sum_{i=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i} \sum_{j=0}^n \gamma_j e^{-\frac{c_2}{\lambda \hat{T}_{j,i}}} \right) = \\ &= \frac{\lambda}{C_2} \xi_1(\lambda) \sum_{j=0}^n \left(\gamma_j \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i} \omega(\lambda, \hat{T}_{j,i}) \right). \end{aligned} \quad (33)$$

Данное уравнение выражает пропорциональность интегрального теплового спектра потока частиц разложению по «виновским» спектрам $\omega(\lambda, \hat{T}_{j,i})$, среди которых доминирует компонент $\omega(\lambda, \hat{T}_{n,1})$ с максимальной температурой $\hat{T}_{n,1} = T_{\max}$. С ростом i согласно формуле (32) значения температур $\hat{T}_{j,i}$ убывают, а следовательно, резко уменьшаются интенсивности «виновских» спектров $\omega(\lambda, \hat{T}_{j,i})$, и за счет убывания весовых коэффициентов $1/i$ уменьшаются их вклады в интегральный спектр $B(\lambda)$.

Как уже отмечалось (см. замечание после формулы (19)), если выполнимы верхние ограничения температуры в 2500–3000 К и длины волны

в 1 мкм, то уравнение (33) для этих условий имеет приближенный вид:

$$\begin{aligned} B(\lambda) &\equiv \frac{\lambda}{C_2} \xi_1(\lambda) \sum_{j=0}^n \gamma_j \omega(\lambda, \hat{T}_j) = \\ &= \frac{C_1 \lambda^{-4}}{C_2} \xi_1(\lambda) \sum_{j=0}^n \gamma_j e^{-\frac{c_2}{\lambda \hat{T}_j}}. \end{aligned} \quad (34)$$

Для реализации процедуры вычислений искомых коэффициентов γ_j более удобным представлением итогового «измерительного» уравнения (33) будет разложение по системе функций $\psi_j(\lambda, \hat{T}_j)$:

$$B(\lambda) = \sum_{j=0}^n \gamma_j \psi_j(\lambda, \hat{T}_j), \quad (35)$$

где

$$\begin{aligned} \psi_j(\lambda, \hat{T}_j) &= \frac{\lambda}{C_2} \xi_1(\lambda) \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i} \omega(\lambda, \hat{T}_{j,i}) = \\ &= \frac{C_1 \lambda^{-4}}{C_2} \xi_1(\lambda) \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i} e^{-\frac{c_2}{\lambda \hat{T}_{j,i}}}, \end{aligned} \quad (36)$$

а $\hat{T}_{j,i} = \hat{T}_j / i$ в соответствии с выражением (32).

Зарегистрированные с помощью откалиброванного дискретного фотоприемника спектральные отсчеты $\{B(\lambda_k); k = 1, 2, \dots, K\}$ и матрица расчетанных коэффициентов

$$\left\{ \|\psi_{k,j}\|; k = 1, 2, \dots, K; j = 0, 1, 2, \dots, n \right\},$$

где $\psi_{k,j} = \psi_j(\lambda_k, \hat{T}_j)$, используются в качестве входных данных для процедуры метода «наименьших квадратов», позволяющей аппроксимировать искомые коэффициенты разложения γ_j . Погрешность (искажения) этих коэффициентов определяются главным образом остаточными «искажениями» после коррекции и фильтрации зарегистрированных спектральных отсчетов $\{B(\lambda_k); k = 1, 2, \dots, K\}$, так как функция, определенная формулой (21) и входящая в систему функций $\psi_j(\lambda, \hat{T}_j)$, может быть получена с достаточно высокой степенью точности на этапе калибровки измерительного комплекса.

Искажения коэффициентов γ_j в процессе решения системы (31) оказывают влияние на точность вычисления компонентов Z_j . Некоторые (относительно малые по значению) из этих компонентов могут быть отрицательными по знаку, что не соответствует их физическому смыслу. Коэффициенты



$\{\beta_j = \tilde{T}_j^2; \tilde{T}_j \in [\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]; j = 1, 2, \dots, n\}$, входящие в систему (31) и полученные путем «осреднения», также могут оказывать влияние на точность искомых компонентов Z_j . Эти замечания раскрывают смысл понятия «некорректной» обратной задачи по определению гистограммы температурного распределения частиц. Регуляризация решения обратной задачи достигается применением алгоритма «многоцикловых встречных прогонок» с последовательным уменьшением «невязки» на крайних элементах Z_1 и Z_n . Этот алгоритм является «адаптацией» известного метода «встречных прогонок». Кроме того, вместо одного набора коэффициентов $\{\beta_j = \tilde{T}_j^2; \tilde{T}_j \in [\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]; j = 1, 2, \dots, n\}$ можно путем «осреднения» получить несколько наборов, использующих различные «генерации» датчика «псевдослучайных» чисел из отрезков $\{[\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]; j = 1, 2, \dots, n\}$, для которых вновь применяется алгоритм «встречных прогонок». Таким образом, при этом имеется возможность выбора «наилучшего» решения обратной задачи.

«Физически корректный» набор вычисленных коэффициентов $\{Z_j; j = 1, 2, \dots, n\}$ согласно выражению (22) позволяет вычислить «физически корректный» набор коэффициентов температурной гистограммы

$$\{X_j = Z_j / \varepsilon_2(T_j); j = 1, 2, \dots, n\},$$

где T_j – центры температурных участков разбиения $\{[\hat{T}_{j-1}, \hat{T}_j]; j = 1, 2, \dots, n\}$ вычисляются по формуле (15).

Программно-аппаратная реализация метода редукции температурного распределения частиц

Измерительное уравнение (20), использующее выходной сигнал $B(\lambda)$ линейного многоэлементного фотоприемника в составе автоматизированного измерительного комплекса, и метод решения «обратной» задачи определения компонентов температурной гистограммы распределения частиц определяют основу программно-аппаратной реализации метода и комплекса измерения температуры потока частиц. Особенность калибровки «аппаратной функции искажений» регистратора интегрального теплового спектра состоит в следующем.

Если учесть высокое разрешение ($\sigma \rightarrow 0$) спектроанализатора, диапазон регистрации теплового спектра (видимое и ближнее ИК-излучение) и использовать модель «измерительного» уравнения (20) при условиях (21) и (22), то для однородно прогретого объема частиц порошка заданного состава при температуре T^* функцию $X(T)$ можно считать дельта-функцией. Тогда уравнение (21) принимает вид

$$B_{\text{пп}}(\lambda) = B_{\text{пп}}(\lambda, T^*) = \gamma(\lambda) \varepsilon_1(\lambda) \varepsilon_2(T^*) \phi(\lambda, T^*) = (37) \\ = \xi_1(\lambda) \varepsilon_2(T^*) \phi(\lambda, T^*),$$

где $B_{\text{пп}}(\lambda)$ – зарегистрированный суммарный тепловой спектр частиц порошка на этапе калибровки; $\varepsilon_2(T^*)$ – коэффициент «черноты» (определяется по справочникам, см. например [6]); $\phi(\lambda, T^*)$ – функция Планка, рассчитываемая по формуле (2).

Следовательно, функция $\xi_1(\lambda)$, используемая при решении обратной задачи, на этапе калибровки определяется выражением

$$\xi_1(\lambda) = \frac{B_{\text{пп}}(\lambda, T^*)}{\varepsilon_2(T^*) \phi(\lambda, T^*)}. \quad (38)$$

Структурная схема измерительного комплекса температуры потока частиц представлена на рис. 1.

Световой поток от плазменной струи сфокусирован на входной щели спектрального дисперсионного устройства, которое разлагает входное излучение в непрерывный спектр. В фокальной плоскости этого устройства установлен многоэлементный линейный фотоприемник, в качестве которого можно использовать прибор с зарядовой связью (ПЗС) или фотодиодную линейку. Управление временем накопления, тактовой частотой опроса фотоприемника и преобразование видеосигнала в цифровую форму для ввода в компьютер осуществляется измерительным модулем. Оцифрованные данныечитываются модулем восстановления гистограммы температурного распределения через драйвер устройства, который упрощает взаимодействие с аппаратным обеспечением. Восстановление гистограммы температурного распределения происходит согласно методике, изложенной в данной статье. Перед редукцией спектра происходит вычитание фонового спектра плазменной струи, не загруженной порошком частиц (фоновый спектр регистрируется перед началом измерений и обновляется в процессе работы системы для учета нестационарности

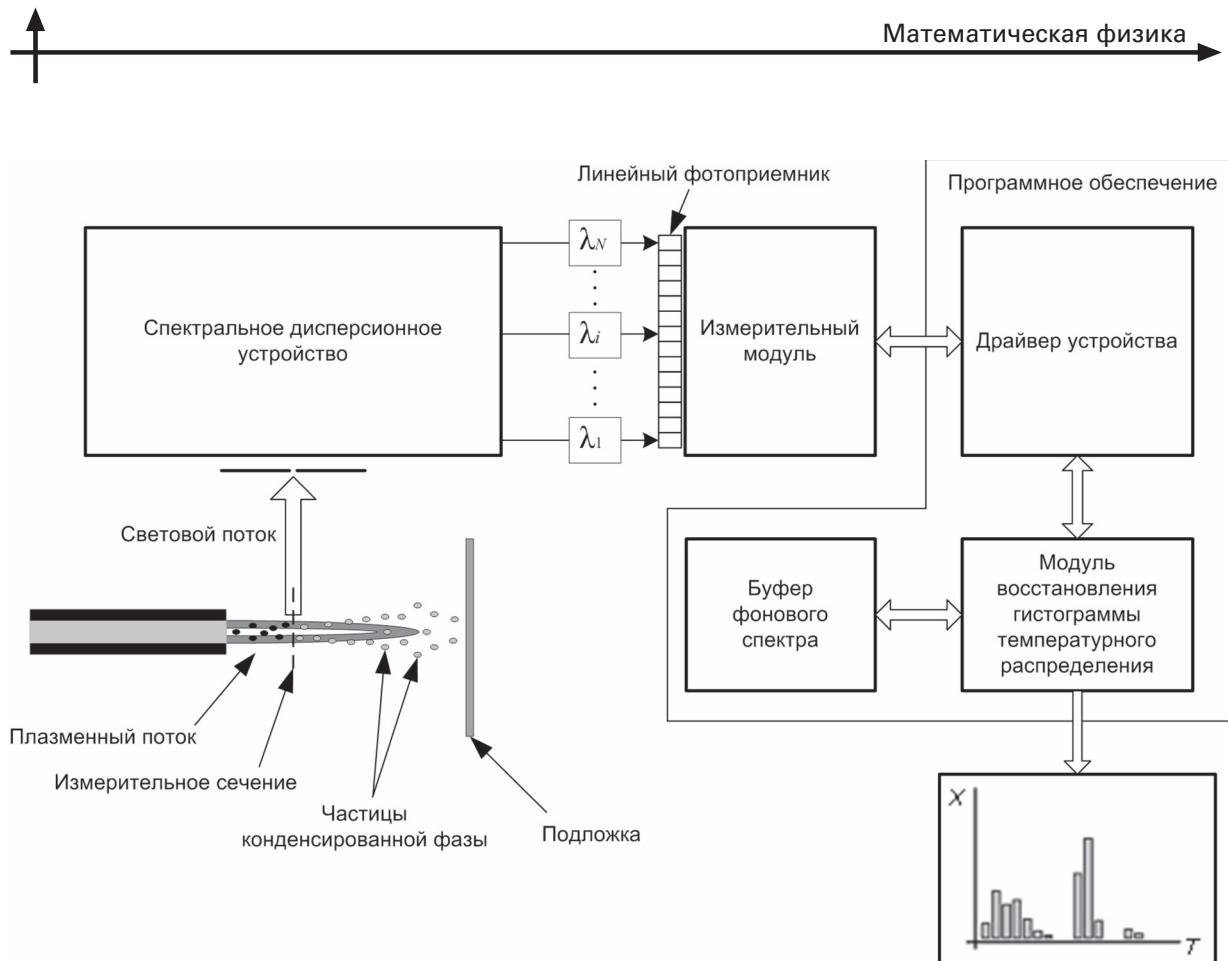


Рис. 1. Структурная схема комплекса спектральной диагностики температуры частиц в потоке;

$$\lambda_1, \dots, \lambda_i, \dots, \lambda_N$$
 – длины волн входного излучения

характеристик устройства напыления). Калибровка ПЗС-линейки доступна в пределах 800–2000 °C и выполняется при помощи образцовой светоизмерительной температурной лампы накаливания типа ТРУ 1100–2350 (температура эталона пропорциональна проходящему через нее току; последний стабилизируется прецизионным стабилизатором тока). Методика оптимизации параметров редукции температурного распределения, нацеленная на достижение максимальной разрешающей способности (как по температуре, так и по концентрации частиц в заданном температурном диапазоне) при минимизации влияния вычислительных и аппаратных шумов, представлена на рис. 2; там же приведены результаты численных экспериментов. Совмещение результатов восстановления гистограмм тестовых распределений (ломаные кривые) с исходными графиками этих тестовых распределений (см. рис. 2) позволяет оценить качество восстановления гистограммы. В результате моделирования было обнаружено, что результаты восстановления гистограмм температурных распределений частиц критичны

к выбору сетки разбиения спектрального и температурного диапазонов. В работе [5] было получено условие на выбор границ этих диапазонов; спектральный максимум должен удовлетворять следующему виду условия виновского смещения:

$$|\lambda_{\min} T_{\max} - \lambda_{\max} T_{\min}| \leq \delta,$$

где δ – малая величина, соизмеримая с минимальным выбранным шагом температурной и спектральной «сетки» редукции ($\Delta\lambda \cdot \Delta T$).

На рис. 3, б приведен пример интегрального теплового спектра $B(\lambda)$ от газа и ансамбля нагретых частиц, пролетевших через зону регистрации анализатора с 2592 ячейками ПЗС-приемника; разрешающая способность – 0,35 нм/элемент, область спектральной чувствительности – 200–1100 нм.

Предварительным вычитанием фонового спектра (рис. 3, а) из суммарного спектра частиц с фоном (рис. 3, б) был получен тепловой спектр частиц (рис. 4, а). Затем этот сигнал был отфильтрован, и с учетом «калибровочной» функции $\xi_1(\lambda)$ по изложенной методике решения обратной

задачи была получена температурная гистограмма $\{X(T_i); i = 1, 2, \dots, n\}$ распределения частиц (рис. 4, б).

Полученная гистограмма была аппроксимирована гауссовой кривой распределения. С учетом шага квантования температуры в гистограмме округленная оценка математического ожидания температурного распределения частиц оказалась

равной 1600 К, а оценка стандартного (среднеквадратического) отклонения – 270 К.

В заключение отметим основные результаты работы.

Разработанный программно-аппаратный комплекс измерения распределенной в потоке струи температуры частиц порошка позволяет произ-

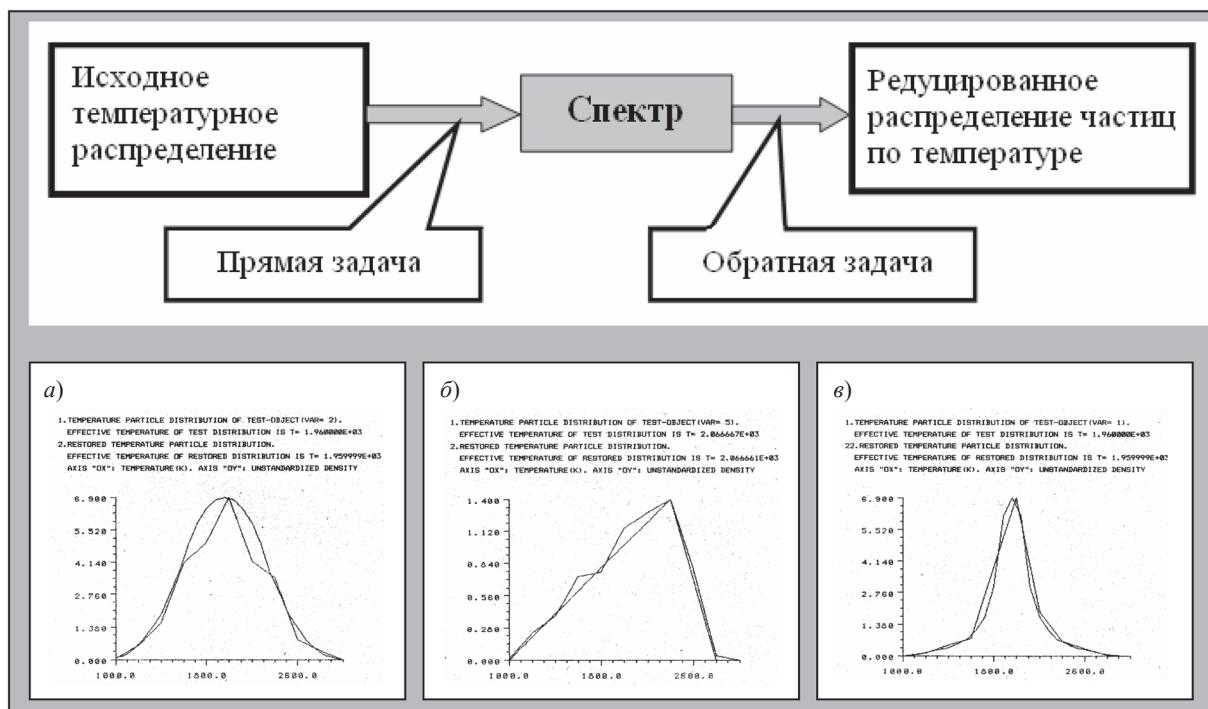


Рис. 2. Методика численного эксперимента и примеры редуцирования температурных тест-распределений: Гаусса (а), треугольное (б) и типа «обелиск» (в)

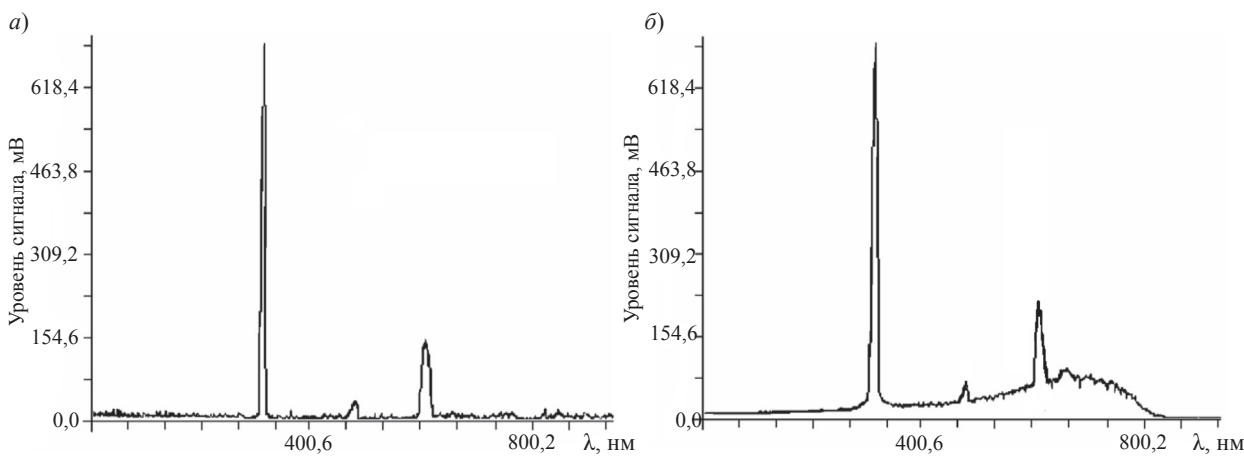


Рис. 3. Экспериментальные спектры:
а – фоновый (для газовой струи); б – интегральный тепловой для газовой струи, запыленной порошком

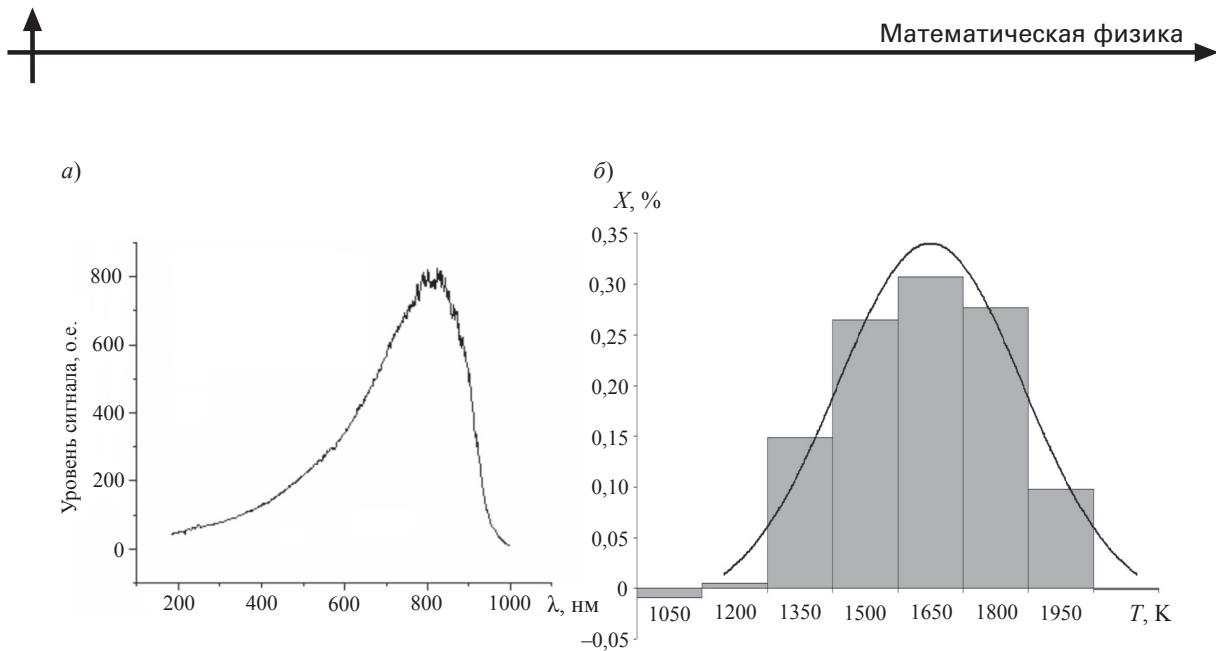


Рис. 4. Результаты обработки:
 a – тепловой (разностный) спектр частиц; b – температурная гистограмма распределения частиц

водить контроль и управление технологическим процессом детонационно-газового и плазменного напыления порошковых покрытий. Основные особенности комплекса – высокие значения отношения сигнал / шум (более 70 dB) и скорости спектральных измерений (более 1000 кадров в секунду).

Новые широкодиапазонные фотопреобразователи, такие как фотоэлементы с «квантовыми точками», твердотельные полихроматоры, в том числе в виде наноразмерных покрытий прямо на

поверхности чувствительного элемента фотоматрицы, позволяют почти на три порядка увеличить мощность оптического сигнала, регистрируемого датчиком, за счет отсутствия входных апертурных щелей, а заодно и мощность самого монохроматора. Несмотря на повышение чувствительности и параллельное снижение порога шумов фотоприемника, принципы оптимизации таких устройств должны по-прежнему базироваться на законе смещения Вина.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Солоненко, О.П. Высокоэнергетические процессы обработки материалов [Текст] / О.П. Солоненко, А.П. Алхимов, В.В. Марусин [и др.]. – Новосибирск: Наука. Сибирская издательская фирма РАН, 2000. – 425 с. – (Низкотемпературная плазма. Том 18).
2. Жуков, М.Ф. Высокотемпературные запыленные струи в процессе обработки порошковых материалов [Текст]: монография / М.Ф. Жуков, О.П. Солоненко; под ред. акад. В.Е. Накорякова. – Новосибирск: СО АН СССР, ин-т Термофизики, 1990. – 516 с.
3. Магунов, А.Н. Спектральная пирометрия (обзор) [Текст] / А.Н. Магунов // Приборы и техника эксперимента. – 2009. – № 4. – С. 5–28.
4. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач [Текст] / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – М.: Наука. Глав. ред. физ.-мат. литературы, 1978. – 288 с.
5. Гуляев, П.Ю. Виновский критерий выбора параметров редукции температурного распределения частиц по их суммарному тепловому спектру [Текст] / П.Ю. Гуляев, В.И. Иордан, И.П. Гуляев [и др.] // Изв. вузов. – Физика. – 2008. – Т. 51. – № 9/3. – С. 69–76.
6. Латыев, Л.Н. Излучательные свойства твердых материалов [Текст]: справочник / Л.Н. Латыев, В.А. Петров, В.Я. Чеховской [и др.]; под общ. ред. А.Е. Шейндлина. – М.: Энергия, 1974. – 472 с.

УДК 53.083.91: 535.3

Н.В. Ильин, Д.В. Кизеветтер

МЕТОД ВОЗБУЖДЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ВИХРЕЙ В ГРАДИЕНТНЫХ ВОЛОКОННЫХ СВЕТОВОДАХ

Оптические пучки с вращающимся волновым фронтом, называемые оптическими вихрями, находят все большее применение в технике [1] вследствие их специфических свойств. Оптические вихри (ОВ) могут возникать в том числе и в волоконных световодах (ВС). Известно, что группу оптических вихрей с одинаковыми направлениями вращения волнового фронта в многомодовых ВС можно возбудить путем ввода наклонного сфокусированного пучка, смещенного относительно оси волоконного ВС [2–4]. Результаты исследований возбуждения оптических вихрей в ВС со ступенчатым профилем показателя преломления представлены, в частности, в работах [3, 5]. Сведения об исследованиях ОВ в градиентных оптических волокнах малочисленны, что не позволяет выявить и обобщить закономерности возбуждения и распространения вихрей. Поэтому необходимы подробные исследования возбуждения, распространения и излучения всех возможных типов электромагнитных волн в градиентных волоконных световодах.

Ввод сфокусированного излучения в ВС широко использовался в 60–80-х годах для селективного возбуждения волноводных мод в целях измерения дифференциальных модовых характеристик [6]. Однако как теоретическое рассмотрение [7–10], так и практическое использование такого метода, как например в работе [11], производилось либо для случая нормального падения сфокусированного пучка на входной торец ВС, либо падения наклонного пучка, но только при совпадении оси ВС с центром пучка, т. е. для случаев, когда невозможно возникновение оптических вихрей. Для возбуждения в световодах оптических вихрей с заданными параметрами необходимо контроли-

ровать не только положение пучка относительно оси ВС, но и его угол наклона. Поэтому для исследования распространения ОВ в оптических волокнах необходимо усовершенствовать классический способ ввода излучения, который позволяет определить только размер и форму оптического пучка.

Итак, цель работы – экспериментально доказать возможность возбуждения оптических вихрей в волоконных световодах; в связи с данной целью – усовершенствовать методику ввода лазерного излучения.

Описание экспериментальной установки

Для возбуждения оптических вихрей в волоконных световодах была создана экспериментальная установка на основе микроскопа «МИКМЕД-В-1-20» с трилокулярной насадкой «МФТ-11Т» и с использованием двух матричных телевизионных камер для контроля условий ввода и отображения распределений интенсивности выходящего из ВС излучения.

Упрощенная структурная схема установки приведена на рис. 1. В качестве источника излучения 1 использовался твердотельный лазер с длиной волны излучения $\lambda = 532$ нм, с полупроводниковой накачкой, с коллимирующим объективом, размещенный на двухкоординатной подвижке 2. Последняя позволяла перемещать лазерный пучок относительно оси микрообъектива 3. Исследования проводились также с использованием полупроводникового лазера ($\lambda = 650$ нм) и фокусирующей системы, применяемых в устройствах DVD-RW. Так как диаметр w сфокусированного светового пучка у использованных источников излучения был существенно меньше диаметра вы-



ходной линзы микрообъектива (МО) 3, то смещение оси пучка относительно оси микрообъектива на величину ξ вызывало изменение угла γ падения пучка относительно нормали к плоскости входного торца. Если полагать, что ось волоконного световода 4 параллельна осям МО и лазерного пучка, то при максимальном смещении ξ максимальное значение угла γ можно считать равным апертурному углу микрообъектива. Торец ВС был закреплен на двухкоординатной подвижке 5 предметного стола микроскопа, позволявшей перемещать торец в плоскости, перпендикулярной оси МО. Ана-

логично принципу работы устройства, описанному в работе [6], излучение, отраженное обратно от торца, проходило светофильтровое устройство 6 в тринокулярной насадке, ослабляющий фильтр 7, затем попадало на фотоприемную матрицу телевизионной камеры 8. Путем совмещения фокальной плоскости объектива с плоскостью торца ВС по оси z микрометрическим винтом микроскопа, а также изменения высоты положения микрообъектива относительно торца (т. е. «настройка на резкость изображения»), можно было получить изображение торца световода со сфокусированным на нем лазерным пучком. Использование дополнительной светодиодной подсветки 9, либо замена ТВ камеры 10 на отражающее зеркало позволяли наблюдать на экране монитора ТВ совместное изображение торца ВС и сфокусированного на нем лазерного пучка. Это давало возможность определять диаметр и положение центра лазерного пучка относительно оси световода.

Для исследования распределений интенсивности в ближней зоне дифракции, а также вблизи поверхности выходного торца, между торцом и ТВ камерой 10 размещался микрообъектив; последний был механически соединен с камерой 10 и имел возможность перемещения вдоль оси z .

Существенное отличие представленной методики от ранее упомянутой заключается, прежде всего, в возможности контроля угла ввода излучения γ . Этот угол можно было регулировать изменением положения объектива по оси z (по оптической оси микроскопа) относительно торца. Кроме того, выполнялась предварительная калибровка зависимости угла α наклона пучка относительно оси z от величины смещения ξ . При падении лазерного пучка параллельно оси z изменение расстояния h по оси z (см. рис. 1) не приводит к изменению взаимного расположения изображений торца ВС и сфокусированного пучка. Если же пучок падает на плоскость торца под углом $\alpha \neq 0$, то при изменении h происходит смещение центра изображения пучка относительно изображения торца ВС на расстояние g (рис. 2). Примеры реально полученных изображений для двух различных расстояний h приведены на рис. 3. Угол α можно вычислить с помощью измеренных величин h и g :

$$\alpha = \arctg(g/2h). \quad (1)$$

Такой способ позволяет не только определить угол α падения пучка, но и плоскость падения

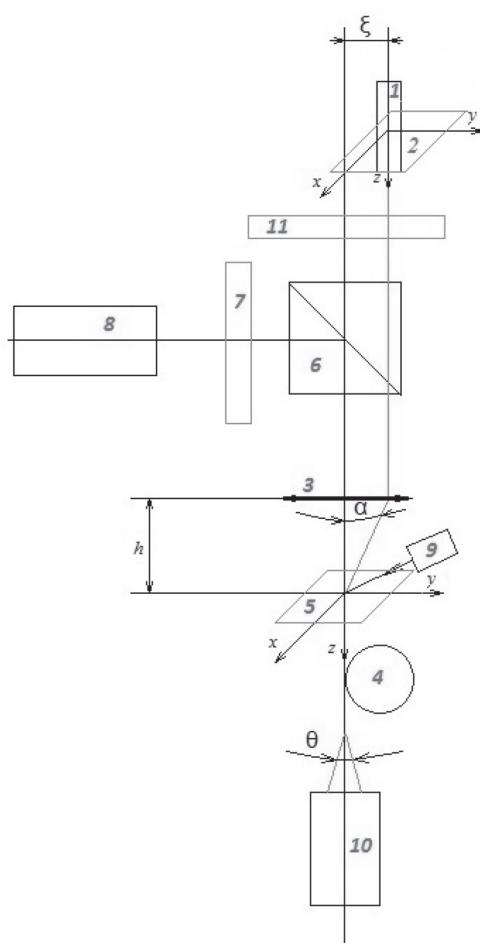


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:

1 – полупроводниковый лазер с фокусирующей системой, 2 – двухкоординатная подвижка, 3 – микрообъектив микроскопа, 4 – волоконный световод, 5 – двухкоординатная подвижка предметного стола микроскопа, 6 – светофильтровое устройство (изображено в упрощенном виде), 7, 11 – светофильтры, 8, 10 – матричные телевизионные камеры, 9 – устройство светодиодной подсветки; ξ – смещение оси лазера относительно оси оптической системы, α – угол ввода излучения, h – расстояние между микрообъективом и торцом световода, θ – угол выхода излучения

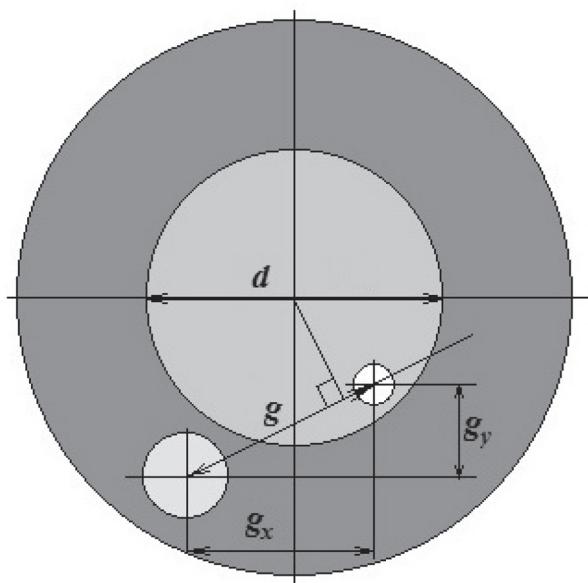


Рис. 2. Схема, поясняющая эффект смещения центра изображения сфокусированного лазерного пучка относительно изображения торца волоконного световода; d – диаметр сердцевины, g_x, g_y – смещение центра пучка по осям x, y соответственно, g – суммарное смещение

пучка, если использовать для расчетов величины проекций g_x и g_y на оси координат.

Калибровка установки. Для калибровки измерений размеров в плоскости xy использовалась кварцевая штриховая мера с шагом деления шкалы 10 мкм. Калибровка по оси z позволяла установить взаимосвязь смещения h с углом β поворота микрометрического винта микроскопа. Она проводилась с использованием двух стеклянных пластинок 1 и 2 (рис. 4) толщиной $H_1 = 200$ мкм (при использовании короткофокусных объективов 20x и 40x) и 800 мкм (при использовании объектива 10x), склеенных между собой, как показано на рис. 4. Для получения изображения в качестве объекта использовались микрочастицы, нанесенные на поверхность P_1 и часть поверхности P_3 , свободной от пластиинки 1. Сфокусированные изображения микрочастиц на указанных поверхностях были последовательно получены путем перемещения объектива по оси z . В результате удалось сопоставить угол поворота β с измеренной толщиной $H_s = H_1 - H_2$ (см. рис. 4).

Для того, чтобы найти зависимость $\alpha(\xi)$, была выполнена ее предварительная калибровка: микротрубку перемещали по оси z (в пределах 50 мм) и измеряли смещение центра пучка в плоскости предметного стола микроскопа. При этом были

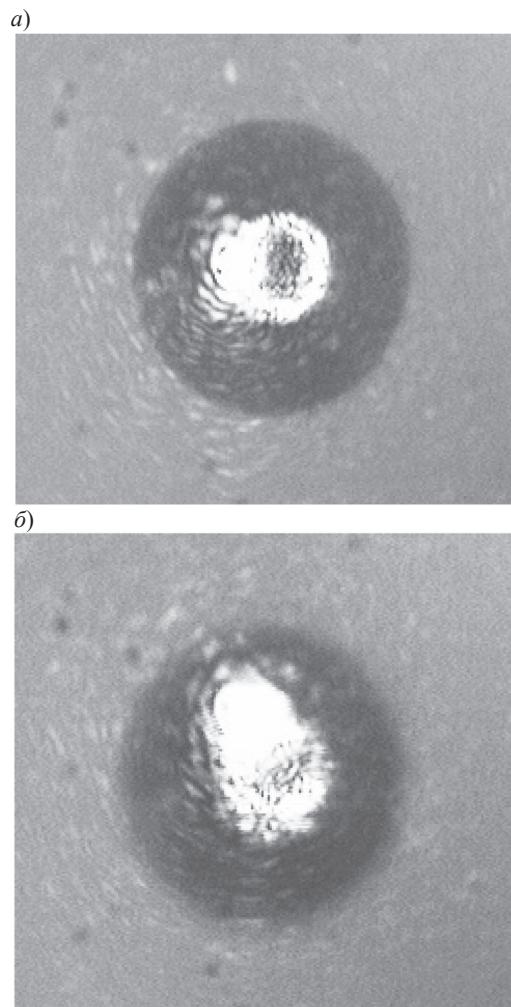


Рис. 3. Изображения лазерного пучка на торце световода при $\gamma = 9,5^\circ$ для двух различных расстояний h , мкм: 0 (а), 73 (б).

Темная круговая область соответствует отражающей оболочке световода, светлая с темным кругом в центре – сердцевине, яркое пятно – сфокусированный лазерный пучок

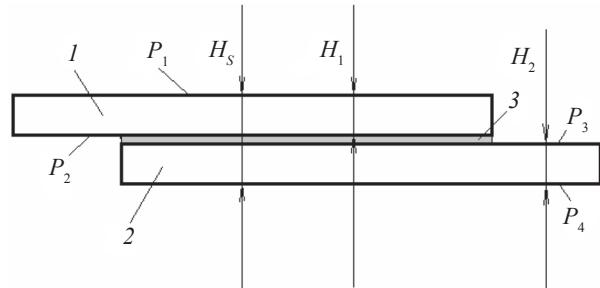


Рис. 4. Схема обозначений поверхностей и геометрических размеров: 1, 2 – стеклянные пластиинки, 3 – клеевой слой; H_1, H_2, H_s – величины толщины пластиинок 1, 2 и их суммарной толщины после склеивания; P_1-P_4 – поверхности пластиинок



найдены координаты подвижки 2 (см. рис. 1) – ξ_x , ξ_y , при которых лазерный пучок был параллелен оптической оси z микроскопа. При данном положении подвижки производилась юстировка углового положения плоскости торца ВС: изменялась высота h , контролировалось смещение центра пучка, использовались угловые регулировки перемещения стола с закрепленным на нем световодом. В результате было достигнуто положение ВС, когда плоскость его торца была перпендикулярна оси z и положение лазерного пучка относительно этого торца оставалось неизменным.

Контроль параметров ввода излучения.

Величина смещения g , а также проекции g_x и g_y определялись на основе калибровки расстояния в плоскости xy . В частности, для случая, представленного на рис. 3, были найдены значения углов: $\alpha = 9,5^\circ$, $\alpha_x = 2,9^\circ$, $\alpha_y = 9,1^\circ$, где α_x , α_y – углы, соответствующие проекциям смещения g_x , g_y .

Далее, с целью выбора оптимальной интенсивности пучка для работы ТВ камеры 7 и визуального контроля изображений при определении размеров сфокусированного лазерного пучка на торце ВС, казалось бы, целесообразно использовать ослабляющий светофильтр 10 (см. рис. 1). Однако случайное изменение угла поворота фильтра 10 относительно лазерного пучка приводит к изменению угла ввода излучения в световод. Поэтому при определении местоположения пучка на торце ВС в процессе проведения измерений фильтр 10 не использовался, а применялся фильтр 6. Это делало неэффективным использование светодиодной подсветки, но позволяло исключать источник дополнительных погрешностей измерений.

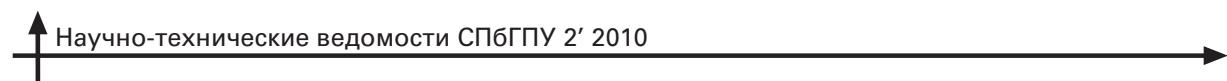
Оценка угла наклона лазерного пучка производилась также другим способом: воздушное пространство между торцом ВС и микрообъективом микроскопа заполнялось рассеивающими частицами дыма, а затем регистрировалось визуализированное изображение луча. Основную погрешность измерений в этом случае вносила неперпендикулярность плоскости поверхности торца ВС к оси микрообъектива.

Получение распределений интенсивности излучения

Исследования проводились на градиентных волоконных световодах с различными профилями показателя преломления: параболическим (диаметры d сердцевины и отражающей оболочки

равны соответственно 50 и 125 мкм), а также ступенчатым (400 и 1000 мкм). Распределения интенсивности выходящего излучения были получены при различных углах наклона γ сфокусированного лазерного пучка ($0 \leq \gamma \leq \gamma_c$, где γ_c – апертурный угол ВС) и различных величинах смещения ρ центра пучка относительно оси ВС ($0 \leq \rho \leq d/2$). Необходимо отметить, что были использованы ВС различной длины с концевыми соединителями типа «FC-PC» со стандартной полировкой поверхности торцов в виде сферической поверхности [12] с радиусом закругления 10–25 мм. Изменение угла ввода $\Delta\gamma$, относительно оси, обусловленное сферичностью поверхностей торцов, не должно превышать $0,5^\circ$ в пределах сердцевины ВС (при максимально допустимом смещении вершины поверхности относительно оси ВС, равном 50 мкм). Указанная величина $\Delta\gamma$ вносит дополнительную погрешность измерений, если угол ввода γ определяется только при одном положении сфокусированного пятна на торце. Однако на практике (в простейшем приближении) можно полагать $\gamma \approx \alpha$, а при необходимости более точных измерений – определять угол α в нескольких точках сердцевины, включая точку на оси и точки на границе сердцевины и отражающей оболочки ВС.

При различных углах γ и положениях ρ падающего на торец ВС лазерного пучка были сохранены видеоизображения пространственных распределений интенсивности $I(\theta, \phi)$, где θ – угол выхода излучения, ϕ – азимутальный угол, в дальней и ближней зонах дифракции. Примеры полученных распределений интенсивности $I(\theta, \phi)$ приведены на рис. 5. Видно, что распределения представляют собой пятнистую картину со случайным расположением светлых и темных пятен (спектральную картину), и даже без проведения каких-либо расчетов очевидно, что распределения на рис. 5, а и б имеют различные пространственные статистические характеристики. Одна из пространственных характеристик спектр-структур – это характерный размер зерна спектр-пятен (ΔI), который можно определить, например, с помощью автокорреляционной функции распределения интенсивности. В общем случае, характерные размеры пятен, измеренные при постоянном угле выхода излучения ($\theta = \text{const}$) отличаются от характерных размеров, измеренных при постоянном азимутальном угле ($\phi = \text{const}$). Данный вид анизотропии спектр-структур характерен для пространственных распределений, образующихся в результате



интерференции оптических вихрей различного порядка с различными радиальными индексами при одинаковых направлениях вращения волнового фронта [3–5]. При условии равномерного возбуждения мод (это также относится и к оптическим вихрям) для случая интерференции вихрей с одинаковыми направлениями вращения должно выполняться равенство [3–5]:

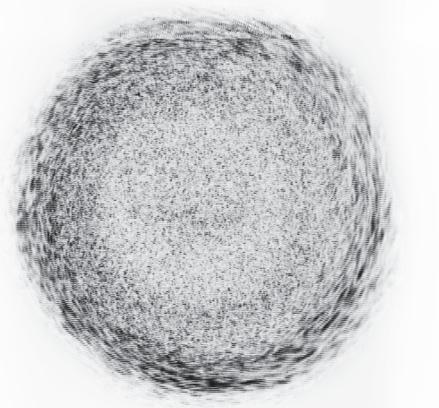
$$\Delta I_{\theta=\text{const}} / \Delta I_{\varphi=\text{const}} = 2, \quad (2)$$

а для обычных волноводных мод –

$$\Delta I_{\theta=\text{const}} / \Delta I_{\varphi=\text{const}} = 1. \quad (3)$$

Однако рассмотренный метод ввода излучения в волоконный световод осуществляет селективное возбуждение сравнительно узкой группы

a)



б)



Рис. 5. Распределения интенсивности лазерного излучения, выходящего из ВС с различными профилями показателя преломления: *a* – ступенчатым, *б* – параболическим.

Дальняя зона дифракции, изображение инвертировано;
 $\lambda = 650$ нм, $\rho = 0,75d/2$, $\gamma = 11^\circ$;
размеры ВС: $d = 400$ мкм, $l = 4,5$ м (*a*); $d = 50$ мкм, $l = 0,5$ м (*б*)

волноводных мод (по отношению к максимально возможному их количеству) [6]. Это позволяет предположить, что при вводе наклонного и смещенного относительно оси ВС пучка происходит селективное возбуждение сравнительно узкой группы оптических вихрей. Поэтому пространственные характеристики спекл-структур определялись модовым составом излучения, распространяющегося по ВС. Для градиентных световодов параметры полученных спекл-структур зависели как от положения сфокусированного пучка на торце ВС, так и от угла наклона пучка. Для всех исследованных световодов при возбуждении оптических вихрей параметры спекл-структур зависели также от угла выхода излучения θ . Для ВС со ступенчатым профилем показателя преломления отношение $\Delta I_{\theta=\text{const}} / \Delta I_{\varphi=\text{const}} = 1$ возрастало при увеличении θ , для градиентных ВС указанная зависимость была более сложной.

Решение обратной задачи – определения типов распространяющихся волн по распределениям интенсивности выходящего излучения для градиентных ВС – значительно сложнее, чем для ВС со ступенчатым профилем показателя преломления при равномерном возбуждении мод. Поэтому для детального анализа полученных данных необходимо было разработать специальную методику решения рассматриваемой обратной задачи. Можно предположить, что существенное различие пространственных статистических характеристик спекл-структур, а также усредненных по фазам волн распределений интенсивности излучения при различных условиях возбуждения позволят анализировать характеристики распространения как обычных волноводных мод, так и оптических вихрей.

Существующие интерферометрические методы выявления одиночных вихрей, а также групп оптических вихрей [5, 13] сложно реализовать в лабораторных условиях, особенно при использовании полупроводниковых лазеров с малой длиной когерентности. Поэтому был предложен иной способ, основанный на анализе трансформации спекл-структур при изменении расстояния от выходного торца до плоскости наблюдения.

Известно, что волновой фронт оптических вихрей в пространстве имеет спиралеобразную форму. Это позволяет сделать предположение о том, что спекл-структуры, образующиеся в результате интерференции ОВ с одинаковыми направлениями вращения волнового фронта, в про-



странстве также будут иметь спиралеобразный вид. Следовательно, при перемещении плоскости наблюдения вдоль оси волокна z на величину Δz как внутри световода, так и в свободном пространстве вблизи выходного торца можно ожидать поворота спекл-пятен на угол $\Delta\phi$, зависящий от величины Δz . Экспериментальные исследования показали, что при условиях ввода, соответствующих возбуждению оптических вихрей, имеет место указанный поворот спекл-структур, а при возбуждении обычных волноводных мод – наблюдается только хаотическая трансформация спекл-пятен. Примеры полученных распределений при трех различных расстояниях от торца ВС до микрообъектива для группы оптических вихрей и обычных волноводных мод приведены на рис. 6. Угол поворота $\Delta\phi$ для распределений, представленных на рис. 6, $g-e$, составляет приблизительно 25° при смещении на 80 мкм (т. е. 0,3 град/мкм). Распределения, представленные на рис. 6, $a-f$, не имеют преимущественного направления поворота при изменении Δz . Аналогичные результаты были получены при других параметрах сфокусированного лазерного пучка, а также при использовании различных микрообъективов и световодов.

Распределение интенсивности в виде кольца в ближней зоне дифракции для градиентного световода (рис. 6, $g-e$) свидетельствует о преимущественном распространении немериональных лучей [14], что с точки зрения волновой теории следует рассматривать как распространение группы оптических вихрей [2]. Возбуждение оптических вихрей в волоконных световодах со ступенчатым профилем показателя преломления наклонным сфокусированным лазерным пучком, смещенным относительно оси ВС, рассмотрено и обосновано в работах [4, 5]. Проведенные исследования позволяют считать подтвержденной

гипотезу о возможности возбуждения оптических вихрей в градиентных ВС сфокусированным пучком. Также установлено, что в градиентных ВС при указанных выше условиях ввода, в отличие от ВС со ступенчатым профилем показателя преломления, излучение группы оптических вихрей с одинаковыми направлениями вращения могут не образовывать анизотропных спекл-структур в дальней зоне дифракции (см. рис. 5, 6).

Предложенная методика ввода оптического излучения в волоконные световоды позволяет создавать оптические вихри с изменяющимися параметрами, а это открывает новые возможности для исследования свойств волоконных световодов, прозрачных сред с винтовыми внутренними напряжениями, микрочастиц и биологических объектов.

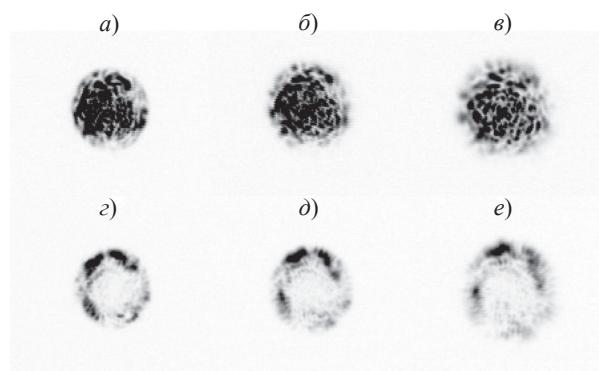
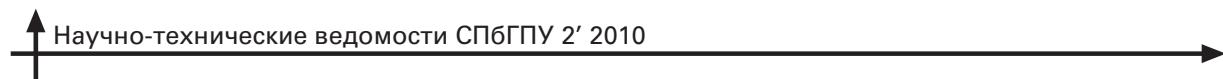


Рис. 6. Распределения интенсивности выходящего из градиентного ВС излучения (инвертированные изображения) при вводе сфокусированного лазерного пучка под углом $\gamma = 11^\circ$ к оси световода на различных расстояниях от выходного торца: $a-f$ – центр сфокусированного пучка совпадает с осью ВС; $g-e$ – центр пучка смещен на 20 мкм относительно оси ($\rho = 0,75d/2$); ближняя зона Δz , мкм: 0 (a, g), 40 (b, d), 80 (c, e),

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сойфер, В.А. Оптическое манипулирование микрообъектами: достижения и новые возможности, порожденные дифракционной оптикой [Текст] / В.А.Сойфер, В.В. Котляр, С.Н. Хонина // Физика элементарных частиц и атомного ядра. – 2004. – Т. 35. – № 6. – С. 1368–1432.
2. Alexeyev, A.N. Optical vortices and the flow of their angular momentum in a multimode fiber [Text] / A.N. Alexeyev, T.A. Fadeyeva, A.V. Volyar, M.S. Soskin // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. – 1998. – Vol. 1. – № 1. – P. 82–89.



3. **Кизеветтер, Д.В.** Численное моделирование спекл-структурь, образованной излучением оптических вихрей многомодового волоконного световода [Текст] / Д.В. Кизеветтер // Квантовая электроника. – 2008. – Т. 38. – № 2. – С. 168–171.
4. **Кизеветтер, Д.В.** Характеристики спекл-структур излучения волоконных световодов [Текст] / Д.В. Кизеветтер // Научно-технические ведомости СПбГПУ. – 2008. – № 3. – С. 72–80.
5. **Кизеветтер, Д.В.** Поляризационные и интерференционные эффекты в многомодовых волоконных световодах [Текст]: Дисс. д-ра физ.-мат. н.: 01.04.21: защ. 19.03.2009: утв. 13.11.2009 / Кизеветтер Дмитрий Владимирович. – СПб., 2008. – 227 с. – Библиогр.: С. 160.
6. **Кугушев, А.И.** Дифференциальные характеристики многомодовых градиентных волоконных световодов и методы их измерения [Текст] / А.И. Кугушев, А.А. Керимов, М.Я. Яковлев // Зарубежная радиоэлектроника. – 1983. – № 7. – С. 54–74.
7. **Saijonmaa, J.** Selective excitation of parabolic-index optical fibers by Gaussian beams [Text] / J. Saijonmaa, A.B. Sharma, S.J. Halme // Appl. Optics. – 1980. – Vol. 19. – № 14. – P. 2442–2452.
8. **Chandra, R.** Mode excitation by titled and offset Gaussian beams in W-type fibers [Text] / R. Chandra, K. Thyagarajan, A.K. Ghatak // Appl. Optics. – 1978. – Vol. 17. – № 17. – P. 2842–2849.
9. **Imai, M.** Excitation of fundamental and low-order modes of optical fiber waveguides by Gaussian beams. 1. Titled beams [Text] / M. Imai, E. Hara // Appl. Optics. – 1974. – Vol. 13. – № 8. – P. 1893–1921.
10. **Imai, M.** Excitation of fundamental and low-order modes of optical fiber waveguides by Gaussian beams. 2. Offset Beams [Text] / M. Imai, E. Hara // Appl. Optics. – 1975. – Vol. 14. – № 1. – P. 169–173.
11. **Stone, F.T.** Launch dependent loss in short lengths of graded-index multimode fibers [Text] / F.T. Stone // Appl. Optics. – 1978. – Vol. 17. – № 17. – P. 2825–2830.
12. **Портнов, Э.Л.** Оптические кабели связи и пассивные компоненты волоконно-оптических линий связи [Текст] / Э.Л. Портнов. – М.: «Горячая линия – Телеком», 2007. – 468 с.
13. **Короленко, П.В.** Оптические вихри [Текст] / П.В. Короленко // Соросовский образовательный журнал. – 1998. – № 6. – С. 94–99.
14. **Унгер, Х.Г.** Планарные и волоконные оптические волноводы [Текст]: пер. с англ. / Х.Г. Унгер. – М.: «Мир», 1980. – 656 с.

УДК 57+615.47+621.373.8+535.8

Д.А. Фадеев, А.Ю. Сетейкин

АНАЛИЗ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕДАХ С ПРОСТРАНСТВЕННЫМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ

В настоящее время перспективным направлением оптики признается развитие неинвазивных методов оптической диагностики биологических многократно рассеивающих сред, исследование которых осложнено эффектами анизотропии оптических параметров и структурных микро- и макроиноднородностей. Следует отметить, что биологические ткани – это динамически изменяющиеся объекты, что более усложняет анализ характеристи-

стик и реконструкцию неоднородностей. Также важно, что строение живой материи накладывает ограничения на дозу облучения, плотность мощности и тип излучения.

Чтобы моделировать визуализацию подобных объектов, наиболее целесообразно использовать статистический метод Монте-Карло [1–5], в основе которого лежит представление распространения лазерного излучения в виде пакетов фотонов;



последним присваивается определенный статистический вес, который уменьшается при каждом акте взаимодействия со средой. Таким образом, данный метод основан на расчете случайных траекторий фотонов без учета волновых свойств, таких как фаза и поляризация. Метод Монте-Карло довольно прост в реализации, гибок и дает результаты с нужной точностью за приемлемое время.

Теоретическая модель

Биологическую среду, хотя она и неоднородна, можно разбить на достаточно малые подобласти, в пределах которых оптические свойства среды постоянны. В зависимости от условий моделирования, таких как уровень детализации, затраченное время на построение результата взаимодействия и т. п., размеры подобластей будут варьироваться. Если построить доскональную модель биологической ткани, например кожи человека с прорисовкой систем питания и выделения, то решение данной задачи может быть достаточно затруднительным, но не менее интересным.

При моделировании биологической среды необходимо особое внимание обращать на морфологические особенности ее строения. Их корректный учет важен для принятия логически верных граничных условий моделирования. Поверхностная ткань имеет сложное микроскопическое строение (рис. 1), и в ней можно выделить две части, различные по строению и физиологически, – эпидермис и дерму. Последняя в свою очередь (в связи со специфическим строением кровеносной сети) делится на папиллярную дерму, дерму

с поверхностным сплетением сосудов, ретикулярную дерму, дерму с глубинным сплетением сосудов и гиподерму. Кроме того, глубинные слои могут включать в себя локально-ограниченные области опухолевых и/или некротических тканей; они проявляются как оптические неоднородности и представляют собой локальные объемные объекты.

В данной работе в качестве объекта исследования выбрана кожа человека. Она представлена в виде среды с шестью слоями, толщина и оптические параметры которых приведены в таблице. Произвольно расположенные микро- и макрообъекты оптически реализуются как неоднородности рассеяния или поглощения путем вариации приведенных статистических коэффициентов [6].

Параметры слоев поверхностной биоткани ($\lambda = 0,633$ мкм)

Слой	Z , мкм	n	μ_a , мм ⁻¹	μ_s , мм ⁻¹	g
Эпидермис	96	1,34	0,088	90	0,85
Папиллярная дерма	192	1,39	0,015	18,7	0,90
Дерма с поверхностным сплетением сосудов	192	1,40	0,013	35	0,95
Ретикулярная дерма	842	1,39	0,01	19	0,76
Дерма с глубинным сплетением сосудов	576	1,40	0,011	25	0,95
Гиподерма	16500	1,44	0,011	13	0,80

Обозначения: Z – толщина слоя; n – относительный показатель преломления; μ_a , μ_s – коэффициенты поглощения и рассеяния; g – параметр анизотропии

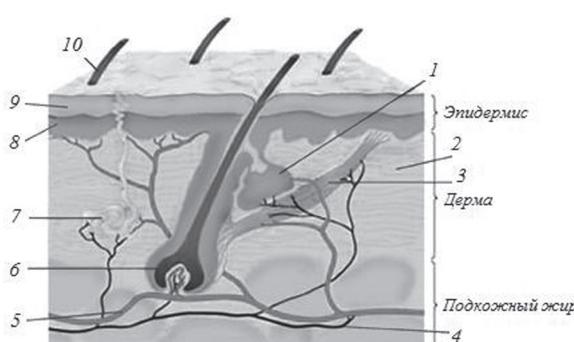
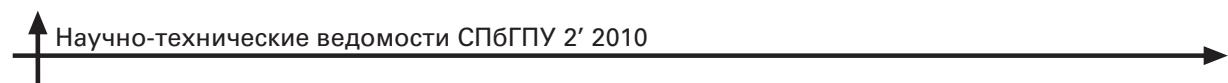


Рис. 1. Строение поверхностной кожной биоткани:
1 – сальные железы, 2 – коллагены и эластичные волокна, 3 – мышцы кожи и кожных желез, 4 – нервные волокна, 5 – кровеносные сосуды, 6 – волосяные луковицы, 7 – потовые железы, 8 – базальная мембрана, 9 – эпителий, 10 – волосы

Точность прогнозирования результатов, получаемых с помощью подобной модели, существенным образом зависит от используемых феноменологических коэффициентов и граничных условий, что в свою очередь требует детального исследования спектральных характеристик биообъектов и проведения физических экспериментов по идентификации и уточнению оптических и пространственных параметров. Поэтому в данном случае использование исходных параметров модели предполагает лишь качественное совпадение данных физических и теоретических исследований биоткани.

Учет локальных неоднородностей среды, как уже отмечалось, существенно усложняет математическую модель. Если принять во внимание, что



поперечное сечение падающего лазерного излучения, как правило, имеет величину от нескольких миллиметров (узкие пучки) до нескольких сантиметров (сканирование в широких пучках), то в большинстве численных экспериментов логично пренебречь вариацией толщины слоя в поперечном сечении в пределах лазерного луча. Поэтому в данной модели граница раздела слоев считалась плоской.

Далее, как предполагала модель, лазерный пучок с длиной волны $\lambda = 0,633$ мкм падал под прямым углом к поверхности биообъекта. Объем модельной среды превышал область распространения излучения при заданной конфигурации источника.

Поглощением и рассеянием в окружающей среде (между исследуемой средой и источником) пренебрегалось.

Объем многослойной среды и локальных неоднородностей был поделен на условно-элементарные ячейки, в каждой из которых вычислялась доля поглощенной энергии n_k (k – номер ячейки):

$$n_k(z) = \frac{Q_k(z)}{Q_\Sigma} \quad (1)$$

где $Q_k(z)$ – поглощенная энергия в ячейке k , которая нормируется на суммарную излученную энергию Q_Σ (выражена в статистическом весе пакетов фотонов).

Таким образом, распределение поглощенного излучения внутри среды вычисляется как

$$Q(z) = \sum_k n_k(z). \quad (2)$$

Данная характеристика $Q(z)$ выражает долю энергии, поглощенную определенным слоем условно-элементарных ячеек.

Для выявления основных тенденций при распространении излучения в биоткани были исследованы две принципиально разные модели неоднородностей: поглощения и рассеяния. Первая соответствует участку некротической ткани (или гематомы) и характеризуется большим коэффициентом поглощения относительно окружающей ткани. Вторая модель (неоднородность рассеяния) проявляет себя преимущественно в виде повышенного коэффициента рассеяния, что соответствует модели опухолевого образования.

Вертикальные линии на рис. 2 (и далее на рис. 3) соответствуют расположению границ между слоями поверхности биоткани. Локальные

неоднородности располагаются в гиподерме, и они представлены на рис. 2, 3. Под глубиной залегания неоднородности z_c подразумевается расстояние от поверхности биоткани до центра неоднородности, величина варьируется. Диаметр неоднородностей d также варьируется.

Видно (см. рис. 2), что наличие локальной неоднородности приводит к появлению пика (кривая 1) или провала (кривая 2) в распределении плотности поглощенной энергии в области локализации соответственно неоднородности поглощения или рассеяния.

Исследование зависимости плотности поглощенной энергии от параметров неоднородности

В целях создания алгоритма объемной визуализации многократно рассеивающей среды значительный интерес представляет определение базовых зависимостей характеристик от оптических и геометрических параметров неоднородностей. В настоящей работе были исследованы зависимости от коэффициентов поглощения, эффективного диаметра и глубины залегания неоднородностей. В большинстве реальных случаев данные факты проявляются в совокупности, однако для выявления основных тенденций и наиболее значимых

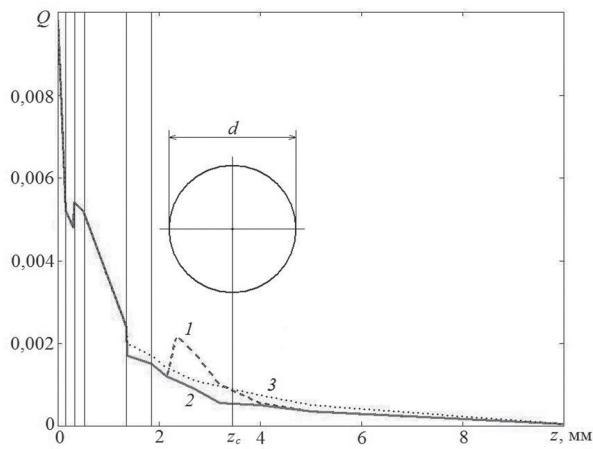


Рис. 2. Распределения нормализованной плотности поглощенной энергии по глубине биологической среды; модели неоднородности: поглощения (1), рассеяния (2); 3 – отсутствие неоднородностей. Окружность – объект локальной неоднородности диаметром $d = 2,4$ мм с глубиной залегания $z_c = 3,4$ мм. $1 - \mu_a = 80 \text{ мм}^{-1}$; $2 - \mu_s = 80 \text{ мм}^{-1}$



факторов, численные эксперименты проводились для тождественных неоднородностей поглощения (рассеяния), различающихся по одному из указанных параметров.

Все зависимости получены для относительных оптических параметров неоднородностей, которые нормировались на среднее известное значение соответствующего параметра.

Для выявления влияния коэффициентов поглощения на зависимость $Q(z)$ были проведены численные эксперименты с неоднородностями поглощения идентичного диаметра и локализации. На рис. 3, *a* представлена картина распределения плотности поглощенной энергии в объеме поверхности биоткани для различных коэффициентов поглощения. Видно, что увеличение относительного коэффициента поглощения неоднородности по сравнению со средним аналогичным показателем здоровой ткани (см. кривую 3 на рис. 2) ведет к возрастанию пика поглощения.

В результате анализа моделей распространения лазерного излучения в биологических средах методом Монте-Карло, а также некоторых работ [7] можно предположить, что при увеличении коэффициента рассеяния для локальной неоднородности пик плотности поглощения $Q(z)$, соответствующий локализации неоднородности, должен уменьшаться в высоту, сужаться и смещаться к поверхности кожного покрова. Это связано с тем, что для областей с большим параметром рассеяния вероятность поглощения части веса фотона будет меньше, то есть данная область будет больше рассеивать энергию, чем поглощать.

Анализ влияния эффективного диаметра и глубины залегания неоднородности на распределение характеристик $Q(z)$ проводился на примере сферической неоднородности поглощения с вариацией ее диаметра или глубины локализации. Оптические параметры неоднородности соответствовали кривой 1 плотности поглощения на рис. 3.

Тождественные неоднородности, различающиеся по диаметру, идентифицировались по первой сферической границе, а именно по точке, наиболее близко расположенной к поверхности биологической ткани. В рамках описанного допущения представленная зависимость распределения поглощения по глубине (рис. 3, *б*) в действительности есть функция двух переменных – диаметра и глубины залегания неоднородности. При этом ясно, что основной вклад в распределение поглощения по глубине вносят первые слои неоднородности.

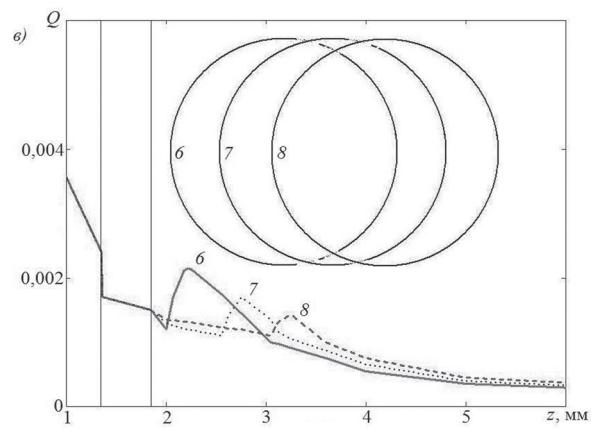
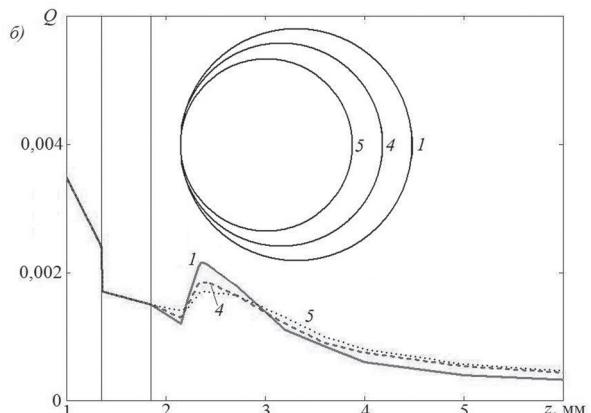
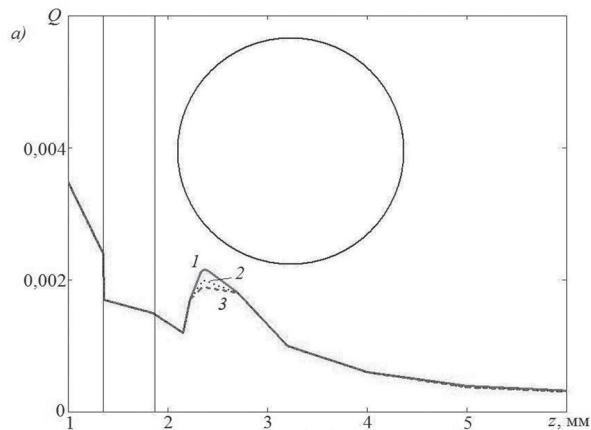


Рис. 3. Распределения нормализованной плотности поглощенной энергии по глубине биологической среды в зависимости от оптических (*а*) и геометрических (*б*, *в*) параметров неоднородности; *а* – значения относительного коэффициента поглощения, мм^{-1} : 80 (1), 60 (2), 40 (3); $d = 2,4 \text{ мм}$; $z_c = 3,4 \text{ мм}$; *б* – d и z_c , мм : 2,4 и 3,4 (1); 2,0 и 3,2 (4); 1,6 и 3,0 (5); $\mu_a = 80 \text{ мм}^{-1}$; *в* – z_c , мм : 3,2 (6); 3,7 (7); 4,2 (8); $d = 2,4 \text{ мм}$; $\mu_a = 80 \text{ мм}^{-1}$

Из сравнения графиков на рис. 3, в видно, что увеличение глубины локализации ведет к уменьшению и размытию пика плотности поглощения.

В заключение необходимо отметить, что созданное описание может быть использовано для разви-

тия общей теории многократного рассеяния низкоинтенсивного лазерного излучения в биологических средах с локализованными неоднородностями; однако оптические параметры модели являются статистическими и нуждаются в уточнении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Тучин, В.В.** Лазеры и волоконная оптика в биомедицинских исследованиях [Текст] / В.В. Тучин. – Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 1998. – 348 с.
2. **Tuchin, V.V.** Tissue optics: Light scattering methods and instruments for medical diagnosis [Text] / V.V. Tuchin. – Bellingham, Washington, USA: SPIE PRESS, 2000.– 352 p.
3. **Tuchin, V.V.** Handbook of optical biomedical diagnostics [Text] / V.V. Tuchin. – Bellingham, Washington, USA: SPIE PRESS, 2002.– 1100 p.
4. **Jacques, S.L.** MCML – Monte Carlo modeling of photon transport in multi-layered tissues [Text] / S.L. Jacques, L.-H. Wang, L.-Q. Zheng // Computer Methods and Programs in Biomedicine.– 1995.– Vol. 47.– P. 131–146.
5. **Kuzmin, V.L.** Coherent multiple scattering effects and Monte Carlo method [Text] / V.L. Kuzmin, I.V. Meglinski // JETP Letters.– 2004. – Vol. 79.– № 3.– P. 109–112.
6. **Sindyaeva, A.R.** Localization of tissue pathological changes [Text] / A.R. Sindyaeva, V.P. Zakharov // Proceedings of SPIE. – 2007. – Vol. 6734. – P. 67341C.12–67341C.18
7. **Сетейкин, А.Ю.** Анализ методом Монте-Карло процессов распространения лазерного излучения в многослойных биоматериалах [Текст] / А.Ю. Сетейкин // Известия вузов. Физика.– 2005. – № 3. – С. 53–57.



Физическое материаловедение

УДК 537.9

И.А. Голубева, С.В. Ланкин, Е.А. Ванина, А.Н. Киселёва.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ЗАКАЛКИ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИЧЕСКИХ ОКСИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Современное развитие твердотельной электроники, приборостроения, электрорадиотехники требует внедрения новых высокоэффективных материалов, надежно работающих в сложных экстремальных условиях при воздействии на них высоких и низких температур, механических и электрических напряжений, вакуума, радиации самых различных видов и интенсивности, повышенной влажности и т. п. Поэтому одной из важнейших проблем физики конденсированного состояния, материаловедения является необходимость прогнозирования изменения свойств материалов при внешних воздействиях, вызывающих образование дефектов кристаллической структуры.

В настоящее время большой интерес вызывают исследования электрофизических свойств керамических диэлектриков на основе корунда [1–4]. Это вызвано тем, что корундовая керамика обладает большим удельным сопротивлением, малыми диэлектрическими потерями и имеет при этом высокую механическую и электрическую прочность. Согласно литературным данным [3, 5] электропроводность керамических диэлектриков зависит от качества обработки поверхности образца, присутствия влаги, примесей, воздействия больших механических и температурных градиентов.

При исследовании зависимости электрических характеристик корундовой керамики от температуры установлено [1–3], что в области небольших температур (300 – 350 К) изменения значений диэлектрической проницаемости ϵ и диэлектрических потерь $\text{tg } \delta$ зависят от условий термообработки (отжига или закалки). Диэлектрические потери могут быть обусловлены поляризацией, сквозной электропроводностью, неоднородностью структуры [2, 3].

Керамика относится к неоднородным диэлектрикам и представляет собой сложную многофазную систему. В ее составе различают несколько фаз: кристаллическую, аморфную (стеклофаза) и газовую (газы в закрытых порах). Керамические материалы обладают значительной электропроводностью, главным образом, за счет стеклофазы. Исследования показали, что в широком диапазоне температур механизмы проводимости керамик имеют такую же природу, как и таковые у стекол [3, 5, 6]. Корундовая керамика, содержащая большое количество аморфной фазы с щелочными металлами (например ультрафарфор УФ-46), обладает значительной проводимостью, и наоборот, мелкокристаллический керамический материал, содержащий малое количество аморфной фазы, имеет низкую электропроводность [3, 5].

Представляет интерес поведение электрофизических характеристик при резких перепадах температур, поскольку существующие результаты таких исследований мало изучены. Поэтому целью настоящей работы является экспериментальное исследование влияния термического удара (закалки) на электрофизические свойства керамических диэлектриков на основе корунда.

Исследованы керамические образцы УФ-46, ГБ-7, микролит (МК) с содержанием корунда $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ от 76 до 99 вес. % [1–3]. Для определения электропроводности были использованы образцы цилиндрической формы диаметром от 15 до 20 мм, толщиной 1–3 мм, изготовленные промышленным способом.

Электрические измерения образцов на постоянном токе осуществлялись по трехэлектродной методике, традиционно применяющейся в исследованиях электрофизических свойств диэлектрических материалов [7]. Основания исследуемых

Таблица 1

Температурная зависимость объемного сопротивления керамик ГБ-7 и МК

T, K	$R_V \cdot 10^7$ Ом			
	ГБ-7		МК	
	до закалки	после закалки	до закалки	после закалки
293	720	495	7000	435
353	2830	2000	9000	2500
393	4700	1080	3000	1700
493	23,0	3,0	8,1	2,7
593	1,40	0,45	0,90	0,25
693	0,24	0,19	0,23	0,096
793	0,096	0,071	0,078	0,057
893	0,096	0,027	0,044	0,030
923	0,063	0,015	0,027	0,021

образцов покрывались серебряной пастой путем вжигания при температуре 400 °С. Измерения объемного сопротивления R_V проводились с помощью тераомметра Е6-13А с рабочим напряжением 10 В. Погрешность электрических измерений составляла не более 5 %.

Диэлектрические измерения образцов на переменном токе проводились по двухэлектродной методике при комнатной температуре. На частотах 10^3 – 10^5 Гц применялся цифровой измеритель импеданса LCR-819, на частоте 10^6 Гц – Е7-12 [8]. Погрешность измерений диэлектрической постоянной ϵ составляла 2–5 %. Перед измерениями для удаления адсорбированной воды образцы прогревались в муфельной печи при температуре 300–350 °С в течение часа. Точность измерения температуры хромель-алюмелевой термопарой составляла $\pm 0,1$ °С.

Измерения электрических характеристик керамических образцов проводились до и после закалки. В результате закалки при определенных условиях может образоваться неравновесная структура. К этим условиям относятся наличие материала с переменной растворимостью, а также явлений полиморфного превращения и распада высокотемпературного твердого раствора. Для получения неравновесной структуры сплав нагревают выше температуры фазового перехода в твердом состоянии, после чего быстро охлаждают, чтобы предотвратить равновесное превращение материала при охлаждении. Закалка керамики проводилась при резком охлаждении образца от 450 до 20 °С в водопроводной воде в течение 30 минут.

Расчет электропроводности проводился по формуле:

$$\sigma = \frac{1}{R_V} \cdot \frac{h}{S}, \quad (1)$$

где R_V – измеряемое сопротивление образца, h , S – высота и площадь основания образца.

Полученные значения сопротивлений для исследуемых образцов керамики до и после закалки представлены в табл. 1. При нагревании влажного образца сначала сопротивление падает вследствие диссоциации примесей в воде, затем происходит удаление влаги – сушка. При последующем нагревании наблюдается экспоненциальное снижение сопротивления с ростом температуры, характерное для диэлектриков.

Таблица 1

Температурная зависимость объемного сопротивления керамик ГБ-7 и МК

T, K	$R_V \cdot 10^7$ Ом			
	ГБ-7		МК	
	до закалки	после закалки	до закалки	после закалки
293	720	495	7000	435
353	2830	2000	9000	2500
393	4700	1080	3000	1700
493	23,0	3,0	8,1	2,7
593	1,40	0,45	0,90	0,25
693	0,24	0,19	0,23	0,096
793	0,096	0,071	0,078	0,057
893	0,096	0,027	0,044	0,030
923	0,063	0,015	0,027	0,021

Расчет значений энергии активации проводился по традиционной методике [5, 8] – по углу наклона отрезков, выделенных на графиках логарифмической зависимости электропроводности от обратного значения температуры $\ln \sigma = f(T^{-1})$:

$$\Delta E = 0,2 \operatorname{tg} \alpha, \quad (2)$$

где α – угол наклона отрезков, ΔE , эВ – энергия активации.

На рис. 1 приведена экспериментально полученная логарифмическая зависимость удельной проводимости керамики УФ-46 от обратного значения температуры. Три температурных участка на графике соответствуют разным значениям энергии активации (табл. 2).

Таблица 2

Значения энергии активации электропроводности керамик ГБ-7 и МК

Температурный интервал, °С	ΔE , эВ				
	УФ-46	ГБ-7		МК	
		до закалки	после закалки	до закалки	после закалки
140–280	1,47	2,045	2,324	1,95	1,04
280–560	0,46	1,307	0,652	0,60	0,90
> 560	2,60	1,430	1,530	1,50	2,00

На рис. 2 представлены логарифмические зависимости удельной проводимости образцов керамики ГБ-7 и МК от обратной температуры



до и после закалки. Аналогично данным рис. 1 на графиках можно выделить по три температурных участка, соответствующих разным значениям энергии активации (см. табл. 2). Первый участок (140–280 °C) предположительно связан с примесной проводимостью, второй (280–560 °C) – с ионной проводимостью основного вещества, третий (свыше 560 °C) – с собственной проводимостью [5, 8].

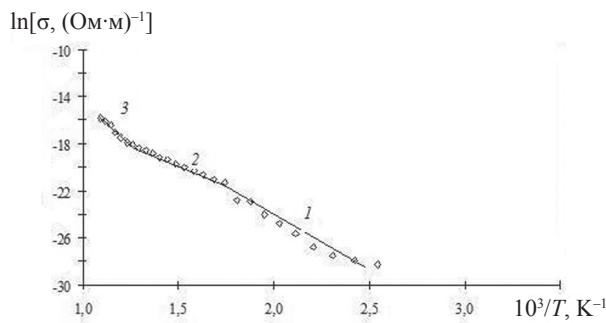


Рис. 1. Температурная зависимость электропроводности керамики УФ-46

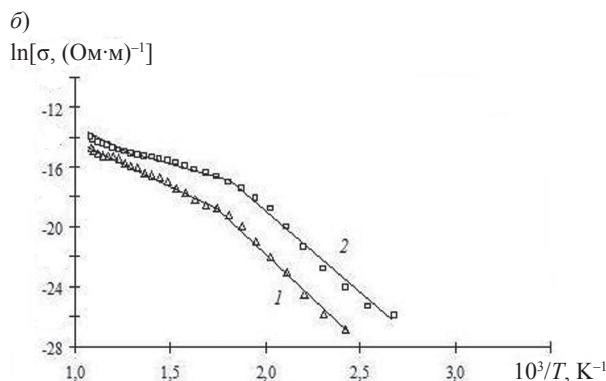
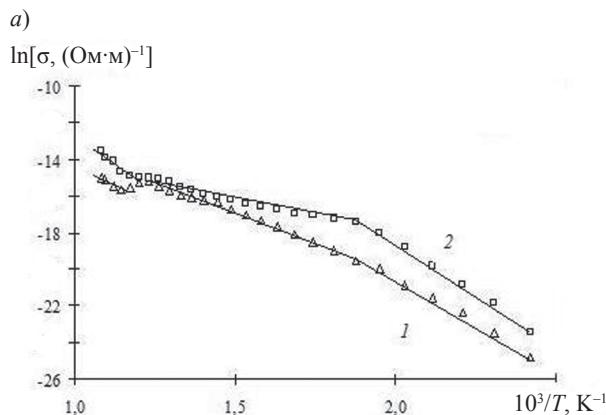


Рис. 2. Температурные зависимости электропроводности образцов керамики ГБ-7 (а) и МК (б):
1 – до закалки, 2 – после закалки

В керамических диэлектриках электропроводность обусловлена главным образом перемещением ионов, освобождаемых под влиянием теплового движения. При малых значениях температуры передвигаются слабозакрепленные ионы, по мере ее увеличения начинают перемещение и некоторые ионы из узлов кристаллической решетки. Как следует из графиков рис. 2 закалка приводит к росту проводимости, что вызвано увеличением дефектности кристаллической структуры и микронапряжений при температурном воздействии [5, 9]. При закалке меняется не только абсолютное значение величины σ , но и энергия ее активации.

На рис. 3 приведены частотные зависимости диэлектрической проницаемости ϵ для исследуемых керамик. Как следует из приведенных графиков, керамика МК имеет несколько меньшее значение ϵ по сравнению с ГБ-7, что можно объяснить меньшим содержанием примесей и стеклофазы.

По результатам экспериментальных исследований можно сделать следующие выводы:

1. В результате закалки происходит увеличение проводимости σ . При этом наблюдается изменение энергии активации на величину от 6,0 до 50,0 %.

2. Незакаленная керамика МК имеет несколько меньшие значения диэлектрической проницаемости ϵ по сравнению с ГБ-7, что наиболее вероятно объясняется меньшим содержанием примесей и стеклофазы в керамике МК.

3. Керамика ГБ-7 с большим содержанием стеклофазы (8 %) более устойчива к воздействию термического удара, чем микролит МК (содержание стеклофазы 1 %).

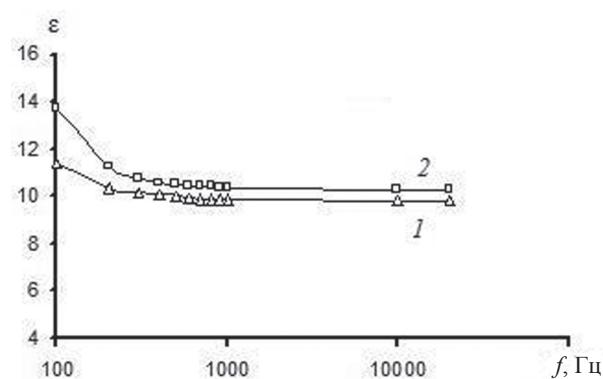


Рис. 3. Частотные зависимости диэлектрической проницаемости керамик МК (1) и ГБ-7 (2) при комнатной температуре

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Костюков, Н.С.** Радиационная электропроводность [Текст] / Н.С. Костюков, М.И. Муминов, С.М. Атраш [и др.] // Диэлектрики и радиация; под общ. ред. Н.С. Костюкова. Книга 1. – М.: Наука, 2001. – С. 9–167. – Библиогр.: С 168–171.
2. **Костюков, Н.С.** ϵ и $tg\delta$ при облучении [Текст] / Н.С. Костюков, А.А. Лукичев, М.И. Муминов [и др.] // Диэлектрики и радиация; под общ. ред. Н.С. Костюкова. Книга 2. – М.: Наука, 2002. – С. 92–245. – Библиогр.: С 269–274.
3. **Костюков, Н.С.** Механическая и электрическая прочность и изменение структуры при облучении [Текст] / Н.С. Костюков, Е.С. Астапова, Е.Б. Пивченко [и др.] // Диэлектрики и радиация; под общ. ред. Н.С. Костюкова. Книга 3. – М.: Наука, 2003. – С. 9–136. – Библиогр.: С. 217–225.
4. **Муминов, М.И.** Исследование поверхностной электропроводности керамических диэлектриков [Текст] / М.И. Муминов, В.Н. Сандалов // Письма в ЖТФ. – 2003. – Т. 29. – Вып. 16. – С. 63–71.
5. Физика диэлектриков [Текст]; под ред. Ю.М. Поплавко. – Киев, Вища шк., 1980. – 400 с.
6. **Анненков, Ю.М.** Электрические свойства корундо-циркониевой керамики [Текст] / Ю.М. Анненков, А.В. Кабышев, А.С. Иващенко [и др.] // Изв. Томского политехн. ун-та. – 2005. – Т. 308. – № 7. – С. 35–38.
7. **Ланкин, С.В.** Электропроводность клиноптилолита и его ионообменных форм [Текст] / С.В. Ланкин, В.В. Юрков // Перспективные материалы. – 2006. – № 5. – С. 59–62.
8. **Барышников, С.В.** Особенности диэлектрических аномалий $Pb_{1-x}Ge_xTe(Ga)$ в районе сегнетоэлектрического фазового перехода [Текст] / С.В. Барышников, А.С. Барышников, А.Ф. Баранов [и др.] // ФТТ. – 2008. – Т. 50. – Вып. 7. – С. 1270–1273.
9. **Астапова, Е.С.** Влияние изотермического отжига на механические свойства и микроструктуру высокоглиноземистой керамики [Текст] / Е.С. Астапова, Е.А. Ванина, И.А. Голубева // Физика и химия обработки материалов. – 2008. – № 3. – С. 28–32.

УДК 539.3

П.В. Трусов, П.С. Волегов, А.Ю. Янц

ОПИСАНИЕ ВНУТРИЗЕРЕННОГО И ЗЕРНОГРАНИЧНОГО УПРОЧНЕНИЯ МОНО- И ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

Проблема описания упрочнения монокристаллов, составляющих поликристаллический агрегат (ПКА), сопровождающего процессы пластического деформирования, рассматривается на данный момент как одна из основных задач построения физических теорий пластичности. Известно, что в процессах обработки металлов давлением существенным образом меняются физико-механические свойства образца [1], что является следствием существенной перестройки микро- и мезоструктуры материала. Для описания эволюции микроструктуры в последние 10–15 лет широко применяются двухуровневые (макро- и мезоуровни) модели, ос-

нованные на физических теориях пластичности. Для моделирования на мезоуровне весьма важно корректное построение эволюционных уравнений для критических сдвиговых напряжений на системах скольжения, определяющих их изменение в зависимости от некоторого набора параметров (например сдвиги, температура, энергия дефекта упаковки и т. п.).

Проблема описания упрочнения поликристаллов весьма сложна и еще далека от решения. Цель настоящей работы – построение и анализ законов упрочнения при упругопластической деформации моно- и поликристаллов, учитывающих некото-



рые механизмы упрочнения-разупрочнения на мезоуровне. При этом важно, чтобы полученные соотношения содержали в себе (за исключением, может быть, нескольких констант материала) только переменные величины мезо- или макроуровня, чтобы не усложнять процедуры идентификации и верификации модели. В работах [2, 3] рассмотрены два варианта построения таких соотношений: первый – без явного учета эволюции дефектной структуры материала, второй – на основе подхода к построению определяющих соотношений с использованием внутренних переменных, характеризующих микроструктуру материала. Мы считаем второй подход наиболее физически прозрачным, и в настоящем исследовании будем развивать именно его.

В нашей работе используется двухуровневая модель упругопластического деформирования поликристаллического агрегата. Задается схема деформирования на макроуровне, для деформированного состояния на мезоуровне (зерно, субзерно) принимается гипотеза Фойгта. В роли определяющего соотношения на макроуровне используется закон Гука в скоростной форме; скорость пластических деформаций определяется из модели второго масштабного уровня (мезоуровня) по скоростям сдвигов по активным системам скольжения, для поиска которых, в свою очередь, используется алгоритм, предложенный в модели Линя [4]. Предполагается, что процессы деформирования являются квазистатическими и протекают при низких гомологических температурах; это позволяет не учитывать диффузные механизмы (рекристаллизацию, возврат, образование атмосфер и др.).

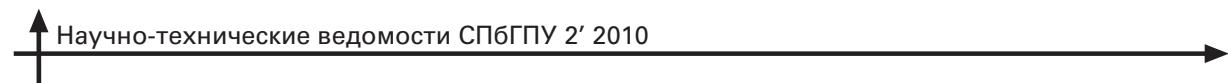
Физические механизмы упрочнения

Физические причины, приводящие к упрочнению, вообще говоря, весьма разнообразны: в первую очередь упрочнение связывают с взаимодействием дислокаций друг с другом, со скоплениями дислокаций и другими дислокационными субструктурой [5]. Важным аспектом упрочнения выступает взаимодействие полных и расщепленных дислокаций, а также последних между собой, приводящее к образованию так называемых сидящих дислокаций (барьеров Ломера – Коттрелла), полностью перекрывающих плоскости залегания для движения других дислокаций. Кроме того, существенное влияние на упрочнение оказы-ва

ет наличие границ зерен в поликристаллическом агрегате, что подтверждено экспериментальными исследованиями [6]. Границы зерен играют, по крайней мере, двойную роль. Во-первых, они представляют собой специфические области дефектной структуры с характерной толщиной от сотых до десятых долей микрометра (в зависимости от типа границы) и плотностью дислокаций в 1,2–1,5 раза выше, чем в зернах. В связи с этим границы зерен могут выступать как специфический механизм неупругого деформирования (так называемого зернограничного скольжения), а также как генераторы дислокаций и «устройства», реализующие аккомодационные механизмы. Во-вторых, на границах зерен реализуются ограничения, накладываемые на пластическое деформирование зерна различно ориентированными соседними зернами; например, скольжение дислокаций в одном зерне не может свободно продолжаться в соседнем с ним зерне в силу несовпадения кристаллографических систем. В большинстве работ в рамках построения физических теорий пластичности учитывается именно второй аспект влияния границ, связанный со стеснением пластических деформаций за счет разориентировки соседних зерен.

В рамках данного исследования будем разделять упрочнение на «неориентированное» и «ориентированное». Первое описывает упрочнение независимо от направления деформирования (образование пересечений дислокаций, жгутов, кос, барьеров Ломера – Коттрелла); такое упрочнение приводит к увеличению критического напряжения сдвига сразу на многих системах скольжения (или даже на всех сразу). Второе связано с накоплением упругой энергии на «поджатых дислокациях» (на различных барьерах), эта энергия может (полностью или частично) высвобождаться при «развороте» направления деформирования. Второй тип может быть описан либо кинематическим законом упрочнения, либо законом одновременного изменения критических напряжений сдвига на противоположных системах скольжения. Оба варианта описания ориентированного упрочнения эквивалентны, однако в рамках принятой структуры уравнений упрочнение определяется в каждой отдельной системе скольжения, в связи с чем будет использоваться второй вариант.

Разделение эффектов упрочнения на предложенные два типа справедливо, пожалуй, только на начальной стадии деформирования, так как при



продолжающейся пластической деформации те же барьеры Ломера – Коттрелла становятся источниками «ориентированного» упрочнения (за счет накопления поджатых к сидячей дислокации полных или расщепленных краевых дислокаций). Тем не менее, предлагаемая классификация позволяет физически обоснованно подходить к построению соотношений для дополнительных слагаемых в законе упрочнения, вводимых далее.

Запасаемую на микродефектах энергию, в свою очередь, можно разделить на два типа: не высвобождаемая на микро- и мезодеформациях (в дальнейшем именно эта энергия должна вести к образованию микротрещин) и высвобождаемая. На данном этапе в законы упрочнения входит вторая составляющая; доля «высвобождаемости» зависит от сложности нагружения; например, если имеется плоское скопление дислокаций, поджатых к барьеру, то накопленная упругая энергия практически полностью будет освобождаться при реверсивном нагружении; если же это скопление будет происходить на фоне множественного скольжения с образованием жгутов, кос, то значительная часть энергии остается в материале и при реверсивном нагружении. Это разделение учитывается, например, при описании эффекта Баушингера.

Общий вид закона упрочнения

В работе [7] приведен стандартный вид закона упрочнения, используемого в большинстве работ по моделям типа Тейлора–Бишопа–Хилла, а также приведено более общее (анизотропное) скоростное соотношение:

$$\tau_c^{(k)} = E \sum_{i=1}^{24} a_i^{(k)} \dot{\gamma}^{(i)}, \quad k = \overline{1, 24}, \quad \dot{\gamma}^{(i)} \geq 0, \quad \tau_c^{(k)}(0) = \tau_{c0}^{(k)}, \quad (1)$$

где $\tau_{c0}^{(k)}$ – начальный предел текучести в k -й системе скольжения, E – модуль Юнга, $a_i^{(k)}$ – модули упрочнения (в англоязычной литературе – *hardening modulus*), разделяемые на коэффициенты деформационного ($a_i^{(i)}$) и латентного ($a_i^{(k)}, k \neq i$) упрочнения. Для исключения из задачи неоднозначностей число систем скольжения удвоено (для кристаллов с гранецентрированной кубической решеткой, таким образом, это число равно 24). Экспериментально установлено, что латентное упрочнение, как правило, превышает деформационное (см. например [8]).

Соотношение в виде (1) обладает некоторыми недостатками. Во-первых, маловероятно, что

эффекты от дислокационных реакций, обусловливающих упрочнение, приводят лишь к линейному упрочнению; во-вторых, разрабатываемая модель должна описывать широко известные эффекты циклического нагружения поликристаллических материалов, например, выхода на стационарную траекторию деформирования после большого количества циклов растяжения-сжатия при фиксированной амплитуде деформаций [9]. В исходном соотношении отсутствуют причины выхода на стационарную диаграмму даже на большом количестве циклов. Объяснение этого эффекта заключается в следующем: в основном соотношении закона упрочнения (1) в первую очередь учитываются реакции на *мобильных* дислокациях, при этом никоим образом не учитывается уменьшение плотности таких дислокаций в процессе деформирования. Несмотря на активную работу источников (например типа Франка – Рида), с некоторого момента деформирования дислокационные субструктуры становятся настолько сложными, что образующиеся новые мобильные дислокации практически сразу же теряют способность к скольжению (например, за счет переплетения линий дислокации с линиями сидячих дислокаций). Таким образом, из ситуации можно выйти, если несколько модифицировать соотношение (1) путем введения в него степенного характера упрочнения, а также меры сложности предыдущего деформирования; тогда соотношение примет следующий вид:

$$\tau_c^{(k)} = \psi E \left(\sum_{i=1}^{24} a_i^{(k)} \left(\frac{\gamma^{(i)}}{\sum_{i=1}^{24} \gamma^{(i)}} \right)^{\psi-1} \dot{\gamma}^{(i)} \right),$$

$$k = \overline{1, 24}, \quad \psi > 1, \quad \dot{\gamma}^{(i)} \geq 0, \quad \tau_c^{(k)}(0) = \tau_{c0}^{(k)}, \quad (2)$$

где $\gamma^{(i)}$ – накопленный сдвиг по системе скольжения i , $\dot{\gamma}^{(i)} = \int_0^t \dot{\gamma}^{(i)} dt$.

По сути модификация представляет собой введение под знаком суммы в соотношении (1) не накопленного на системе скольжения сдвига (в степени ψ), а комплекса величин – отношения накопленного сдвига по данной системе к суммарному накопленному сдвигу. Очевидно, что в случае одиночного скольжения этот множитель независимо от степени будет равен единице и скорость упрочнения останется пропорциональной



скорости сдвига. Наоборот, чем большее количество различных систем скольжения будет подключаться к процессу скольжения, тем ближе этот множитель будет к нулю, причем с увеличением степени стремление к нулю будет большим.

Если предположить аддитивность скоростей критических напряжений сдвига на системе скольжения (они обусловлены различными механизмами упрочнения), то соотношение (2) можно дополнить слагаемыми, которые бы учитывали механизмы возникновения препятствий при пластическом деформировании; эти механизмы не учтены в первом слагаемом. В рамках данной работы рассмотрены три механизма, которые приводят к «дополнительному» упрочнению (разупрочнению) монокристалла:

1. Аннигиляция дислокаций, имеющих одну плоскость скольжения, но противоположно направленные векторы Бюргерса. Учет в явном виде этого механизма взаимодействия дислокаций позволит описать хорошо известный эффект Баушингера [10]. Более подробно явление аннигиляции рассмотрено в работе [7]; отметим лишь, что при его описании необходимо учитывать сложность предыдущего нагружения – образование сложных дислокационных субструктур (в том числе барьеров различного типа), накопление в них «невысвобождаемой» упругой энергии ведет, разумеется, к уменьшению количества актов аннигиляции при смене направления скольжения.

2. Взаимодействие расщепленных дислокаций, которые представляют собой совокупность дефекта упаковки и двух частичных дислокаций; такое взаимодействие ведет к появлению так называемых барьеров Ломера–Коттрелла [5], затрудняющих движение дислокаций. Из литературы известно, что такие барьеры весьма сложно разрушить, поэтому, как правило, появление барьера Ломера – Коттрелла приводит к невозможности движения дислокаций в плоскостях скольжения, захваченных барьером.

3. Упрочнение вследствие взаимодействия дислокаций данного зерна с границей (с соседними зернами поликристаллического агрегата), а также влияние дислокационных структур, формирующихся при этом в границе, на дальнейшее движение дислокаций при продолжающейся пластической деформации.

Следует отметить, что рассмотренные механизмы упрочнения нельзя в полной мере считать независимыми. Тем не менее, в рамках принятого

подхода к построению законов упрочнения считается, что изменение напряжений течения на отдельных системах скольжения все же можно описать и при этом использовать аддитивность скоростей критических напряжений, обусловленных каждым из рассматриваемых механизмов упрочнения в отдельности. При этом взаимовлияние механизмов можно учитывать путем введения в закон специальных интегральных множителей от соответствующих слагаемых.

Отметим, что каждый из рассматриваемых механизмов упрочнения в известной степени носит вероятностный характер. Структура описываемой здесь модели позволяет неявно учесть эту стохастичность: рассмотрение отклика материала на макроуровне определяется по выборке элементов (зерен), имеющих произвольную ориентацию, а в силу этого в каждый момент деформирования в каждом из зерен мы имеем различные активные системы скольжения, критические напряжения и т. п.

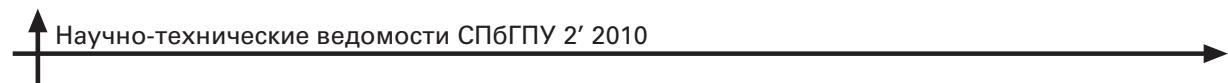
Таким образом, общий вид закона упрочнения для каждой из систем скольжения в скоростной форме представляется возможным записать в следующем виде:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = f^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}) + f_{\text{расщ}}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \alpha_1^{(i)}, \alpha_2^{(i)}, \dots, \alpha_n^{(i)}) + \\ + f_{\text{анниг}}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \beta_1^{(i)}, \beta_2^{(i)}, \dots, \beta_m^{(i)}) + \\ + f_{\text{зерногран}}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \delta_1^{(i)}, \delta_2^{(i)}, \dots, \delta_m^{(i)}), \quad i, k = \overline{1, 24}, \quad (3)$$

где $\alpha_1^{(i)}, \alpha_2^{(i)}, \dots, \alpha_n^{(i)}, \beta_1^{(i)}, \beta_2^{(i)}, \dots, \beta_m^{(i)}$ и $\delta_1^{(i)}, \delta_2^{(i)}, \dots, \delta_m^{(i)}$ – наборы внутренних переменных, характеризующих соответствующие механизмы. Индексы номеров i и k систем скольжения в дальнейшем для простоты записи будем опускать, указывая их только в необходимых случаях.

Согласно классификации, введенной в предыдущем разделе, дополнительные слагаемые $f^{(k)}$ и $f_{\text{расщ}}^{(k)}$ следует отнести к описанию «неориентированного» упрочнения, а $f_{\text{анниг}}^{(k)}$ и $f_{\text{зерногран}}^{(k)}$ – «ориентированного».

Изменение критических напряжений есть следствие эволюции дислокационных субструктур зерна, при этом каждому из слагаемых поставлен в соответствие отдельный механизм взаимодействия дислокаций при пластической деформации. Так, в первом слагаемом закона упрочнения (3) учитывается «чистое» скольжение полных дислокаций и их взаимодействие с препятствиями,



в том числе пересечения дислокаций других систем скольжения. Возрастание критического напряжения в данном случае объясняется наличием в зерне различного рода препятствий, таких как примесные атомы, дислокационные барьеры, а также взаимодействием дислокаций различных систем скольжения с близко- и дальнодействующими полями напряжений [11]. Слагаемое $f_{\text{расщ}}^{(i)}$ описывает взаимодействие расщепленных дислокаций с образованием барьеров Ломера–Коттрела, в результате которого могут «выключаться» из скольжения отдельные плоскости систем скольжения.

Для описания эффекта Баушингера введем понятие «пары» систем скольжения – это две системы скольжения с одним и тем же вектором нормали к плоскости скольжения и противоположно направленными векторами Бюргерса. Член $f_{\text{анниг}}^{(k)}$ отвечает за уменьшение количества дислокаций в паре систем скольжения вследствие их аннигиляции (в том числе и аннигиляции расщепленных дислокаций) при скольжении, поэтому в соотношение для $f_{\text{анниг}}^{(k)}$ явным образом должны входить накопленные сдвиги и скорости сдвигов по системам скольжения.

Последнее слагаемое в правой части уравнения (3) описывает влияние на движение дислокаций границ зерен, ограничивающих или усложняющих дальнейшее прохождение дислокаций сквозь границу при пластической деформации. Здесь в первую очередь следует учесть появление в границе так называемых «дислокаций ориентационного несоответствия» [12], которые создают собственные упругие поля напряжений, затрудняющие движение дислокаций через границу при дальнейшем деформировании.

Далее, необходим подбор таких групп внутренних переменных $\alpha_1^{(i)}, \alpha_2^{(i)}, \dots, \alpha_n^{(i)}, \beta_1^{(i)}, \beta_2^{(i)}, \dots, \beta_m^{(i)}$ и $\delta_1^{(i)}, \delta_2^{(i)}, \dots, \delta_m^{(i)}$, с помощью которых можно (наиболее просто) описывать интересующие нас механизмы деформирования.

Внутризеренное упрочнение

Сформулируем основные гипотезы характера взаимодействия дислокаций и дислокационных структур внутри зерна, чтобы ввести дополнительные слагаемые в выражение для закона упрочнения.

В качестве внутренних переменных для описания дополнительного упрочнения за счет реакций

на расщепленных дислокациях рассматриваются энергия дефекта упаковки (ЭДУ) $\gamma_{\text{ЭДУ}}$, плотность уже накопленных к данному моменту дислокационных барьеров и скорость сдвига в системах скольжения, плоскости которых пересекают данную (как мера движения дислокаций) [7]. Тогда функцию $f_{\text{расщ}}^{(i)}$ можно определить в следующем виде:

$$f_{\text{расщ}}^{(i)}(\gamma_{\text{ЭДУ}}, \dot{\gamma}^{(i)}, \gamma^{(j)}) = \xi_1 \tau_c^{(i)} \left(1 - \frac{\gamma_{\text{ЭДУ}}}{\gamma_{\text{ЭДУ}}^*} \right) H \left(1 - \frac{\gamma_{\text{ЭДУ}}}{\gamma_{\text{ЭДУ}}^*} \right) \times \left(\int_0^t f_{\text{расщ}}^{(i)} d\tau + f_0^{(i)} \right)^{-1} \dot{\gamma}^{(i)} \left(\sum_{j \neq i}^{N^*} \gamma^{(j)} + \gamma_0^b \right), \quad (4)$$

где $\gamma_{\text{ЭДУ}}^*$ – некоторое критическое значение ЭДУ материала, при превышении которого рассматриваемым механизмом можно пренебречь (дислокациям энергетически невыгодно переходить в расщепленное состояние), $\gamma_{\text{ЭДУ}}$ – энергия дефекта упаковки материала, N^* – число систем скольжения, сопряженных к данной (т. е. имеющих пересекающиеся плоскости скольжения с данной системой скольжения, для которых энергетически возможны реакции образования сидячих дислокаций), $\tau_c^{(i)}$ – текущее критическое напряжение в данной системе скольжения, определяемое первым слагаемым в уравнении (3), γ_0^b – некоторая малая константа, описывающая начальное распределение барьеров в недеформированном материале, ξ_1 – материальная константа, H – функция Хэвисайда.

В статье [7] подробно рассмотрены физика процесса аннигиляции и факторы, влияющие на уменьшение критического касательного напряжения на системе скольжения в результате аннигиляции дислокаций. В рамках подхода, предлагающего разделение энергии, запасенной на «поджатых» к препятствиям дислокациям, на высвобождаемую и невысвобождаемую при дальнейшем деформировании энергию, в соотношение для $f_{\text{анниг}}^{(i)}$ введен дополнительный множитель, учитывающий сложность нагружения по всем системам скольжения:

$$f_{\text{анниг}}^{(i)}(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m) = \frac{d\tau_{\text{анниг}}^{(i)}}{dt} = -\xi_2 \tau_{\text{анниг}}^{(i)} \sum_j \frac{\gamma^{(i)}}{\gamma^{(j)}} \dot{\gamma}^{(i)} (\gamma^{(i+12)} + \gamma_0^a), \quad (5)$$

$$\tau_{\text{анниг}}^{(i)} \Big|_{t=0} = \tau_{c0}^{(i)}, \quad i = \overline{1, 24},$$



где $\sum \gamma^{(j)}$ – суммарный накопленный сдвиг по всем системам скольжения, γ_0^a – малый параметр, ξ_2 – материальная константа.

Зернограничное упрочнение

К настоящему моменту в литературе нет единой точки зрения на конкретный механизм взаимодействия дислокаций с границей и проникает ли дислокация через границу зерна. Эти проблемы выходят за рамки нашего исследования, рассматривается лишь взаимодействие дислокаций с дефектной структурой границы. Мы принимаем модель пластического деформирования поликристалла, согласно которой дислокация, приближаясь к границе, поглощается ею, тогда как сама граница порождает дислокации, обеспечивающие пластический сдвиг в соседнем зерне (в направлении деформирования) [13–15]. Совокупность актов поглощения дислокаций границей и испускания границей дислокации в соседнее зерно будем условно трактовать как прохождение дислокации через границу, сопровождающееся сменой направления вектора Бюргерса дислокации и появлением в границе дислокации ориентационного несоответствия.

«Дополнительное» зернограничное упрочнение должно зависеть от скорости сдвига по данной системе скольжения (от интенсивности поступления дислокаций в окрестность границы и дислокационных реакций в границе). Указанное слагаемое должно зависеть от накопленного сдвига $\gamma^{(i)}$ по данной системе скольжения (плотности дислокаций ориентационного несоответствия в границе [12]). Дислокации данного зерна могут реагировать с различными участками границы, образуемыми различными парами зерен; при построении соответствующего соотношения важно учитывать долю из общего числа реагирующих дислокаций, приходящуюся на конкретную пару зерен, поэтому введем вспомогательную величину, равную отношению площади границы зерна, которую пересекают плоскости данной системы скольжения, к общей площади границы рассматриваемого зерна.

Необходимо также ввести некоторую меру ξ взаимной разориентации данной системы скольжения, границы и системы скольжения соседнего зерна, в которую проходят дислокации из данной системы. Эта мера должна характеризовать ориентацию дислокационных структур, в первую

очередь, дислокаций ориентационного несоответствия, появляющихся в границе как результат продолжающейся пластической деформации в зерне, и определять их влияние на дальнейшее движение дислокаций в двух соседних зернах, образующих границу.

Таким образом, определив внутренние переменные, можно записать искомое слагаемое в следующем общем виде:

$$f_{\text{зерногран}}^{(i)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}, \xi) = \eta \gamma^{(i)} \dot{\gamma}^{(i)} \sum_{k=1}^P \frac{S_k}{S_0} \xi_{ik} (1 - \xi_{ik}), \quad (6)$$

где S_k/S_0 – доля общей площади зерна, «приходящаяся» на данную систему скольжения (S_k) по отношению к площади поверхности зерна S_0 ; P – количество плоских участков, аппроксимирующих границы зерна.

Мера разориентации ξ_{jk} определяется по минимальному значению для данной системы скольжения данного зерна j , плоского участка границы k и всех систем скольжения l соседнего зерна:

$$\xi_{jk} = \min_l \left\{ \xi_{jk}^l, l = 1, 24 \right\};$$

подробное описание меры разориентации приведено далее.

Для построения меры взаимной разориентации зерен рассмотрим две системы скольжения соседних зерен, определяемых своими векторами Бюргерса $\mathbf{b}^{(i)}$, $\mathbf{b}^{(j)}$ и векторами нормалей к плоскостям скольжения $\mathbf{n}^{(i)}$, $\mathbf{n}^{(j)}$, указанные пары векторов разделены плоским участком границы, который определен своей нормалью \mathbf{n} . Условием равенства нулю меры разориентации будем считать одновременно отсутствие скачка вектора Бюргерса и нормали к системе скольжения при переходе через границу. Далее, важное дополнительное условие – это отличие от нуля проекции вектора Бюргерса дислокации ориентационного несоответствия на нормаль к границе. Таким образом, приходим к мере, выражющейся соотношением

$$\xi_{jk} = \min_{l=1,24} \left\{ \mathbf{n} \cdot (\mathbf{b}^{(i)} \mathbf{n}^{(i)} - \mathbf{b}^{(j)} \mathbf{n}^{(j)}) \cdot \mathbf{n} \right\}. \quad (7)$$

Введенная мера разориентации учитывает геометрические особенности взаимного расположения систем скольжения соседних зерен, а также части границы, пересекаемой плоскостями этих систем скольжения. Аналогичный подход можно найти в монографии [12].

Результаты численных экспериментов. Обсуждение результатов

Предлагаемые выше законы упрочнения введены в модель мезоуровня, основанную на физической теории, предложенной Линем [4]. Всюду численные эксперименты ставятся для трехмерного случая, для анизотропного материала с гранецентрированной кубической решеткой; упругие и пластические константы соответствуют чистой меди (при комнатной температуре). Рассматривается изотермическая пластическая деформация однофазного поликристалла, предусмотрена возможность задания произвольного распределения ориентаций зерен по заданному статистическому закону. Развороты зерен в процессе пластической деформации в данной части работы не учитываются.

Нами проведена серия численных экспериментов с использованием модели, выраженной законами упрочнения в виде (2)–(7), получены результаты, часть из которых приведена ниже. Представительный объем испытывает деформации одноосного сжатия вдоль оси x_3 :

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\dot{\varepsilon}_0}{2} \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 + \frac{\dot{\varepsilon}_0}{2} \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 - \dot{\varepsilon}_0 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_3,$$

где \mathbf{k}_i – орты соответствующих осей лабораторной декартовой системы координат.

Значения констант модели, которые использованы в соответствующих соотношениях (если не указано иное) следующие:

$$N = 1000,$$

$$C_{1111} = 168,4 \text{ ГПа}, \quad C_{1122} = 121,4 \text{ ГПа}, \quad C_{1212} = 75,4 \text{ ГПа},$$

$$\tau_{c0}^{(i)} = 15 \text{ МПа}, \quad i = \overline{1, 24},$$

$$a_i^{(k)} = 10^{-5}, \quad i, k = \overline{1, 24}, i \neq k,$$

$$a_i^{(i)} = 0,5 \cdot 10^{-5}, \quad \psi = 1,95,$$

$$\xi_1 = 8 \cdot 10^3,$$

$$f_0^{(i)} = 1,05, \quad i = \overline{1, 24},$$

$$\gamma_0 = 0,5 \cdot 10^{-5},$$

$$\xi_2 = 1, \quad \eta = 30 \text{ МПа},$$

где C_{ijkl} – ненулевые независимые компоненты тензора упругих свойств (в кристаллографической системе координат); N – число зерен в представительном объеме; $\tau_{c0}^{(i)}$ – начальный предел текучести материала по системе скольжения i ; $a_i^{(k)}$, $i, k = \overline{1, 24}$ –

коэффициенты упрочнения в «классическом» слагаемом (2); ξ_1 – коэффициент упрочнения в слагаемом (4); ξ_2 – коэффициент упрочнения в слагаемом (5); $f_0^{(i)}$, γ_0 , η – параметры модели.

На рис. 1, *a* представлена зависимость интенсивности тензора напряжений Коши σ_u от интенсивности тензора малых деформаций ε_u для поликристаллического агрегата (распределение ориентаций зерен – случайное равномерное), с учетом модифицированного «классического» закона упрочнения в виде (2).

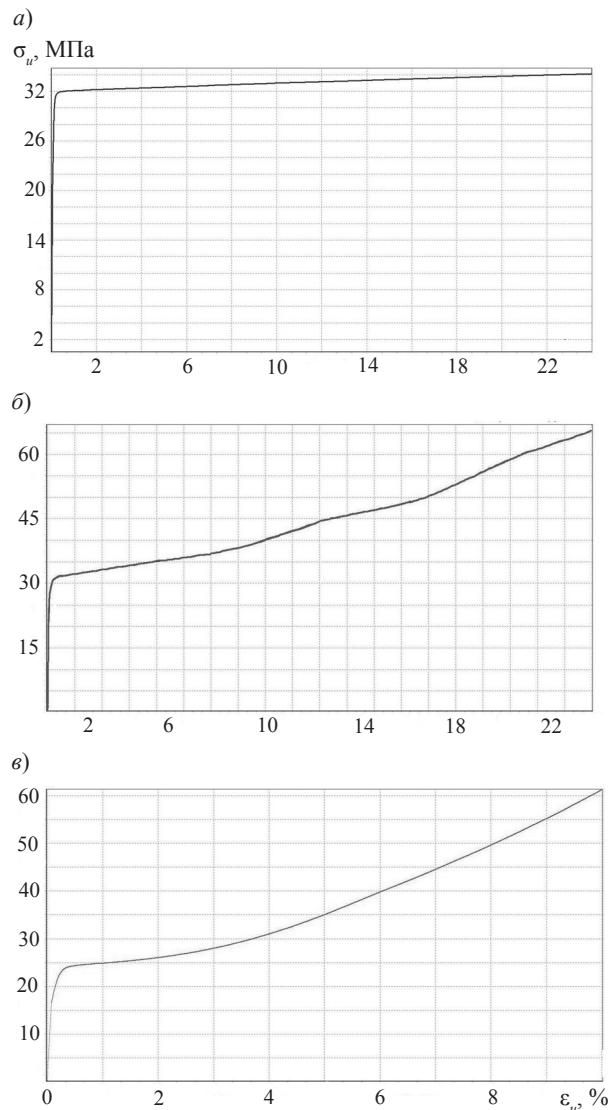


Рис. 1. Зависимости напряжения от деформации при одноосном сжатии поликристаллического агрегата, учитывающие дополнительные слагаемые к общему скоростному соотношению (1). Расчеты по формулам (2) (*a*); (4) при $f_0^{(i)} = 1,02$, $\gamma_0 = 2,5 \cdot 10^{-5}$ (*b*); (2), (6) (*c*)



На рис. 1, б представлена аналогичная зависимость для поликристаллического агрегата при внесении в закон упрочнения слагаемого вида (4) при конкретных значениях параметров $f_0^{(i)}, \gamma_0$ (указаны в подписи к рисунку). Хорошо заметны появляющиеся нелинейности на диаграмме, обусловленные эффектом «запирания» систем скольжения сидячими дислокациями при их накоплении до некоторого критического значения, и соответственно, выключением таких систем из процесса деформирования. До тех пор, пока не найдется такая система скольжения (или набор систем), при которой вновь выполнится критерий активизации, материал при пластическом деформировании будет вынужденно использовать для скольжения меньшее число систем, чем это необходимо для полного исчерпания предписанной деформации.

Таким образом, в моменты запирания одних систем и до подключения к процессу деформирования других систем скольжения доля упругой деформации в полной резко возрастает, что приводит к более крутым росту напряжений на диаграмме; при дальнейшем деформировании происходит постепенное выравнивание графика за счет подключения дополнительных систем скольжения.

На рис. 1, в представлена зависимость напряжение–деформация при рассмотрении слагаемого вида (6), описывающего взаимодействие внутризеренных дислокаций и границ зерен. Рассматриваются зерна кубической формы (хотя модель позволяет рассматривать зерна с произвольным набором граней), распределение ориентаций зерен – по-прежнему случайное равномерное. Заметен переход с некоторого момента деформирования от линейного упрочнения к нелинейному участку (рост интенсивности напряжений происходит по квадратичному закону); нелинейность здесь обусловлена совместным влиянием на дополнительное упрочнение как скорости сдвига по данной системе скольжения, так и накопленного сдвига по той же самой системе скольжения (в отличие от других дополнительных слагаемых), дающих как раз квадратичную зависимость от сдвига для скорости изменения критического напряжения.

Представляет интерес также рассмотрение влияния слагаемого, выражающего образование сидячих дислокаций, для конкретных систем скольжения. На рис. 2 приведена характерная зависимость «дополнительного» критического напряжения, обусловленного выражением (4), на

всех системах скольжения случайно выбранного зерна от интенсивности деформаций. Заметны явления совместного подключения и выключения систем скольжения; резкие перегибы на диаграмме для некоторых систем обусловлены не столько скоростью сдвигов по данным системам, сколько накоплением расщепленных дислокаций в паре сопряженных систем с наибольшим ростом дополнительных напряжений. При активизации таких систем даже малая скорость сдвига по ним приводит к скачкообразному росту критических напряжений за счет большого накопленного сдвига в сопряженных к ним системах. В свою очередь, такое резкое увеличение критического напряжения приводит к быстрому выключению системы из пластической деформации, и процесс повторяется заново. Величина скачков критического напряжения обусловлена как начальным распределением расщепленных дислокаций γ_0 , так и начальным распределением барьеров Ломера – Коттрелла $f_0^{(i)}$.

На рис. 3, а показана диаграмма интенсивностей напряжение–деформация ПКА при учете слагаемого, описывающего падение критического напряжения на системе скольжения, слагаемое обусловлено аннигиляцией дислокаций, поджатых на препятствиях. Выполнено два цикла на растяжение–сжатие. Хорошо заметно уменьшение предела текучести при смене знака деформирования: с 32 МПа (первоначально) до 28 МПа (после первой смены направления траектории деформации), и с 34 до 30 МПа на втором цикле.

На рис. 3, б представлена диаграмма циклического нагружения поликристаллического

$B, \text{ МПа}$

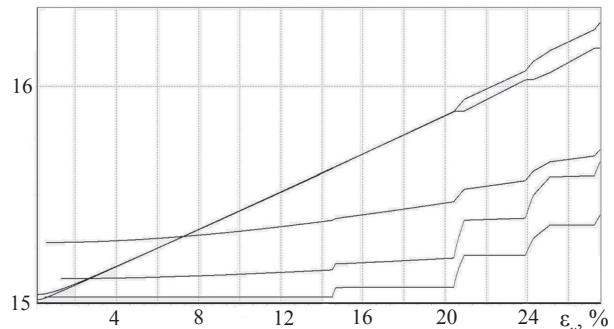


Рис. 2. Характерная зависимость «дополнительного» критического напряжения B от деформации для систем скольжения произвольного зерна. Величина

$$B = \int_0^{\varepsilon_u} f_{\text{расщ}}^{(i)} d\varepsilon_u$$

входит в уравнение (4) для $f_0^{(i)}$

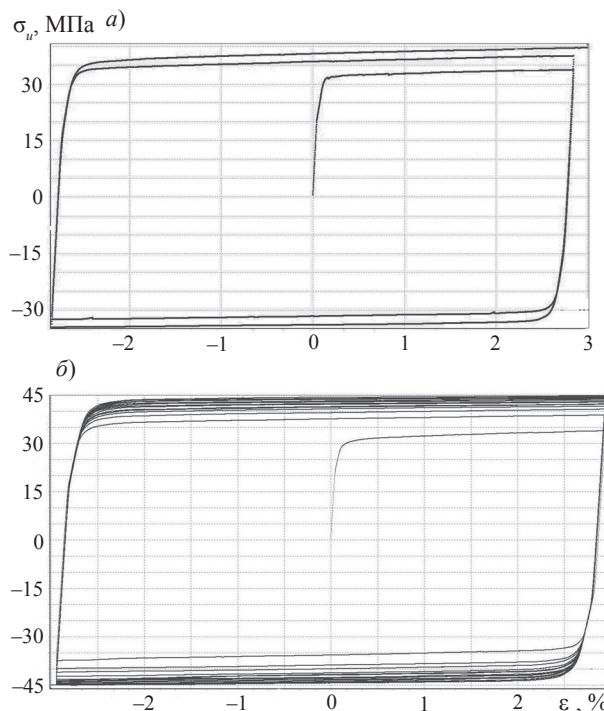


Рис. 3. Зависимости напряжения от деформации при циклическом деформировании поликристаллического агрегата, учитывающие дополнительные слагаемые к общему скоростному соотношению (1). Расчеты по формулам (2), (4), (5). Всего 2 цикла (а) и 20 циклов (б)

агрегата с использованием модифицированных соотношений (2), (4) и (5). Нелинейные эффекты, связанные с работой барьера Ломера–Коттрелла,

здесь не проявляются в силу малого диапазона изменения интенсивности деформаций, зато хорошо виден выход на стационарную траекторию деформирования.

Таким образом, в данной работе предлагается классификация эффектов, приводящих к упрочнению кристаллических тел при пластической деформации, основанная на рассмотрении физических механизмов упрочнения, а также подход к описанию этих механизмов. Согласно предложенной классификации рассматриваются ориентированное и неориентированное упрочнение; в механизмах упрочнения выделяются эффекты, связанные с накоплением невысвобождаемой упругой энергии, накапливаемой на поджатых к препятствиям дислокациях. В качестве иллюстраций предлагаемого подхода к описанию упрочнения рассматриваются три известных эффекта: дополнительное существенно нелинейное упрочнение, связанное с реакциями на расщепленных дислокациях; эффект Баушингера, связанный с падением предела текучести при смене направления деформирования и обусловленный аннигиляцией предварительно поджатых дислокаций; зернограничное упрочнение, возникающее при взаимодействии внутризеренных дислокаций с дислокациями ориентационного несоответствия, располагающимися в границе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №10-08-00156-а, № 10-08-96010-р_урал_а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Вишняков, Я.Д.** Теория образования текстур в металлах и сплавах [Текст] / Я.Д Вишняков. – М.: Наука, 1979. – 343 с.
2. **Ашихмин, В.Н.** Конститутивные соотношения с внутренними переменными: общая структура и приложение к текстурообразованию в поликристаллах [Текст] / В.Н. Ашихмин, П.С. Волегов, П.В. Трусов // Математ. моделир. систем и процессов: Межвуз. сб. науч. тр. – Пермь: Перм. гос. техн. ун-т. – 2006. – № 12. – С. 11–26.
3. **Трусов, П.В.** Определяющие соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры [Текст] / П.В. Трусов, В.Н. Ашихмин, П.С. Волегов, А.И. Швейкин // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т. 12. – № 3. – С. 61–72.
4. **Линь, Т.Г.** Физическая теория пластичности [Текст] / Т.Г. Линь // Проблемы теории пластичности. Сер. Новое в зарубежной механике. Вып. 7. – 1976. – С. 7–68.
5. **Миркин, Л.И.** Физические основы прочности и пластичности [Текст] / Л.И. Миркин. – М.: Изд-во МГУ, 1968. – 538 с.
6. **Хоникомб, Р.** Пластическая деформация металлов [Текст] / Р. Хоникомб. – М.: Мир, 1972. – 408 с.
7. **Трусов, П.В.** Определяющие соотношения с внутренними переменными и их применение для описания упрочнения в монокристаллах [Текст] / П.В. Трусов, П.С. Волегов // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т. 12. – № 5. – С. 65–72.



8. **Harder, J.** FEM-simulation of the hardening behavior of FCC single crystals [Text] / J. Harder // Acta Mechanica. – 2001. – Vol. 150. – P. 197–217.
9. **Tanaka, E.** Effect of strain paths shapes on non-proportional cyclic plasticity [Text] / E. Tanaka, S. Murakami, M. Ooka // J. Mech. Phys. Solids. – 1985. – Vol. 33. – No. 6. – P. 559–575.
10. **Белл, Дж.Ф.** Экспериментальные основы механики деформируемых твердых тел [Текст]. В 2 ч. Ч. 2. Конечные деформации / Дж.Ф. Белл. – М.: Наука, 1984 – 432 с.
11. **Орлов, А.Н.** Введение в теорию дефектов в кристаллах [Текст] / А.Н. Орлов. – М.: Высшая школа, 1983 – 144 с.
12. **Рыбин, В.В.** Большие пластические деформации и разрушение металлов [Текст] / В.В. Рыбин. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.
13. **Алехин, В.П.** Физика прочности и пластичности поверхностных слоев материалов [Текст] / В.П. Алехин. – М.: Наука, 1983. – 280 с.
14. **Дударев, Е.Ф.** Микропластическая деформация и предел текучести поликристаллов [Текст] / Е.Ф. Дударев. – Томск: Изд-во Томского ун-та, 1988. – 256 с.
15. **Дударев, Е.Ф.** Масштабные уровни потери сдвиговой устойчивости на стадии зарождения, формирования и распространения полос Людерса–Чернова [Текст] / Е.Ф. Дударев, Г.П. Почивалова, Г.П. Бакач // Физическая мезомеханика. – 1999. – Т. 2. – № 1–2. – С. 105–114.



Приборы и техника физического эксперимента

УДК 539.1.06

Д.О. Спирин, Я.А. Бердников, Ю.Н. Гавриш

ПРИНЦИПЫ ИНТРОСКОПИИ КРУПНОГАБАРИТНЫХ ГРУЗОВ

Широкая сеть развитых международных транспортных магистралей, значительное число пограничных пунктов пропуска (в том числе оборудованных по упрощенной схеме), наличие которых обусловлено темпами развития внешнеэкономической деятельности, требует усиления контроля над перемещаемыми товарами и транспортными средствами через государственную границу на предмет сокрытия контрабанды, оружия, взрывчатых веществ, наркотиков.

Среди всех видов контроля наибольшую трудность представляет проверка содеримого крупногабаритных грузов (морских и железнодорожных контейнеров) и транспортных средств, включая их конструктивные узлы. Это связано с необходимостью выполнения комплекса трудоемких и длительных погрузочно-разгрузочных работ и практически позволяет осуществить только единичный, выборочный досмотр таких объектов. Очевидно, что только внедрение автоматизированных досмотровых радиометрических комплексов (ДРК) позволит успешно решить данную проблему.

На федеральном государственном унитарном предприятии (ФГУП) «Научно-исследовательский институт электрофизической аппаратуры им. Д.В. Ефремова» совместно с СПбГПУ и в кооперации с рядом российских научных центров (Московский институт радиоэлектроники, радиотехники и автоматики; Томский государственный политехнический университет) был разработан и изготовлен досмотровый радиометрический комплекс, который позволяет с высокой достоверностью проводить досмотр как перевозимых грузов, так и используемых для этих целей транспортных средств.

В основу комплекса положена идея интроскопического контроля крупногабаритных изделий

с использованием в качестве источника тормозного излучения ускорителя электронов с энергией до 9 МэВ [1]. С учетом возможностей получения интенсивных потоков гамма-излучения с высокой стабильностью, кроме получения обычного теневого изображения контролируемого объекта, реализована методика распознавания групп элементов с близким атомным номером методом дуальной энергии. Данная опция позволяет выделять подозрительные области для нелегального провоза взрывчатых и наркотических веществ, имеющих, как правило, низкий атомный номер, а также наличие радиоактивных веществ и в первую очередь делящихся, которые имеют большой атомный номер. Определение делящихся веществ возможно даже при использовании необходимой при перевозке данных веществ биологической защиты.

Использование линейного ускорителя, который обладает высокой мощностью тормозного излучения, позволяет применение систем детектирования с малыми размерами детекторов, что обеспечивает высокое пространственное разрешение при досмотре инспектируемых грузов.

Значительное увеличение эффективности контроля достигается переходом к трехмерному изображению объектов, в частности посредством стереовидения. Подобные системы предполагают расщепление потока фотонов с высокой энергией на два расходящихся пучка в пределах диаграммы направленности, две системы коллимации и две детекторные линейки для сбора данных. Далее информация с детекторных линеек для двух ракурсов программным путем сортируется и нормализуется для получения стандартной стереопары, последующая обработка которой позволяет вывести ее на специализированный экран для наблюдения.



Стереовидение содержимого контейнера позволяет получить не только объемное изображение объектов контроля, но и определить численно расстояние до них, а, следовательно, их расположение в контейнере.

Все технологическое оборудование комплекса (ускорители и системы детектирования) располагается в радиационно-защищенном помещении на подвижном портале (рис. 1), который равномерно перемещается со скоростью 0,4 м/с вдоль инспектируемого объекта.

Въезд и выезд досматриваемого объекта в это помещение осуществляется через откатные ворота, вход обслуживающего персонала – по специальному лабиринту, снабженному радиационно-защищенными дверями. Обслуживающий персонал комплекса располагается в специальном помещении модульного типа, оснащенного всеми необходимыми инженерными коммуникациями для нормальной жизнедеятельности.

В табл. 1 приведены основные параметры комплекса для контроля крупногабаритных транспортных средств и грузов на наличие запрещенных к перевозке веществ и предметов.

Таблица 1

Основные параметры досмотрового радиометрического комплекса

Параметр	Значение
Максимальная инспектируемая толщина объекта в эквиваленте по стали, мм	320
Пространственное (усредненное) разрешение, мм	3
При этом обеспечивается обнаружение следующих стальных проволочек диаметром, мм:	
без преграды	1
за преградой из стали толщиной 100 мм	2
250 мм	8
Пространственное разрешение для контрастных объектов, мм	1
Разрешение по плотности (контрастная чувствительность), %	1
Восстановление координат и габаритных размеров объектов в досматриваемом грузе (не хуже), мм	40–100
Производительность комплекса для контейнеров (2,5 × 2,5 × 12 м), контейнеры/час	25



Рис. 1. Расположение основного технологического оборудования досмотрового радиометрического комплекса (ДРК):
1 – бетатрон, 2 – детекторные линейки, 3 – линейный ускоритель, 4 – система перемещения

Состав технологического оборудования комплекса можно разделить на две группы:

основное, обеспечивающее получение и обработку теневых изображений контролируемого объекта;
вспомогательное, обеспечивающее нормальное функционирование основного оборудования и предоставляющее дополнительную информацию об условиях эксплуатации.

Состав основного технологического оборудования:

линейный ускоритель электронов с энергией 6 МэВ в локальной биологической защите;
бетатрон с энергиями 4,5 и 9 МэВ в локальной биологической защите;

модульные детекторные линейки высокого разрешения (два комплекта) и высокой чувствительности (один комплект) для регистрации и первичной обработки тормозного излучения, прошедшего исследуемый объект;

система формирования веерного тормозного излучения для облучения исследуемого объекта;

система перемещения ускорителя с системами формирования веерного тормозного излучения и детектирования вдоль исследуемого объекта;

автоматизированная система управления комплексом с функциями обработки теневых рентгеновских изображений и архивирования.

Вспомогательное технологическое оборудование содержит следующие системы:

- энергообеспечения;
- радиационной безопасности;
- видеонаблюдения;
- селекторной связи;
- пожаротушения;
- откатных въездных и выездных дверей;
- отопления и вентиляции.

Линейный ускоритель электронов

В данной установке применена ускоряющая структура на стоячей волне, представляющая собой последовательность ускоряющих резонаторов и резонаторов связи, причем последние расположены на осях структуры. Ускоряющая структура обеспечивает высокий темп ускорения, что позволяет сократить как ее длину, так и длину излучателя в целом.

Высокочастотная фокусировка позволяет получить достаточно узкие электронные пучки диаметром не более 1,8 мм без использования дополнительных корректирующих и фокусирующих катушек.

В качестве источника мощности СВЧ используется магнетрон десятисантиметрового диапазона на импульсную мощность 1,8 МВт с механической перестройкой частоты, который работает в диапазоне 2995–3002 МГц. Точная настройка магнетрона на частоту ускоряющей структуры осуществляется с помощью плунжера, вводимого в резонатор магнетрона и управляемого механическим устройством подстройки частоты с электродвигателем.

В качестве источника электронов используется трехэлектродная электронно-оптическая система с косвенным подогревом катода.

Импульсное катодное напряжение подводится к источнику электронов от высоковольтного импульсного трансформатора.

Для стабилизации энергии и мощности дозы тормозного излучения, в наибольшей степени зависящей от согласования частоты высокочастотных колебаний, генерируемых магнетроном, с резонансной частотой ускоряющей структуры, используется быстродействующая система автоматической подстройки частоты.

Основные технические характеристики ускорителя:

энергия ускоренных электронов – 6 МэВ;

мощность дозы тормозного излучения на расстоянии 1 м от тормозной мишени на оси пучка – 5 Гр;

диаметр электронного пучка на тормозной мишени – не более 1,8 мм;

частота следования импульсов излучения – 50–250 Гц;

длительность импульса излучения – до 4 мкс.

Для формирования веерных пучков тормозного излучения в сторону линеек приемных детек-

торов используется первый щелевой коллиматор, угол раствора которого составляет 6 град. Далее расположен второй коллиматор, формирующий два расходящихся под соответствующим углом веерных пучка (рис. 2).

При штатной работе комплекса управление работой ускорителя осуществляется по командам с центрального компьютера комплекса, связь с которым осуществляется через блок системы управления.

Бетатрон МИБ-6/9

Бетатрон МИБ-6/9 является источником тормозного излучения, способным работать в режиме дуальной энергии, и оптимизирован для использования в системах досмотра крупногабаритных объектов. Внешний вид бетатрона с элементами локальной защиты и системы формирования веерного выходного пучка представлен на рис. 3.

Основные технические параметры бетатрона: максимальная энергия ускоренных электронов – 9,0 МэВ;

мощность дозы тормозного излучения на расстоянии 1 м от мишени на оси пучка – не менее 0,3 Гр/мин;

геометрические размеры фокусного пятна – $0,2 \times 2,5$ мм;

частота следования импульсов излучения – 400 Гц;

длительность импульса излучения – 2–5 мкс.

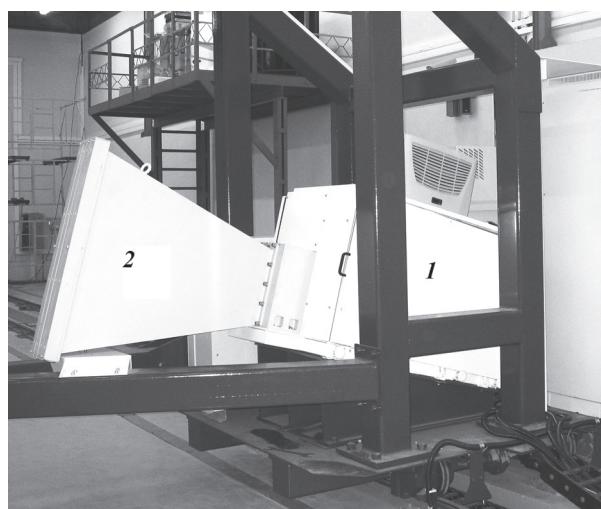


Рис. 2. Общий вид ускорителя, установленный на портале ДРК:
1 – линейный ускоритель, 2 – выходной коллиматор



Модульные детекторные линейки

Система приемных детекторов предназначена для измерения распределения остаточной интенсивности веерного пучка тормозного излучения, прошедшего в результате сканирования контролируемый объект, а также последующего преобразования аналоговых сигналов в цифровую форму и передачи полученных данных в компьютер. Система приемных детекторов делится на два типа: высокого разрешения и высокой чувствительности (рис. 4). Принцип их построения идентичен, а отличие заключается в размере приемных детекторов и используемых фотодиодов.

Основные компоненты системы приемных детекторов:

детекторная линейка, выполняющая функции измерения интенсивности гамма-излучения и преобразования полученных данных в цифровую форму;

блок управления, обеспечивающий связь системы с компьютером и управление параметрами ее работы.

Детекторная линейка состоит из однотипных модулей по 8 детекторных каналов в каждом и размещена в кожухе, защищающем ее от влияния рассеянных квантов гамма-излучения и других дестабилизирующих факторов, таких как перепады температур, давления, электромагнитных помех. Измерительные элементы системы устанавливаются по линии веерного пучка.

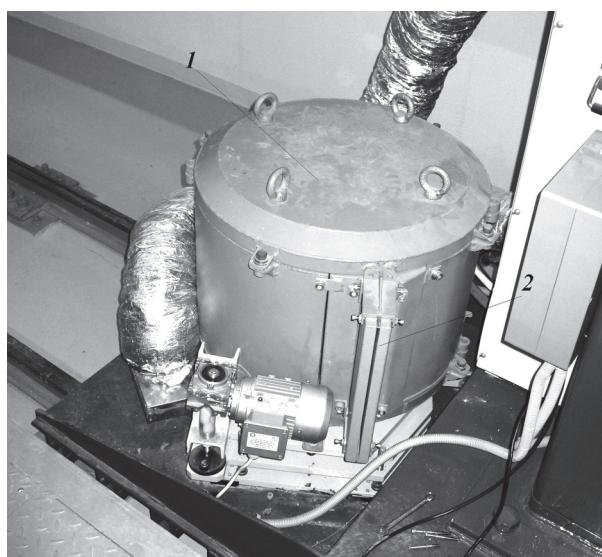


Рис. 3. Общий вид бетатрона МИБ-6/9:
1 – бетатрон, 2 – система формирования веерного
выходного пучка

Первичным измерительным элементом системы приемных детекторов является сцинтиллятор, который в паре с фотодиодом осуществляет преобразование интенсивности гамма-излучения в измеряемый аналоговый электрический сигнал.

Аналоговые сигналы с фотодиодов интегрируются и усиливаются предварительными усилителями. В аналого-цифровом преобразователе происходит преобразование аналоговых сигналов в цифровую форму.

Преобразованные в цифровую форму сигналы поступают на сигнальный процессор, который обеспечивает объединение и буферизацию цифровых данных, а также передачу по протоколу RS422 полученных данных в блок управления.

С помощью блока управления осуществляется синхронизация работы системы приемных детекторов с источником излучения (линейным ускорителем и бетатроном). Для этого на вход блока управления подается внешний синхроимпульс, опережающий импульс ускорителя на несколько микросекунд.

Система перемещения

Система представляет собой стальную конструкцию, на которой располагается все основное технологическое оборудование комплекса.

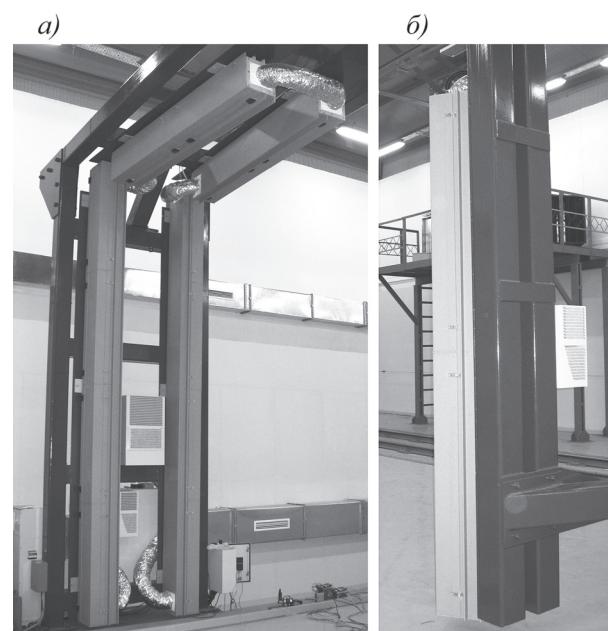


Рис. 4. Общий вид детекторных линеек (находятся внутри стальных корпусов): системы детекторов высокого разрешения (а) и высокой чувствительности (б)

Движение осуществляется по рельсовым направляющим с помощью двух синхронно работающих электродвигателей. Система слежения за движением обеспечивает равномерность и перпендикулярность перемещения портала относительно исследуемого объекта. Управление перемещением портала осуществляется с центрального пульта главного оператора комплекса.

Автоматизированная система управления комплекса

Система предназначена для реализации оперативного контроля, обеспечения радиационной безопасности, анализа и управления технологическим процессом досмотра большегрузного транспорта и контейнеров.

Она выполняет следующие основные функции:

автоматизированное управление технологическим оборудованием досмотрового контроля по заданному алгоритму при 24-часовой длительности работы с поддержанием установленных параметров автоматического режима;

отображение на экране оператора системной информации о ходе досмотрового контроля и состоянии оборудования;

предоставление по каждому сегменту управляющего контура полной информации, включающей значения параметров, управляющих воздействий, шкал приборов, аварийные и предаварийные границы;

вывод информации об исполнении команд оператора, а также регистрация и оповещение об отклонениях параметров за предаварийные и аварийные границы;

обеспечение безопасной работы персонала и фиксация действий оператора при работе с системой;

ведение архивов параметров и событий. В архиве событий сохраняются все команды, поданные оператором с терминала, информация о срабатывании защиты и о предупреждениях;

поддержание протокола обмена информацией с сетями верхнего уровня.

Программный комплекс для восстановления интроскопических изображений

Сотрудниками кафедры экспериментальной ядерной физики СПбГПУ разработано программное обеспечение ДРК для восстановления интроскопических изображений с функцией рас-

познавания групп элементов с близким атомным номером на основе метода дуальной энергии. Программное обеспечение состоит из программы цифровой обработки изображений, позволяющей выводить на экран изображения объекта, полученного при сканировании, и проводить детальный анализ содержимого просвеченных объектов с помощью различных функций фильтрации, коррекции и улучшения интроскопических изображений и базы данных для архивирования результатов сканирования.

Интроскопические исследования основаны на определении радиоскопической прозрачности объекта (отношение интенсивностей излучения, регистрируемых детектором при наличии и в отсутствие объекта). При облучении гомогенного объекта оптической толщиной t из материала с атомным номером Z пучком тормозного излучения с граничной энергией E_0 выражение для радиоскопической прозрачности имеет вид:

$$T(E_0, t, Z) = \frac{\int_0^{E_0} S(E_0, E) \exp(-\mu(E, Z)t) dE}{\int_0^{E_0} S(E_0, E) dE}, \quad (1)$$

где $\mu(E, Z)$ – массовый коэффициент ослабления излучения с энергией квантов E ; $S(E_0, E)$ – произведение спектральной плотности интенсивности излучения и функции отклика детектора.

Спектральную плотность интенсивности излучения представляем в виде произведения спектральной плотности интенсивности тормозного излучения (формула Шиффа [2]) и коэффициента, учитывающего ослабление низкоэнергетической части спектра предварительным фильтром.

Используя выражение (1), можно составить для различных значений Z таблицы соответствия прозрачности оптической толщине при обоих значениях граничных энергий тормозного спектра ($E_{01} = 9$ МэВ и $E_{02} = 4,5$ МэВ). Для определения атомного номера материала по измеренным значениям прозрачности при граничных энергиях E_{01} и E_{02} определяем по таблицам соответствия значения оптической толщины $t_1(Z)$ и $t_2(Z)$ для каждого из рассматриваемых значений Z . Учитывая, что оптическая толщина не зависит от граничной энергии спектра, идентификацию атомный номер определяем из условия минимума функционала



$$F(Z) = \frac{|t_1(Z) - t_2(Z)|}{t_1(Z)}. \quad (2)$$

Если объект имеет гетерогенную структуру, то можно оценить только эффективное значение Z_{eff} атомного номера составляющих его материалов, соответствующее среднему массовому коэффициенту ослабления

$$\langle \mu(E, Z) \rangle = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^N \mu(E, Z_i) t_i, \quad (3)$$

где Z_i и t_i – атомный номер и массовая толщина каждого гомогенного участка объекта, N – количество таких участков, t – полная оптическая толщина объекта.

С точки зрения поглощения излучения гетерогенный объект можно рассматривать как гомогенный с суммарной массовой толщиной и усредненным коэффициентом поглощения. По измеренным в эксперименте прозрачностям можно оценить эффективное значение атомного номера, используя таблицы соответствия и минимизируя функционал (2). Таким образом, для объекта с гетерогенной структурой метод дуальной энергии позволяет определить только некоторое эффективное значение атомного номера. Поэтому рассматривается задача распознавания только определенных групп элементов:

легкие материалы ($Z_{eff} = 5$);

материалы со средним атомным номером ($Z_{eff} = 13$);

«неорганические» материалы ($Z_{eff} = 26$);

тяжелые элементы ($Z_{eff} = 82$).

Распознавание групп материалов по величине Z производится по измеренным значениям прозрачностей для обоих значений граничных энергий. Используются два критерия. По таблицам соответствия для измеренных прозрачностей и каждого рассматриваемого значения Z определяются оптические толщины, а затем путем минимизации функционала (2) определяется Z . Второй критерий основан на определении отношения логарифмов прозрачностей при высокой и низкой энергиях:

$$R(E_{01}, E_{02}, t, Z) = \frac{\ln T(E_{01}, t, Z)}{\ln T(E_{02}, t, Z)}, \quad (4)$$

данное выражение есть также отношение усредненных по спектру эффективных коэффициентов ослабления при высокой и низкой энергиях. При использовании предварительного фильтра, ослабляющего

низкоэнергетическую часть тормозного спектра, величина R для определенного значения оптической толщины однозначно связана с атомным номером. Таким образом, совместное использование обоих критерий позволяет однозначно определить соответствие материала одной из групп элементов.

Испытания ДРК

В ходе комплексных испытаний была проверена совместимость работы оборудования и получены основные радиометрические параметры, такие как разрешающая способность, а также определены максимальные толщины, которые можно контролировать с помощью данного оборудования [3].

Проверка разрешающей способности комплекса проводилась на тестовых объектах, расположенных на расстоянии 2 м (приблизительно центр исследуемого грузового автотранспортного средства) от чувствительной области модульной детекторной линейки. Тестовый объект представлял собой набор стальных пластин толщиной 10 и 6 мм, длиной и шириной 400 мм, за которыми размещался набор из 14 стальных проволочек диаметрами 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 12, 14, 16, 18 и 20 мм. Измерения проводились как на линейках высокого разрешения, так и высокой чувствительности.

Последовательность измерений была следующей: составлялись стальные пластины определенной толщины, за которыми размещался полный набор стальных проволочек. Затем портал с радиометрической аппаратурой, установленной на штатных местах, проезжал вдоль данного тестового объекта с номинальной скоростью. На полученных теневых изображениях после программной обработки определялась проволочка с минимальным диаметром (рис. 5). Толщина слоя стальных пластин варьировалась от 60 до 260 мм.

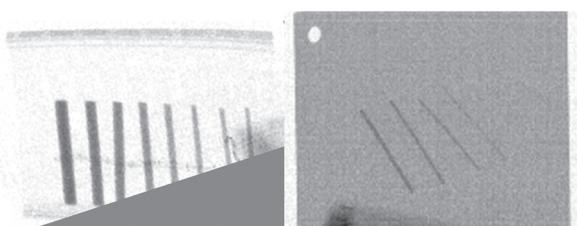


Рис. 5. Интроскопическое изображение полного набора тестовых проволочек (14, две из них диаметром 1–2 мм – не различимы) различного диаметра за железным барьером толщиной 140 мм. Минимальный диаметр видимой проволочки равен 3 мм



На основе результатов измерений, представленных в табл. 2, можно сделать вывод, что чувствительность досмотрового радиометрического комплекса не уступает зарубежным аналогам [4].

Таблица 2

Результаты тестовых испытаний

Толщина слоя из стальных пластин, мм	Минимальный диаметр видимой проволочки, мм	
	Детекторная линейка высокого разрешения	Детекторная линейка высокой чувствительности
60	1	3
100	2	3
140	3	5
200	6	8
240	—	10
250	8	—
260	—	14

Проверялась также эффективность математических алгоритмов обработки теневого изображения с помощью разработанного программного обеспечения. Для этого было получено теневое изображение грузового автомобиля. Результаты этих измерений представлены на рис. 6.

Основные преимущества ДРК

Досмотровый радиометрический комплекс предназначен для контроля крупногабаритных автотранспортных средств и грузов на наличие запрещенных к перевозке веществ и предметов и обеспечивает высокий уровень выявляемости недекларированных товаров, прежде всего оружия, взрывчатых и делящихся веществ, взрывных устройств и т. п. ДРК успешно прошел государственные испытания и в настоящее время находится в эксплуатации.

Основные преимущества ДРК (реализованы впервые на аналогичных установках):

- исключены мертвые зоны при досмотре исследуемого объекта за счет получения теневых изображений с трех различных ракурсов;
- позволяет проводить анализ подозрительных областей для нелегального провоза грузов с применением методики распознавания групп элементов с близким атомным номером в режиме реального времени;

- повышена эффективность контроля исследуемых объектов за счет использования трехмерного изображения посредством стереовидения.



Рис. 6. Интроскопическое изображение кабины грузовика после программной обработки (внутри находился манекен)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ворогушин, М.Ф. Новое поколение линейных ускорителей электронов для радиографии, интроскопии и томографии [Текст] / М.Ф. Ворогушин, Ю.Н. Гавриш, В.П. Багриевич [и др.] // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Электрофизическая аппаратура». – 2002. – Т. 27. – № 1. – С. 24.
2. Shiff, L.I. Energy-angle distribution of thin target bremsstrahlung [Text] / L.I. Shiff // Phys. Rev. – 1951. – Vol. 83. – № 2. – P. 252–253.



3. ASTM E747 – 2004. Standard practice for design, manufacture and material grouping classification of wire image quality indicators (IQI) used for radiology [Text] // Book of Standards. – ASTM Int., 2004. – 1440 p.

4. Heimann CargoVision. X-ray inspection systems [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.heimanncargo.com>.

УДК 535.41, 535.39.01

Г.А. Кафидова, Д.В. Мокрова

ВОЗМОЖНОСТИ НЕКОНТАКТНОЙ РЕГИСТРАЦИИ ПУЛЬСОВОЙ ВОЛНЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫМ СПЕКЛ-ДАТЧИКОМ

Важнейшей системой, обеспечивающей жизнедеятельность организма, является сердечнососудистая система (ССС). Ее болезни широко распространены, но в силу огромной компенсаторной способности сердца далеко не все проявляются выраженным симптомами и поэтому не диагностируются традиционными методами. В связи с этим актуально создание приборов и систем оперативного контроля состояния ССС человека и животных. При этом следует отдавать предпочтение приборам, основанным на неинвазивных и бесконтактных методах измерения.

Оценить деятельность ССС можно путем регистрации механических, акустических и биоэлектрических проявлений сердечной деятельности. Среди инструментальных методов, позволяющих это осуществить, широко применяются электрокардиография (ЭКГ) и методы, основанные на регистрации пульсовой волны.

Одним из многообещающих методов регистрации пульсовой волны признается метод неконтактной когерентно-оптической регистрации, основанный на принципах оптики спеклов. Перспективность внедрения аппаратуры на его основе в практическую медицину объясняется его неинвазивностью, то есть он позволяет определять диагностические показатели без нарушения целостности кожных покровов и слизистых оболочек организма, что, в частности, снижает требования к стерильности окружающей среды (неприспособленные помещения и полевые условия для человека, фермы, пастбища для животных).

Получение информационных сигналов неконтактным методом основано на следующих явлениях. Рассеяние когерентного излучения на шеро-

ховатых поверхностях, в том числе на биотканях, приводит к формированию в отраженном световом потоке спекл-поля [1]. Спеклы – это световые пятна, хаотически расположенные в плоскости наблюдения. Если рассеивающий объект находится в движении, то спекл-структура также меняется во времени и пространстве. Взаимосвязь динамики объекта, рассеивающего лазерное излучение, и статистических свойств формирующегося при этом спекл-поля позволяет детектировать необходимый сигнал.

Цель данного исследования – разработка лабораторной модели неконтактного дифференциального лазерного оптоэлектронного спекл-датчика формы пульсовой волны, а также пульсовых последовательностей.

Возможной практической реализацией преобразователя пульсовых волн неконтактного типа в сигнал является датчик, регистрирующий изменения интенсивности спекл-поля, которое формируется за счет оптического рассеяния лазерного излучения кожей человека в области источника пульса. Вариант построения такого датчика был рассмотрен в статье [2]. Работоспособность предложенной модели была подтверждена измерениями артериальных пульсовых волн у волонтеров.

Как показали проведенные измерения, в области малых значений амплитуд вибраций регистрация пульсовой волны таким датчиком оказалась затруднительной, кроме того, схема проявила высокую чувствительность к внешним вибрациям и засветкам. Преодолеть эти недостатки можно путем использования оптической дифференциальной методики регистрации пульсовой волны. Датчики, работа которых основана на такой методике,

позволяют регистрировать вибрации с амплитудой, соизмеримой с длиной волны когерентного излучения. Кроме того, работа таких преобразователей мало подвержена влиянию внешних механических вибраций, изменениям температуры и паразитным засветкам.

Основной принцип его работы – это расщепление пучка света на несколько когерентных лучей, которые в результате взаимодействия с исследуемым объектом (кожа человека) проходят различные оптические пути, а затем сходятся вместе и интерферируют. За счет того, что поверхность объекта исследования находится в движении и деформируется (вибрирует), изменяется разность хода между световыми пучками, в результате в спектре происходит смещение интерференционных полос. Если регистрировать изменение интенсивности в некоторой точке спектра, вызванное движением полос, то можно зафиксировать поверхностные вибрации объекта. В работе [3] подробно исследован механизм формирования выходного сигнала спектр-интерферометра для анализа биовибраций. Показано, что такой нормализованный сигнал определяется выражением вида

$$U_i = A_i \sin[\alpha_i + 2\pi A_b(\lambda)H(t)], \quad (1)$$

где A_i и α_i – некоторые случайные величины, определяемые случайной реализацией малого участка рассеивающей поверхности с номером i , $H(t)$ – нормализованный сигнал вибраций с единичной дисперсией, $A_b(\lambda)$ – амплитуда разностного сигнала колебаний поверхности в двух точках освещения (измеряется в длинах волн лазерного излучения λ).

В данной работе было рассмотрено несколько вариантов построения оптической дифференциальной схемы, отличающихся способом разделения светового пучка и геометрией взаимодействия с исследуемой поверхностью. Это было необходимо для выявления оптимального способа регистрации пульсовой волны и создания наилучшей практической модели датчика.

На рис. 1, a представлена схема устройства, формирующего интерференционную картину полос, чувствительную к смещениям предмета в его собственной плоскости. Предмет расположен в плоскости x_2x_3 и освещается двумя плоскими волнами I'_0 и I''_0 , которые распространяются под углами θ и $-\theta$ относительно нормали к поверхности предмета (ось x_1). Ось x_3 направлена перпен-

дикулярно к плоскости страницы (к ней), центр линзы лежит на оси x_1 . Если элемент поверхности предмета смещается на вектор $\mathbf{d} = (d_1, d_2, d_3)$, то возникающая разность фаз двух волн находится как

$$\Delta\phi = (4\pi d_2 \sin \theta) / \lambda. \quad (2)$$

Разность фаз между I'_0 и I''_0 остается постоянной в любой плоскости, параллельной плоскости x_1x_3 , поэтому лежащие в такой плоскости компоненты d_1 и d_3 вектора смещения не влияют на возникающую разность фаз. Следовательно, рассматриваемый тип интерферометра позволяет выделять компоненты смещения предмета в его собственной плоскости даже тогда, когда они сопровождаются смещениями по нормали к поверхности предмета [4].

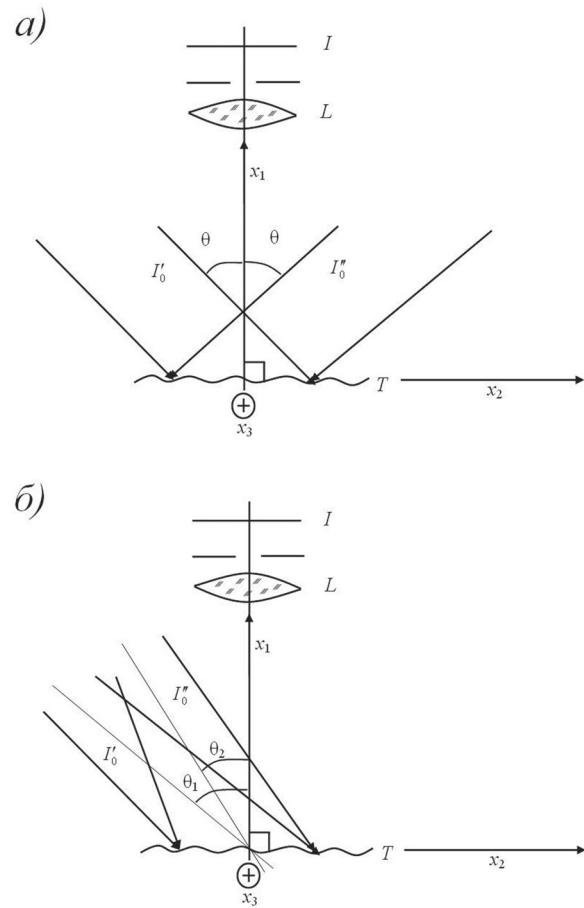


Рис. 1. Оптическая схема дифференциального спектр-вibрометра, чувствительного к смещениям в плоскости x_2x_3 (a) и в направлении оси x_1 (b).
 I – интенсивность регистрируемого сигнала, I'_0, I''_0 – интенсивности плоских волн, падающих под углами θ и $-\theta$ (a) либо θ_1 и θ_2 (b); L – линза, T – предмет



Из уравнения (2) можно найти интервалы между интерференционными полосами Δx_2 и Δx_3 , отсчитанные соответственно в направлениях осей x_2 и x_3 :

$$\begin{aligned}\Delta x_{2(3)} &= 2\pi / (\partial \Delta \varphi / \partial x_{2(3)}) = \\ &= \lambda / [d_{2,2}(d_{2,3}) 2 \sin \theta].\end{aligned}\quad (3)$$

При аналогичной геометрии освещения с заменой направления оси x_2 на x_3 возникает интерференционная картина, для которой

$$\Delta \varphi = (4\pi d_3 \sin \theta) / \lambda, \quad (4)$$

$$\Delta x_{2(3)} = \lambda / [2d_{3,2}(d_{3,3}) 2 \sin \theta]. \quad (5)$$

Нами была создана оптико-механическая модель данной схемы и проведено исследование ее возможностей на эксперименте. В качестве рассеивающего свет объекта была выбрана мембрана из шероховатой бумаги, вибрирующая под действием звукового поля. Последнее создавалось динамиком, расположенным на расстоянии 15 см от мембраны, на которую подавался сигнал от звукового генератора. Изменения интенсивности света в некоторой точке спекла, вызванные движением интерференционных полос, передавались на фотоприемник (фотоэлектронный умножитель – ФЭУ) с помощью сопряженного с ним одномодового оптического волокна. Полученные с ФЭУ сигналы регистрировались на осциллографе (рис. 2). Осциллограммы соответствовали форме поверхностных вибраций мембраны.

На рис. 1, б приведена оптическая схема устройства, с помощью которого можно получить картину спекл-корреляционных интерференционных полос, чувствительных к нормальным смещениям (вдоль оси x_1). В этом случае разность фаз определяется соотношением

$$\Delta \varphi = 2\pi(\cos \theta_1 - \cos \theta_2)d_1 / \lambda, \quad (6)$$

где θ_1 и θ_2 – углы между направлениями двух световых пучков I'_0 и I''_0 соответственно и нормалью к поверхности предмета.

Наблюдение ведется в направлении нормали. Если θ_1 и θ_2 близки по величине, то разность $(\cos \theta_1 - \cos \theta_2)$ мала и можно наблюдать линии, соответствующие нормальным смещениям предмета.

Для данной схемы был проведен аналогичный модельный эксперимент (см. рис. 2, а), результат которого представлен на рис. 2, б.

Для натурных измерений пульсовой волны была выбрана схема, чувствительная к смещениям объекта в его собственной плоскости (x_2x_3), так как она позволяла наиболее адекватно регистрировать контрольный гармонический сигнал. Следует отметить, что из-за многослойной и многокомпонентной структуры кожи взаимодействие света с ней оказывается весьма сложным. Большая часть отраженного кожей света образуется за счет обратного рассеяния различными слоями ткани (ротовой слой, эпидермис, дерма и микрососудистая система) [5]. Натурные испытания спекл-виброметра, чувствительного к смещениям в плоскости предмета, подтвердили тот факт, что рассеяние зондирующего света на подкожных биологических тканях искажает информативное спекл-поле. С целью уменьшения этого влияния произведена замена прежнего источника света с рабочей

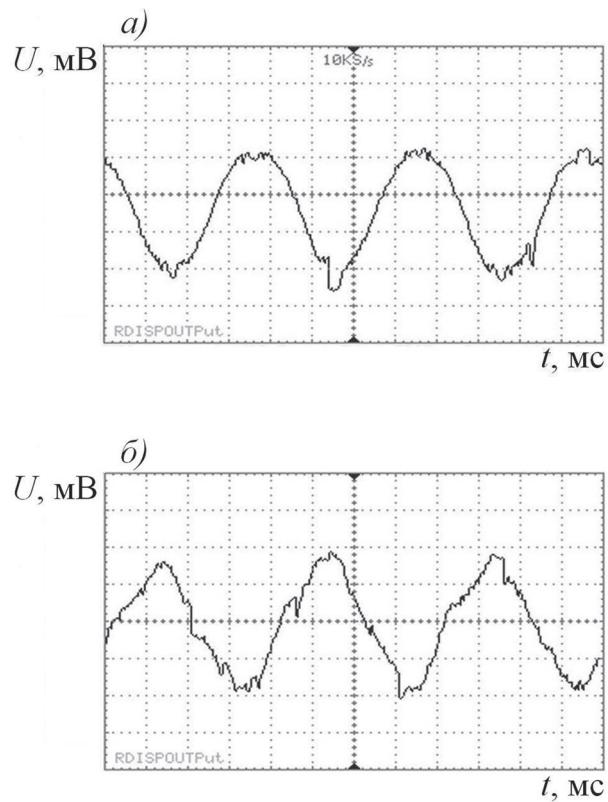
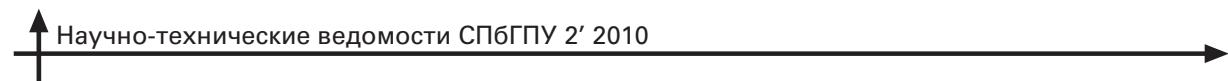


Рис. 2. Результат модельных экспериментов на дифракционном спекл-виброметре. Осциллограммы сигналов с ФЭУ (а, б), полученных с помощью схем, приведенных на рис. 1, а, б соответственно



длиной волны 650 нм на источник с более короткой длиной волны – 532 нм, так как излучение последнего такого типа обладает меньшей проникающей способностью. Вид зарегистрированной пульсовой волны при иных условиях представлен на рис. 3. Регистрация информационного сигнала осуществлялась на расстоянии 70 мм от исследуемого участка кожи.

Следует отметить, что форма зарегистрированного сигнала совпадает с формой пульсовой волны, регистрируемой традиционными методами [6]. В частности, на рис. 3, б виден крутой подъем основной волны, обусловленный открытием аортального клапана и переходом крови из левого желудочка в аорту, далее происходит захлопывание аортального клапана, что сопровождается повышением давления в аорте, формирующим дicroтическую волну.

Таким образом, в работе предложена высокочувствительная схема неконтактного оптоэлектронного спекл-датчика для регистрации пульсовых волн, а в более широком смысле – микровибраций биологических объектов (например мышечного тремора). Разработана и исследована лабораторная модель такого датчика, подтвердившая измерительные возможности предложенной схемы и перспективность подхода к решению задачи в целом.

Работа поддержана грантами правительства Санкт-Петербурга для студентов и аспирантов за 2008, 2009 годы и программы «Участник молодежного научно-инновационного конкурса» («У.М.Н.И.К.») за 2008, 2009 годы.

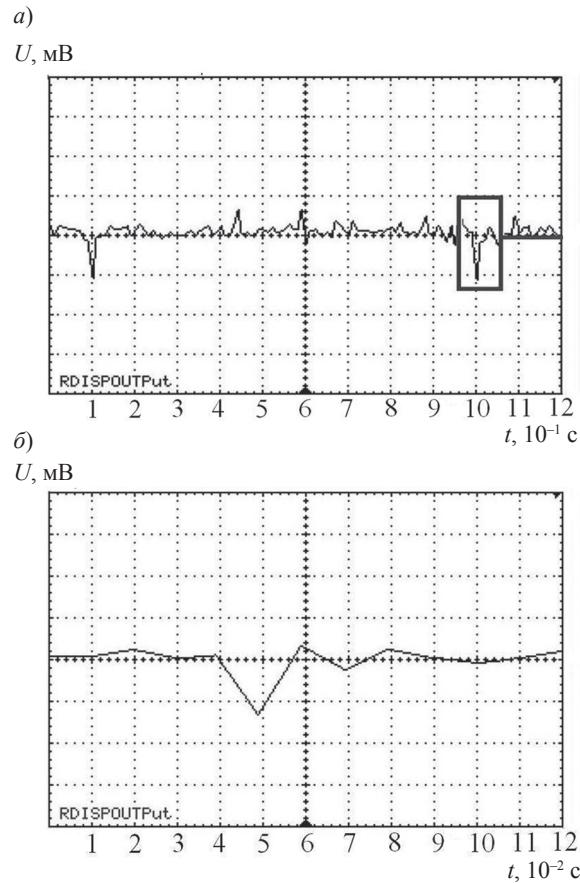


Рис. 3. Результат натурного эксперимента – осциллографмы зарегистрированной пульсовой волны в разных масштабах по оси времени: *а* – в десятых долях секунды, *б* – фрагмент развертки *а* (выделен прямоугольником) в сотых долях секунды

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Франсон, М.** Оптика спеклов [Текст] / М. Франсон; пер с англ. под ред. Ю.И. Островского. – М.: Наука, 1980.–171 с.
2. **Мокрова, Д.В.** Спекл-датчик вибраций диффузно отражающих объектов [Текст] / Д.В. Мокрова // Научно-техн. ведомости СПбГПУ. Сер. Физ.-мат. науки.–2008. – № 6 (62). – С. 127–131. Библиогр.: С.131.
3. **Tuchin, V.V.** Speckle-interferometry in the measurements of biotissue vibrations [Text] / V.V. Tuchin, V.P. Ryabukho, S.S. Ulyanov// SPIE. – 1992. – Vol. 1647. – P. 125–136.
4. **Джоунс, Р.** Голографическая и спекл-интерферометрия [Текст]; пер. с англ. / Р. Джоунс, К. Уайкс. – М.: Мир, 1986. – 327 с.
5. **Тучин, В.В.** Лазеры и волоконная оптика в биомедицинских исследованиях [Текст] / В.В. Тучин. – Саратов: Изд-во Саратов. гос. ун-та, 1998. – 383 с.
6. **Десова, А.А.** Исследование структуры пульсового сигнала лучевой артерии на базе информации о его спектральном составе [Текст] / А.А. Десова, А.А. Дорофеюк, В.В. Гучук // Биомедицинская радиоэлектроника. – 2007. – № 11. – С. 15–20.



УДК 621.373.8

A.B. Краснов, В.А. Парфенов

ИСТОЧНИК ПИТАНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ЛАЗЕРНЫХ ДИОДОВ

Полупроводниковые лазерные диоды (ЛД) для накачки твердотельных лазеров, ориентированные прежде всего на работу с неодимсодержащими кристаллами, в настоящее время представляют собой надежно работающие приборы. Они выпускаются многими фирмами, например [1, 2], и широко используются в приборах квантовой электроники.

Стандартный ряд выходных мощностей излучения одиночных диодов следующий: 1, 2, 3, 4, 8 и 10 Вт [1, 2]. Наиболее часто используются диоды мощностью 1 и 2 Вт. Основные параметры некоторых из них представлены в таблице. Под КПД здесь понимается отношение мощности выходного излучения к электрической мощности, потребляемой лазерным диодом.

Основные параметры полупроводниковых лазерных диодов [2]

Параметр	Значение параметра для модели			
	ATC-C1000-100	ATC-C2000-100	ATC-C3000-380	ATC-C4000-500
Выходная мощность, Вт	1	2	3	4
Рабочий ток, А	1,3	2,3	3,8	5,1
Рабочее напряжение, В	1,8	1,9	1,9	1,9
КПД, %	43	46	42	41

Вместе с тем, проблема создания источников питания для обеспечения их работы остается актуальной.

Лабораторные источники питания, предназначенные для работы с лазерными диодами, выпускаются промышленностью. Они позволяют регулировать токи накачки и температуру диодов в широких пределах. Специальных требований к их габаритам и потребляемой мощности не предъявляется.

Для реальных же приложений такие источники не подходят. Прежде всего потому, что лазеры

совместно с источниками питания обычно встраиваются в разрабатываемую аппаратуру. Условия эксплуатации лазеров при этом достаточно постоянны и не требуют широкого диапазона варьирования выходных параметров. Не нужна и развитая система их индикации.

Приоритет на практике отдается надежно работающим, максимально простым схемотехническим решениям, с малыми габаритами и минимальным энергопотреблением. Заметим, что по сути такие же требования определяют тенденции совершенствования и развития всей современной техники, включая оптоэлектронику. Этому в немалой степени способствует развитие специализированной электронной базы.

Целью настоящей работы явилось решение проблем, возникающих при создании блоков питания лазерных диодов. При этом разрабатывался источник питания, рассчитанный на работу в составе аппаратуры и обладающий малыми габаритами и энергопотреблением. Ставилась также задача проанализировать возможность использования разработанных схемных решений для всего спектра указанных моделей лазерных диодов.

Источники питания ЛД должны обеспечивать выполнение следующих функций:

плавный выход на рабочий режим. Другими словами, подъем тока через диод до рабочего значения должен происходить постепенно в течение заданного времени. Этим достигается безопасное включение диода;

стабилизация тока лазерного диода. Направлен на стабилизацию режима работы ЛД. Падение напряжения на диоде практически постоянно, так как мало меняется с изменением тока. Тем самым стабилизируются условия работы диода и пассивным образом – выходная мощность излучения;

ограничение величины тока, протекающего через диод, максимально допустимым значением. Тем самым реализуется защита диода от потенциально возможных кратковременных «бросков» напряжения и, как следствие, тока в процессе

включения-выключения источника питания, а также при несанкционированном отключении питания;

стабилизация температуры диода. Необходима для оптимального совмещения спектра излучения ЛД со спектром поглощения активной среды, которое реализуется при фиксированной для каждого диода температуре, обычно вблизи 20–25 °C. Требуемая для этого точность поддержания температуры составляет 0,2 °C. Одновременно решается задача отвода тепла, выделяющегося при работе диода;

реализация специальных режимов работы, таких как дистанционное управление лазерным диодом, измерение его рабочих параметров, внешняя модуляция излучения накачки, стабилизация уровня мощности излучения накачки и т. п.

В соответствии с перечисленными функциями в источнике питания ЛД обычно выделяют два основных независимых блока: стабилизации тока и стабилизации температуры. Для их создания либо используют специализированные интегральные микросхемы, либо реализуют схемы на дискретных элементах широкого назначения, таких как аналоговые микросхемы, микроконтроллеры, полевые транзисторы.

Знакомство с известными ИС для стабилизации тока и температуры показывает, что их «адаптация» для решаемой задачи может столкнуться с существенными трудностями. Так например, группа микросхем для связных применений рассчитана на работу с маломощными диодами. Стабилизаторы тока мощных светодиодов (например Zetex ZXSC400) являются импульсными, что в данном случае неприемлемо, поскольку ЛД крайне чувствительны к импульсным помехам, особенно обратной полярности. Наличие помех приводит к выходу диодов из строя. Микросхемы – стабилизаторы температуры обычно ориентированы на бытовые применения (точность ± 1 °C). Группа микросхем, обеспечивающих высокую стабильность температуры (до 0,01 °C), таких как Linear Technology LTC1923, Maxim MAX1969, Analog Devices ADN8830 отличаются сравнительно высокой ценой и сложностью подключения. Высокий уровень стабилизации температуры в нашем случае не согласуется с используемыми пассивными мерами защиты лазерного диода и с инерционностью реализуемой системы регулирования (объем, а также вынужденное разнесение датчика температуры и объекта терmostабилизации).

В связи с отмеченными препятствиями было решено отказаться от применения известных спе-

циализированных ИС и использовать электронные компоненты широкого назначения.

Разработанный блок питания содержит регулируемый стабилизатор тока, термоконтроллер и схему управления. Функциональная схема устройства приведена на рис. 1.

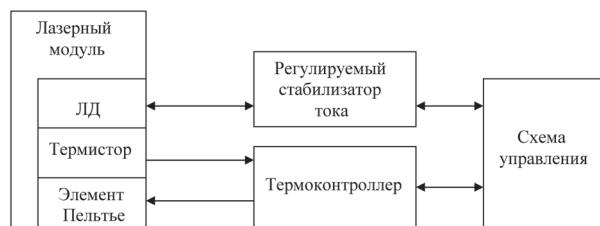


Рис. 1. Функциональная схема источника питания

Проблемным моментом в снижении энергопотребления оказались потери энергии в силовых цепях обоих стабилизаторов.

Стабилизатор тока лазерного диода (СТ) использует в качестве источника тока, управляемого напряжением, MOSFET-транзисторы. Для диода с током 1–2 А это могут быть транзисторы типа IRF7455 в корпусе SO-8, для тока в 10–20 А – мощные транзисторы, например IRL3302 в корпусе TO-220 или D2-РАС. Типовой вид зависимости тока стока от напряжений на стоке и затворе приведен на рис. 2.

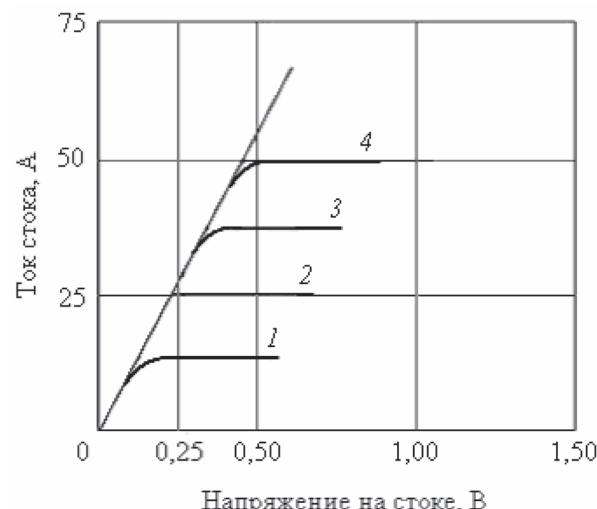
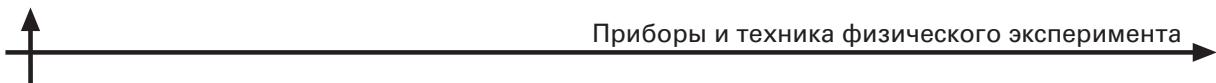


Рис. 2. Типовая зависимость тока стока полевого транзистора от напряжения на стоке
Напряжения на затворе, В: 3,0 (1); 3,5 (2); 4,0 (3); 4,5 (4)



Как видно из приведенной зависимости, транзисторы могут управляться уже при напряжениях сток-исток более 0,1 В. При этом требуемые токи накачки можно получать при напряжениях сток-исток величиной 0,2 – 0,3 В и не более 0,5 В во всем диапазоне рабочих температур. Отсюда легко оценить потери мощности на управляющем элементе. В сравнении с напряжением на лазерном диоде $U_{LD} = 2$ В потери величиной 0,2–0,3 В составляют, в зависимости от тока, от 10 до 25 % по отношению к мощности, потребляемой непосредственно диодом.

Другим источником потерь является датчик тока. В простейшем варианте таким датчиком служил резистор сопротивлением не более 0,1 Ом. Одновременно он использовался для ограничения тока лазерного диода. При токе в 2–3 А падение напряжения на резисторе составляет величину не более 0,2–0,3 В. Таким образом, теряемая на этом элементе мощность в виде тепла составляет 0,4–0,9 Вт. С ростом величины тока измерительное сопротивление необходимо уменьшать. Поскольку активные потери растут пропорционально квадрату величины тока, по мере увеличения тока будет наблюдаться относительный опережающий рост тепловыделения по сравнению с ростом напряжения. В любом случае желательно не переходить за уровень тепловыделения около 1 Вт. Тем не менее, отсюда следует, что учет этого фактора с точки зрения энергопотерь также важен и по величине соизмерим с уровнем потерь на проходном транзисторе.

Проведенный анализ также показывает, что величина питающего напряжения для данной схемы должна составлять 2,7–3,0 В. Увеличение напряжения просто ведет к росту потерь.

Поддержание стабильной рабочей температуры лазера осуществляется с помощью термоконтроллера, использующего в качестве исполнительного устройства элемент Пельтье (термоэлектрический модуль). Датчик температуры выполнен на основе термистора. Термоконтроллер обеспечивает регулировку рабочей температуры лазера в пределах 10–30 °C и поддержание ее с точностью не хуже 0,2 °C. Для обеспечения высокого КПД термоэлектрический модуль включается в мостовую схему из MOSFET-транзисторов, которая управляется импульсным сигналом (рис. 3) [3]. Падение напряжения на каждом из транзисторов минимально и соответствует напряжению насыщения. Путем регулировки времени нахождения ключей в от-

крытом состоянии (длительность при постоянной частоте), такой, чтобы оно было пропорционально сигналу ошибки, удалось получить линейную характеристику управляющего элемента и тем самым повысить точность поддержания температуры.

Выбором типа термоэлектрического модуля можно добиться того, чтобы термоконтроллер питался от того же напряжения, что и стабилизатор тока. При заданных величинах питающего напряжения и отводимого теплового потока необходимый термоэлектрический модуль должен обеспечивать соответствующий рабочий ток. В настоящее время промышленность предоставляет большой выбор таких элементов, отличающихся размерами, рабочими напряжениями и мощностями [4].

В этих условиях достаточно разумным для минимизации размеров источника было бы использовать единое напряжение для питания всех схем, включая и схему управления. В нашем случае это значение составляет 2,7–3,0 В. Данное соображение фактически означает, что для реализации схемы в этом случае необходимо использовать электронные компоненты, то есть аналоговые микросхемы, источники стабилизированного напряжения, компараторы, ключи, диоды и контроллеры, работающие при пониженных напряжениях.

Действительно, существует большая группа микросхем с достаточно высокими характеристиками, предназначенных прежде всего для питания от батареи и работающих при напряжениях 2,7 – 5,5 В. Такие компоненты и используются в разработанной схеме. Дополнительным их достоинством является то обстоятельство, что все

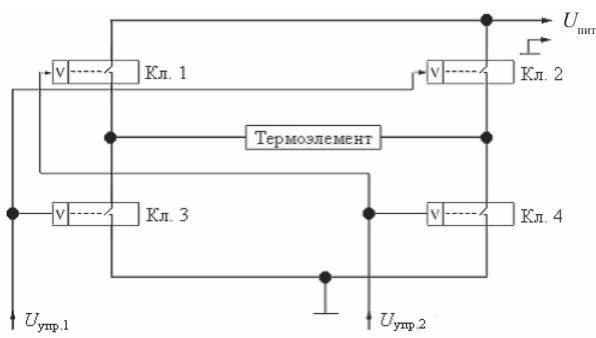


Рис. 3. Схема выходного каскада блока терmostатирования

$U_{упр.1}$, $U_{упр.2}$ – управляющие напряжения;
 $U_{пит}$ – напряжение питания;
Кл. 1 – Кл. 4 – силовые ключи

оны выполнены в виде SMD-компонентов в корпусах SOT23, SOT23/5 и т. п.

Существенное уменьшение размеров источника с одновременным упрощением реализации ряда функций, увеличением надежности работы и упрощением реализации является переход на цифровую систему управления блоком в целом и каждым из стабилизаторов (стабилизатора тока и термоконтроллера) в отдельности.

В нашем случае цифровая схема управления обеспечивает плавный выход на рабочий ток и плавное его снижение при выключении. Такой же режим плавного увеличения и уменьшения предусмотрен и для регулировки глубины модуляции тока внешним сигналом. Цифровые методы используются и при формировании управляющих воздействий.

Перечисленные выше опции реализованы с использованием 8-разрядного микроконтроллера Atmel семейства AVR, а также цифровых потенциометров с интерфейсом I2C. При необходимости можно обеспечить индикацию и установку тока и температуры по цифровым шинам, подсоединяемым к внешним устройствам (ЭВМ, ЖКИ и т. п.). Предусмотрена также возможность ручной регулировки параметров на стадии настройки и регулировки.

Кроме того, обеспечено выключение источника питания при недопустимо большой температу-

ре лазерного модуля и достижении максимально допустимого тока через диод.

Размер реализованных плат стабилизатора тока и термоконтроллера составляет 50×30 мм. Конструктивно платы объединены в единый модуль и установлены одна над другой. При этом плата стабилизатора тока имеет тепловой контакт с основанием – пластиной-радиатором тех же размеров, что и платы. Она, в свою очередь, устанавливается в приборе. Специального радиатора для термоконтроллера не требуется.

Таким образом, разработанный блок питания лазерного диода отвечает поставленной задаче, обладает достаточно малыми размерами и низкими тепловыми потерями. На его примере рассмотрены основные вопросы, возникающие при разработке таких блоков. Следует отметить универсальность разработанного устройства: во-первых, схемные решения применимы для работы с ЛД разных мощностей; во-вторых, нет жестких ограничений и на используемые источники напряжений – вполне приемлем диапазон от 3,3 до 5,0 В. Это позволяет использовать блок питания в составе различной аппаратуры без дополнительных изменений в схемотехнике. В то же время минимальное энергопотребление достигается при напряжениях порядка 2,7–3,0 В.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. High performance laser diodes. Products [Электронный ресурс] / Axcel Photonics Inc. // www.axcelphotonics.com.
2. Products. Laser diode and arrays. Laser diodes specification [Электронный ресурс] / ATC-Semiconductor Devices // www.atcsd.ru.
3. **Краснов, А.В.** Источник питания для микрочип-лазера на Nd:LSB [Текст] / А.В. Краснов, В.А. Парфенов // XXXVII Неделя науки СПбГПУ. Матер. Всерос. межвуз. конф. студ. и асп. Ч. VI. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. – С. 63.
4. Криотерм. Продукция. Термоэлектрические модули [Электронный ресурс] / Kryotherm // www.kryotherm.ru.



Ядерная физика

УДК 539.125.17; 539.126.17

Я.А. Бердников, Д.А. Иванищев, Д.О. Котов, В.Г. Рябов,
Ю.Г. Рябов, В.М. Самсонов

РОЖДЕНИЕ ф-МЕЗОНОВ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР ДЕЙТЕРИЯ И ЗОЛОТА ПРИ ЭНЕРГИИ 200 ГэВ

Процесс рождения частиц в протон-ядерных ($p + A$)-взаимодействиях в области промежуточных поперечных импульсов ($2,0 \text{ ГэВ}/c < p_t < 5,0 \text{ ГэВ}/c$), как стало известно начиная с 70-х годов прошлого века, протекает более интенсивно, чем предсказывалось моделями, описывающими ($p + A$)-взаимодействие как суперпозицию нуклон-нуклонных столкновений [1–3]. Данное явление, получившее название эффекта Кронина [1], указывает на то, что ядерная материя непосредственным образом влияет как на процесс рождения, так и на дальнейшее распространение в среде родившихся частиц.

Согласно работе [1] зависимость сечения I рождения частиц типа i в ($p+A$)-взаимодействиях от атомного номера ядра A может быть представлена в виде

$$I_i(p_t, A) = I_i(p_t, 1) \cdot A^{\alpha_i(p_t)},$$

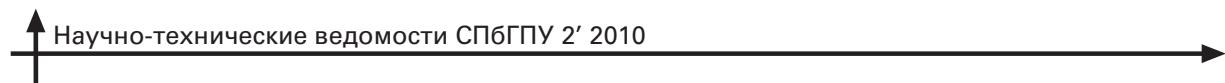
где p_t – поперечный импульс частицы, α_i – параметр, который вычисляется на основе результатов измерений.

По величине параметра α_i можно судить об отклонениях выходов частиц в ($p+A$)-взаимодействиях (величине эффекта Кронина) от предсказаний модели простой суперпозиции нуклон-нуклонных взаимодействий. В области поперечных импульсов $p_t > 1,0 - 1,5 \text{ ГэВ}/c$ значение параметра α_i для адронов превышает единицу.

Экспериментальные измерения показали, что величина эффекта Кронина зависит от значений поперечного импульса и типа рождающихся частиц, а также центральности столкновений ядер [4–6]. В области поперечных импульсов $p_t > 2-3 \text{ ГэВ}/c$ значение параметра α_i , измерен-

ное для барионов, существенно превышает такое для мезонов. Так, при энергии взаимодействия ядер 27,4 ГэВ (здесь и далее под величиной энергии следует понимать энергию нуклон-нуклонного взаимодействия в системе центра масс сталкивающихся ядер) значение α_i для барионов и мезонов достигает максимума вблизи $p_t \approx 4,5 \text{ ГэВ}/c$: для K^+ - и π^+ -мезонов соответствующие значения α_{K^+} и α_{π^+} приблизительно одинаковы и равны $1,109 \pm 0,007$, в то время как для протонов разность $\alpha_p - \alpha_{K^+} (\alpha_{\pi^+})$ составляет $0,231 \pm 0,013$ [2]. На настоящий момент природа эффекта Кронина и его зависимость от типа рождающихся частиц еще не совсем ясна и требует дальнейших экспериментальных и теоретических исследований.

Проникновение в суть эффекта Кронина также важно при изучении взаимодействий тяжелых релятивистских ядер [7]. В 2003 году на коллайдере RHIC (Брукхейвенская национальная лаборатория, США) [8] был впервые обнаружен эффект подавления выхода адронов в области больших поперечных импульсов ($p_t > 5,0 \text{ ГэВ}/c$) в центральных столкновениях тяжелых ядер при энергии 200 ГэВ [9]. Подавление наблюдалось по отношению к выходу адронов в протон-протонных взаимодействиях, отмасштабированному на соответствующее число парных нуклон-нуклонных столкновений $\langle N_{\text{столкн}} \rangle$ [10]. На момент обнаружения эффекта отсутствовало удовлетворительное объяснение причин его возникновения. Было абсолютно необходимо разделить эффекты холодной ядерной материи (эффект Кронина, модификация функций распределения партонов в ядре [11, 12] и др.) и эффекты, связанные с формированием плотной и горячей ядерной среды (эффект гашения



струй, перерассеяние адронов [7]). Эффекты начального состояния удобно изучать в контролльном эксперименте, когда не образуется горячей и плотной ядерной среды. Столкновения ядер дейтерия и золота ($d + Au$) при энергии 200 ГэВ являются именно таким случаем. При отсутствии плотной цветовой среды эффекты начального состояния становятся доступными для изучения в чистом виде.

С теоретической точки зрения эффект Кронина обычно описывается многократным мягким перерассеянием партонов в начальном состоянии [1, 2]. При подобном подходе возникают трудности при описании зависимости величины эффекта от типа рождающихся частиц. В работе [13] представлено альтернативное объяснение эффекта Кронина, основанное на рассмотрении взаимодействий партонов в конечном состоянии. В описанном случае эффект возникает в результате рекомбинации тепловых и ливневых партонов.

Данная статья посвящена измерению инвариантных спектров рождения по поперечному импульсу и факторов ядерной модификации R_{dA} для ϕ -мезонов в ($d + Au$)-столкновениях при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ. Измерения были проведены в адронном канале распада $\phi \rightarrow K^+K^-$ в области малых быстрых ($|y| < 0,35$) с помощью центральных спектрометров эксперимента ФЕНИКС [14] на релятивистском коллайдере тяжелых ионов RHIC. Быстрая вычисляется как $y = \frac{1}{2} \ln(E + p_z)/(E - p_z)$, где E – полная энергия частицы, p_z – проекция импульса на ось столкновения.

Указанные результаты вместе с данными измерений выходов других адронов в ($d + Au$)-взаимодействиях позволяют проанализировать зависимости эффекта Кронина от значений поперечного импульса и типа частиц, а также от центральности столкновений. Измерения инвариантных выходов ϕ -мезона в ($d + Au$)-взаимодействиях, имеющего массу, близкую к массе протона, но состоящего из двух夸克ов, могут быть использованы для определения основного механизма, ответственного за различие в поведении барионов и мезонов.

Методика измерений

Для изучения эффектов холодной ядерной материи в 2003 и 2008 годах на коллайдере RHIC были проведены два цикла работ, посвященных столкновениям ядер дейтерия и золота при энер-

гии 200 ГэВ. Объем данных, полученных за последний сеанс, существенно возрос по сравнению с первым, что позволило снизить величину статистических неопределенностей и расширить диапазон измерений в область больших поперечных импульсов.

Состав и основные характеристики установки ФЕНИКС описаны в работе [14]. Треки заряженных частиц восстанавливались с помощью дрейфовых и падовых камер. Характерное импульсное разрешение детектора составляло

$$\delta p/p = 0,7\% + 1,1\% \cdot p/p_0,$$

где $p_0 = 1,0$ ГэВ/с.

Поскольку в ядро-ядерных ($p + A$)-, ($d + A$)-, ($A + A$)-взаимодействиях невозможно разделить каоны от распадов ϕ -мезонов и каоны, родившиеся в других процессах, выход ϕ -мезонов изменяется на статистической основе. Для каждого ($d + Au$)-столкновения разнозаряженные треки, которые прошли критерий отбора [6], комбинируются в пары и формируют распределение по инвариантной массе. Данное распределение содержит как сам сигнал, так и комбинаторный фон [15–17]. Выход ϕ -мезонов вычисляется путем интегрирования распределения по инвариантной массе в окне плюс(минус) 9 МэВ/с² вблизи пика ϕ -мезона после вычитания комбинаторного фона. Величина и форма некоррелированного комбинаторного фона оцениваются при помощи метода смешивания событий, детали которого описаны в работах [15–17]. Поскольку метод смешивания событий не позволяет описать коррелированную часть комбинаторного фона, в распределении по инвариантной массе присутствует остаточный фон. Последний описывается полиномом, а форма пика ϕ -мезона – сверткой функций Гаусса и Брейта–Вигнера. Функция Гаусса используется для описания массового разрешения экспериментальной установки, а Брейта–Вигнера – для описания естественной ширины резонанса [18].

Инвариантный выход ϕ -мезонов в каждом промежутке по поперечному импульсу для заданной центральности столкновений определяется как

$$\frac{1}{2\pi p_t} \frac{d^2 N_\phi}{dp_t dy} = \frac{N_\phi \epsilon_{\text{триг}}}{2\pi p_t N_{\text{соб}} \epsilon_{\text{акс}} B_{KK} \Delta p_t \Delta y},$$

где B_{KK} – вероятность распада ϕ -мезона в канале K^+K^- [21], N_ϕ – измеренный выход ϕ -мезонов,



$\varepsilon_{\text{акс}}$ – эффективность восстановления ϕ -мезонов в экспериментальной установке ФЕНИКС, $N_{\text{соб}}$ – число обработанных событий, $\varepsilon_{\text{триг}}$ – эффективность триггера, которая находится в пределах 0,92–0,85 для центральных и периферийных ($d + \text{Au}$)-столкновений соответственно [6].

Эффективность $\varepsilon_{\text{акс}}$ восстановления ϕ -мезонов оценивается путем полного моделирования методом Монте-Карло экспериментальной установки ФЕНИКС с помощью программы GEANT 3.21 (GEometry ANd Tracking) [19].

Систематические неопределенности измерений подразделяются на три типа – A , B и C . Ошибки типа A не зависят от поперечного импульса частицы, типа B от него зависят, но вид зависимости неизвестен; ошибки типа C от него не зависят и, в основном, определяются неопределенностью вычисления эффективности триггера $\varepsilon_{\text{триг}}$. Основной вклад в неопределенности типа A вносит ошибка в определении выхода ϕ -мезонов посредством аппроксимации спектра по инвариантной массе полиномом и сверткой функций Гаусса и Брейта–Вигнера, а основной вклад в неопределенности типа B вносит ошибка в определении аксептанса установки ФЕНИКС.

Результаты измерений

На рис. 1 представлены инвариантные инклюзивные спектры рождения ϕ -мезонов по поперечному импульсу, измеренные в ($d + \text{Au}$)-столкновениях при энергии 200 ГэВ для различных классов событий по центральности в диапазоне по поперечному импульсу $1,1 \text{ ГэВ}/c < p_t < 7,0 \text{ ГэВ}/c$. Диапазон измерений в области малых значений поперечных импульсов ограничен быстро уменьшающимся аксептансом установки. Верхняя граница измерений ограничивается объемом доступных данных.

Для изучения коллективных ядерных эффектов в ($A + A$)-взаимодействиях часто используются факторы ядерной модификации R_{AA} [7], которые вычисляются как отношение инвариантных выходов адронов в ($A + A$)-взаимодействиях к инвариантным выходам тех же адронов в ($p + p$)-взаимодействиях. Перед делением инвариантные выходы частиц нормируются на число парных нуклон-нуклонных столкновений $\langle N_{\text{столкн}} \rangle$:

$$R_{AA}(p_T) = dN_{AA} / (\langle N_{\text{столкн}} \rangle dN_{pp}),$$

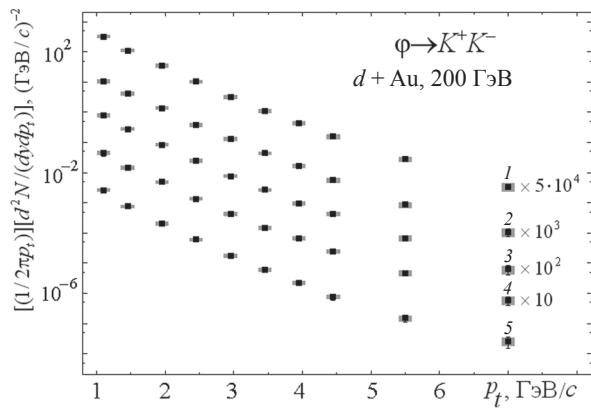


Рис. 1. Инвариантные спектры рождения ϕ -мезонов по поперечному импульсу в ($d + \text{Au}$)-столкновениях (черные символы) при энергии 200 ГэВ для различных классов событий по центральности:

0–88 % (1), 0–20 % (2), 20–40 % (3), 40–60 % (4), 60–88 % (5)

Условные обозначения на точках в виде вертикальных «кусов» и серых горизонтальных прямоугольников соответствуют статистическим и систематическим ошибкам измерений соответственно

где dN_{AA} , dN_{pp} – выходы частиц в ($A + A$)- и ($p + p$)-столкновениях в заданном интервале по поперечному импульсу p_t .

Обозначение R_{AA} далее заменено на R_{dA} , поскольку в настоящей статье одним из взаимодействующих ядер является дейтерий.

При вычислении факторов ядерной модификации R_{dA}^ϕ для ϕ -мезонов использовались результаты данной статьи для ($d + \text{Au}$)-взаимодействий и результаты статьи [20] для ($p + p$)-взаимодействий. На рис. 2 представлены факторы ядерной модификации R_{dA}^ϕ , измеренные для ϕ -мезонов в центральных и периферийных ($d + \text{Au}$)-взаимодействиях при энергии 200 ГэВ.

В центральных столкновениях ядер дейтерия и золота для ϕ -мезонов наблюдается избыточный выход частиц (эффект Кронина) в области промежуточных поперечных импульсов. В периферийных столкновениях значения факторов ядерной модификации R_{AA} согласуются с единицей во всей области измерений.

На рис. 3 представлено сравнение факторов ядерной модификации R_{dA} , измеренных для ϕ -, π^0 -мезонов [21] и протонов [6] в центральных и периферийных столкновениях ядер дейтерия и золота при энергии 200 ГэВ.

В центральных столкновениях ядер дейтерия и золота в области промежуточных поперечных

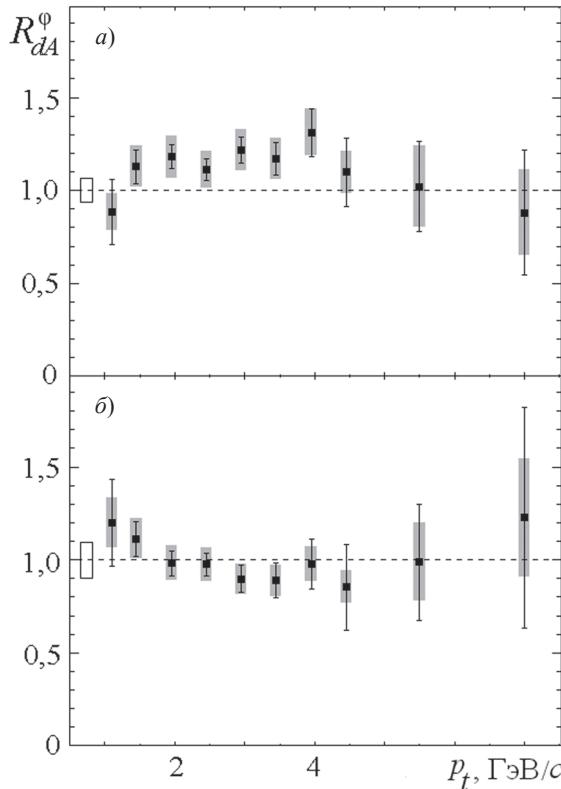


Рис. 2. Зависимости факторов ядерной модификации R_{dA}^{ϕ} (черные символы) от поперечного импульса ϕ -мезонов, полученные в центральных (а) и периферийных (б) столкновениях $d + \text{Au}$ при энергии взаимодействия 200 ГэВ

Условные обозначения на точках в виде вертикальных «усов» и серых прямоугольников соответствуют статистическим и систематическим ошибкам измерений соответственно. Вертикальный прямоугольник вблизи оси ординат соответствует величине неопределенности $\langle N_{\text{столкн}} \rangle$

импульсов наблюдается избыточный выход адронов (эффект Кронина), который более выражен для барионов, чем для мезонов. Избыток выхода частиц уменьшается при переходе от центральных столкновений к периферийным. В периферийных столкновениях измеренные факторы ядерной модификации близки к единице для всех частиц.

Факторы ядерной модификации, измеренные для протонов и ϕ -мезонов, массы которых практически одинаковы, в центральных столкновениях ядер дейтерия и золота существенно различаются. Данное наблюдение трудно описать, если предположить, что эффект Кронина возникает в результате многократного мягкого перерассеяния partонов в начальном состоянии [1, 2]. В подобных моделях основное внимание уделяется попыткам различного описания прироста поперечного им-

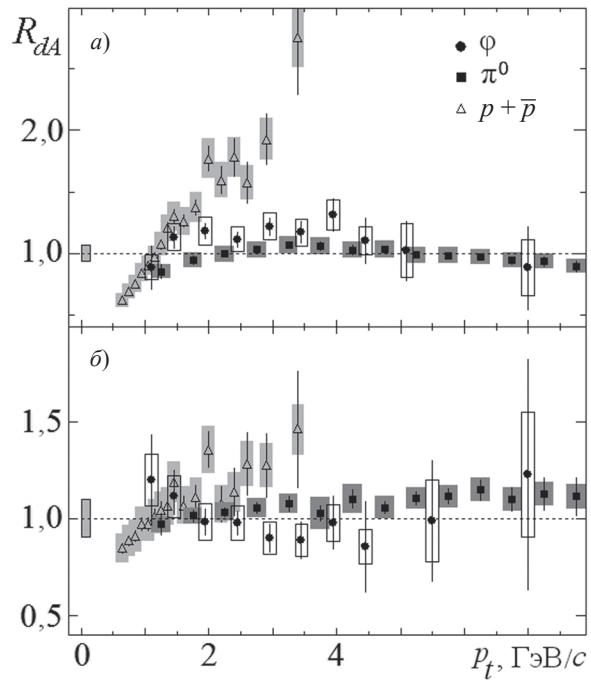


Рис. 3. Зависимости факторов ядерной модификации R_{dA} от поперечного импульса адронов, измеренные для ϕ -, π^0 -мезонов и протонов в центральных (а) и периферийных (б) взаимодействиях $d + \text{Au}$ при энергии 200 ГэВ

Условные обозначения на точках в виде вертикальных «усов» и серых прямоугольников соответствуют статистическим и систематическим ошибкам измерений соответственно. Вертикальные прямоугольники вблизи оси ординат соответствуют величине неопределенности $\langle N_{\text{столкн}} \rangle$

пульса partона за счет мягких перерассеяний. Адронизация жестко рассеянных partонов является единственным процессом, происходящим в конечном состоянии.

Авторы работы [13] предлагают отказаться от подобного подхода и представляют альтернативное объяснение процесса адронизации через рекомбинацию тепловых и ливневых partонов в конечном состоянии. В таком случае барионы, состоящие из трех валентных夸克ов, получают большую прибавку к поперечному импульсу, чем мезоны, состоящие только из двух partонов.

Итак, в центральных столкновениях ядер дейтерия и золота эффект Кронина наблюдается для всех измеренных адронов. В периферийных столкновениях факторы ядерной модификации соглашаются с единицей. Полученные результаты указывают на зависимость эффекта Кронина от типа рождающихся частиц. Объяснение эффекта как



возникающего в результате многократного мягко-го перерассеяния партонов в начальном состоянии [1, 2], по-видимому, следует считать недостаточно полным и требует введения дополнительных механизмов, одним из которых может быть рекомбинация партонов в конечном состоянии [13].

Работа поддержана федеральной целевой программой «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы, II очередь (от 24.12.2009), лот № 5, шифр 2010-1.1-125-015.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Cronin, J.W.** Production of hadrons at large transverse momentum at 200, 300, and 400 GeV [Text] / J.W. Cronin, H.J. Frisch, M.J. Shochet [et al.] // Phys. Rev. D. – 1975. – Vol. 11. – P. 3105–3123.
2. **Antreasyan, D.** Production of hadrons at large transverse momentum in 200-, 300-, and 400-GeV p - p and p -nucleus collisions [Text] / D. Antreasyan, J.W. Cronin, H.J. Frisch [et al.] // Phys. Rev. D. – 1979. – Vol. 19. – P. 764–778.
3. **Straub, P.B.** Nuclear dependence of high- x , hadron and high- τ hadron-pair production in p - A interactions at $\sqrt{s_{NN}} = 38.8$ GeV [Text] / P.B. Straub, D.E. Jaffe, H.D. Glass [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 1992. – Vol. 68. – P. 452–455.
4. **Jones, P.G.** Hadron yields and hadron spectra from NA49 experiment [Text] / P.G. Jones, S.V. Afanasiev, D. Barna [et al.] // Nucl. Phys. A. – 1996. – Vol. 610. – P. 188–199.
5. **Poitzmann, T.** Photon and neutral meson production in 158 AGeV Pb+Pb collisions [Text] / T. Poitzmann, M. Aggarwal, K.B. Bhalla [et al.] // Nucl. Phys. A. – 1996. – Vol. 610. – P. 200–212.
6. **Adler, S.S.** Nuclear effects on hadron production in d +Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV revealed by comparison with p + p data [Text] / S.S. Adler, Y. Berdnikov, V. Riabov, Y. Riabov [et al.] // Phys. Rev. C. – 2006. – Vol. 74. – P. 024904–024917.
7. **Котов, Д.О.** Рождение ф-мезонов в столкновениях ядер меди при энергии 200 ГэВ [Текст] / Д.О. Котов, Я.А. Бердников, В.Г. Рябов [и др.] // Научно-технические ведомости СПБГПУ. – 2009. – № 4(88). – С. 57–62.
8. **Baym, G.** RHIC: From dreams to beams in two decades [Text] / G. Baym // Nucl. Phys. A. – 2002. – Vol. 698. – P. 23–32.
9. **Adler, S.S.** Suppressed π^0 production at large transverse momentum in central Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV [Text] / S.S. Adler, Y. Berdnikov,
- V. Riabov, Y. Riabov [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2003. – Vol. 91. – P. 072301–072307.
10. **Glauber, R.J.** High-energy scattering of protons by nuclei [Text] / R.J. Glauber, G. Matthiae // Nucl. Phys. B. – 1970. – Vol. 21. – P. 135–157.
11. **Piller, G.** Nuclear deep-inelastic lepton scattering and coherence phenomena [Text] / G. Piller, W. Weise // Phys. Repts. – 2000. – Vol. 330. – P. 1–94.
12. **Mueller, A.H.** Gluon recombination and shadowing at small values of x [Text] / A.H. Mueller, J. Qiu // Nucl. Phys. B. – 1986. – Vol. 268. – P. 427–452.
13. **Hwa, R.C.** Final state interaction as the origin of the Cronin effect [Text] / R.C. Hwa, C.B. Yang // Phys. Rev. Lett. – 2004. – Vol. 93. – P. 082302–082306.
14. **Adcox, K.** PHENIX detector overview [Text] / K. Adcox, Y. Berdnikov, V. Riabov, Y. Riabov [et al.] // Nucl. Instr. Meth. A. – 2003. – Vol. 499. – P. 469–479.
15. **Kopylov, G.I.** Like particle correlations as a tool to study the multiple production mechanism [Text] / G.I. Kopylov // Phys. Lett. B. – 1974. – Vol. 50. – P. 472–474.
16. **Drijard, D.** Study of event mixing and its application to the extraction of resonance signals [Text] / D. Drijard, H.G. Fischer, T. Nakada // Nucl. Instr. Meth. – 1984. – Vol. 225. – P. 367–386.
17. **L'Hote, D.** About resonance signal extraction from multiparticle data: combinatorics and event mixing methods [Text] / D. L'Hote // Nucl. Instr. Meth. – 1994. – Vol. 337. – P. 544–556.
18. **Amsler, C.** Particle data group [Text] / C. Amsler, M. Doser, M. Antonelli [et al.] // Physics Letters B. – 2008. – Vol. 667. – P. 1–1309.
19. **Brun, R.** GEANT: simulation program for particle physics experiments [Text] / R. Brun, R. Hagelberg, M. Hansroul [et al.] // Preprint CERN. – 1978. – Vol. CERN-DD-78-2-REV. – P. 1–76.

20. Котов, Д.О. Рождение ф-мезонов в ядерных взаимодействиях при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ [Текст] / Д.О. Котов, Я.А. Бердников, В.Г. Рябов [и др.] // Научно-технические ведомости СПбГПУ. – 2008. – № 6(67). – С. 74–79.

21. Adler, S.S. Centrality dependence of π^0 and η production at large transverse momentum in $d+Au$ in $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV collisions [Text] / S.S. Adler, Y. Berdnikov, V. Riabov, Y. Riabov [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2007. – Vol. 98. – P. 172302–172309.



Дискуссионные вопросы и гипотезы

УДК 577.23

Л.Н. Галль, Н.Р. Галль

КОЛЛЕКТИВНЫЕ ПРОЦЕССЫ В БИОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ

Понятие биоэнергетики в современной классической биофизике, как правило, относят к процессам, происходящим в наименьшем из известных живых организмах – в живой клетке. При этом под биоэнергетикой понимают процессы энергообеспечения организма за счет внешних энергетических ресурсов, в том числе и на молекулярном уровне. Адресация к клетке при таком подходе вполне оправдана, ибо клетка – это полноценный сложный организм, поддержание жизни которого достигается множеством сменяющих друг друга межмолекулярных биохимических взаимодействий. В этих процессах системы биомолекул, обеспечивающие жизненные функции клетки, взаимодействуя между собой, а также с малыми молекулами и ионами в межмолекулярной водной среде клетки, меняют свой состав, форму и положение в пространстве. Изучение межмолекулярных биохимических процессов лежит в основе современной теории функционирования клетки, а внутриклеточная водная среда, в которой происходит взаимодействие молекул, рассматривается для них только как жидкий растворитель.

Основу биохимической теории клетки составляет утверждение, что все функции клетки в ее общении с межклеточной средой полностью обеспечиваются свойствами клеточной мембранны, ее каналами и насосами, а молекулярные процессы, происходящие внутри клетки, запускаются и прекращаются специальными «сигнальными» белковыми молекулами, перемещающимися в жидкой водной среде от одного биополимера к другому и взаимодействующими с ними. Тем самым биофизические представления о живой клетке, по сути дела, подменяются биохимическими с типичными для биохимии взглядами на взаимоотношения молекул и растворителя.

Не менее ста лет в биофизике высказываются и другие представления о роли внутриклеточной воды в межмолекулярных процессах и биоэнергетике живой клетки. В современных работах Г. Линга [1], Дж. Поллака [2], а ранее – в работах Д.Н. Насонова [3], А.С. Трошина [4], А. Сент-Дьерди [5] и многих других ученых излагаются экспериментально обоснованные представления об упорядоченности внутриклеточной водной среды. Эта межмолекулярная водная среда (протоплазма) клетки, по их мнению, принимает непосредственное активное участие не только во всех внутриклеточных, но и в межклеточных процессах, и «свести концы с концами» в вопросах энергетики клетки можно только при учете ее роли. Более того, Г. Линг в книге [1] утверждает, что ошибочная трактовка функций клеточных органелл и протоплазмы клетки ведет биологию к неминуемому краху. Но «официальная» биология как бы вовсе не замечает этой точки зрения: она ее попросту игнорирует и в полемику по этому вопросу не вступает. Одновременно во всех учебниках по биологии и биофизике представлена только «биохимическая» теория клетки, и именно этим представлениям о функционировании живой клетки учат всех современных студентов-биологов и медиков во всем мире.

Почему же так происходит? Почему экспериментально подтвержденные представления о роли воды во внутриклеточных процессах не используются современной биофизикой? Чтобы ответить на эти вопросы, следует рассмотреть, на какой фундаментальной основе покоятся взгляды обоих направлений в биофизике.

Легко видеть, что современная биология, названная выше «официальной», полностью основана на представлениях о линейности процессов

Можно ли физическое понятие о коллективных процессах применять к биологической системе?

в живой природе. Линейные представления, более трехсот лет главенствовавшие в естественных науках, глубоко проникли в корни экспериментальной биологии и определяют трактовки всех биологических экспериментов. Более того, линейность лежит не только в основе интерпретации, но и в самой постановке экспериментов, которые всегда задумываются и ставятся как измерение отклика биологической системы на контролируемый экспериментатором химический или физический действующий фактор. Но именно такие эксперименты, относящиеся к исследованию межмолекулярных взаимодействий свободных молекул в неупорядоченной жидкой водной среде (эксперименты «в пробирке»), составляют научную базу «биохимической» теории клетки. Их результаты просты для объяснений, легки для математических расчетов и не требуют глубоких познаний в области физики. Физической теории при этом отводится «удобная» второстепенная роль: «объяснять» полученные результаты, а не первостепенная – предсказывать их. И сами эксперименты такого рода, и их трактовки полностью укладываются в линейные представления, в связи с чем научная база «биохимической» теории производит впечатление надежной и обоснованной.

Совсем другая ситуация с теоретической базой у направления, неотъемлемой частью которого являются представления о структурированности внутриклеточной водной среды. Привлекая воду в качестве полноправного участника внутриклеточных процессов, представители этого направления неминуемо попадают в область нелинейных процессов, к которым относится взаимодействие воды и биополимеров. А в этом случае попытка обойтись без современной нелинейной физики становится именно тем основополагающим фактором, который не позволяет построить теорию, не содержащую внутренних противоречий.

Из вышесказанного следует, что первостепенным вопросом, который необходимо решить для создания непротиворечивой и энергетически обоснованной теории функционирования живой клетки, является вопрос о роли внутриклеточной воды, и, в частности о том, как именно эта вода структурируется. Но поскольку этот вопрос относится к области нелинейной физики, для ответа на него необходимо обратиться к одному из важнейших ее понятий – понятию о коллективных процессах.

Как известно, коллективные процессы – это процессы возбуждения физической системы, в которые вовлечено одновременно большое число составляющих ее частиц, атомов и молекул, двигающихся согласованно. При теоретическом рассмотрении того, как участники коллективного процесса влияют друг на друга, всегда обнаруживаются совершенно новые свойства системы в целом. Весьма наглядно представление о коллективных процессах может использоваться, например, в физике плазмы или в физике твердого тела.

Действительно, при рассмотрении свойств твердых тел уже давно было показано, что кристалл нельзя описать только как сумму свойств составляющих его атомов. Квантовомеханическое рассмотрение возбуждения кристаллической решетки как нелинейной колебательной системы образующих ее атомов и электронов показывает, что эти колебания являются коллективным процессом. «Коллективность» возбуждения кристаллической решетки проявляется в решении соответствующих нелинейных уравнений, описывающих систему в целом, в связи с чем для описания этих коллективных свойств привлекаются представления о «квазичастицах»: фононах, экситонах, плазмонах, дырках и т. п. Без этих частиц как реально существующих не удается интерпретировать экспериментальные данные, и значимые процессы в металлах, полупроводниках и диэлектриках описываются теоретически корректно только тогда, когда мы учитываем присутствие в них квазичастиц. То же самое мы видим и в физике плазмы, где коллективные процессы отражают саму природу плазмы, ее главное свойство: появление нового типа взаимодействия заряженных частиц посредством дальнодействующих сил, т. е. через электрические и магнитные поля, создаваемые этим же коллективом частиц.

На наш взгляд, в биосистемах с присущим им взаимодействием большого числа индивидуальных степеней свободы, несомненно, должны присутствовать значимые коллективные эффекты, описание которых может быть построено на тех же принципах, что и системах неживых. Физика неживого мира уже давно не существует без учета коллективных процессов, в то время как живые системы с этих позиций до сих пор не рассматривались.



Это означает только то, что плодотворные представления нелинейной физики, по существу, еще не восприняты «науками о жизни» и продолжают ими игнорироваться. Действительно, если бы сейчас кому-либо вдруг захотелось начать разрабатывать «новую» теорию твердого тела и при этом не рассматривать его как единое целое, а разбить на элементарные составляющие, т. е. исходные атомы, то важнейшие свойства твердых тел выпали бы из такой теории: ведь из одних и тех же атомов можно создать и металл, и полупроводник, и диэлектрик. Такая теория была бы абсолютно неплодотворна, ее результаты перестали бы описывать экспериментальные данные, и она сразу была бы отвергнута! А вот в биофизике живую клетку изначально рассматривают лишь как совокупность множества элементарных независимых составляющих – молекул, между которыми происходят индивидуальные биохимические взаимодействия, и не удивительно, что при этом не возникает даже и вопроса о наличии в этой системе каких-либо свойств, присущих коллективным процессам. Следствием такого подхода является фактическое исключение из физиологии клетки вопроса о причинной связи между последовательностью внутриклеточных процессов и об их синхронизации. Безусловно, существует и объективная причина этой ситуации: все коллективные процессы, рассматриваемые до сих пор в физике, относятся к объектам неизмеримо более простым, чем живые клетки, а они многократно сложнее любой физической системы и по структуре, и по принципам внутриклеточных взаимодействий. Сложности добавляет и то обстоятельство, что в многоклеточном живом организме строение и функции различных клеток сильно отличаются друг от друга, а тем более – от организмов одноклеточных.

Следовательно, чтобы такая биологическая система, как живая клетка, стала доступной для нелинейной физики, т. е. для рассмотрения коллективных процессов, присущих ей как некоей сложной физической системе, клетка должна быть представлена в виде абстрактной физической модели, доступной для последующего изучения. Кроме того, чтобы результаты такого рассмотрения имели «биологический» смысл, физическая модель клетки должна быть адекватна живой клетке по характеру и последовательности происходящих в ней биохимических процессов.

Физическая модель живой клетки

Построение физической модели живой клетки – наиболее сложный вопрос, не решенный до настоящего времени в теоретической биологии. Любая клетка, как уже указывалось, есть многофункциональная специфичная живая система; клетки с различными физиологическими функциями составляют весьма значительное множество, и создание адекватной физической модели какой-либо конкретной клетки – не предмет данной работы. В ней будет рассмотрен лишь круг вопросов, относящихся к коллективным процессам. Более того, для решения поставленной задачи необходимо абстрагироваться не только от конкретной клетки вообще, но и от любых реальных межмолекулярных процессов в ней, и подойти к проблеме с точки зрения принятых в нелинейной физике представлений о «мягкой» физической модели. Такое абстрагирование сразу же приведет нас к требуемому решению путем утверждения, что клетку следует рассматривать как совокупность элементарных нелинейных молекулярных (субстанциональных) систем, находящихся между собой также в нелинейных отношениях, которые можно было бы именовать нелинейными отношениями второго порядка. В результате задача создания адекватной физической модели процессов живой клетки разделяется на две последовательные задачи: о процессах в нелинейной молекулярной системе и о процессах между нелинейными молекулярными системами.

В качестве «мягкой» модели нелинейной молекулярной системы первого уровня, как биологически значимой, так и полностью неспецифичной, т. е. не имеющей никаких организменных функций, в статье [6] нами было предложено принять субстанциональную (материальную) систему, названную «молекулярной ячейкой». Молекулярная ячейка – это реальное образование из биополимеров, не находящихся в химическом контакте, но в данный промежуток времени расположенных наиболее близко друг к другу, и молекул воды, их разделяющих (рис. 1).

Важным свойством молекулярной ячейки является то, что составляющие ее биополимеры могут в этот же промежуток времени вступать в любые химические взаимодействия с другими молекулами, т. е. абстрагирование к молекулярной ячейке не отменяет и не заменяет молекулярную динамику при исследовании межмолекулярных

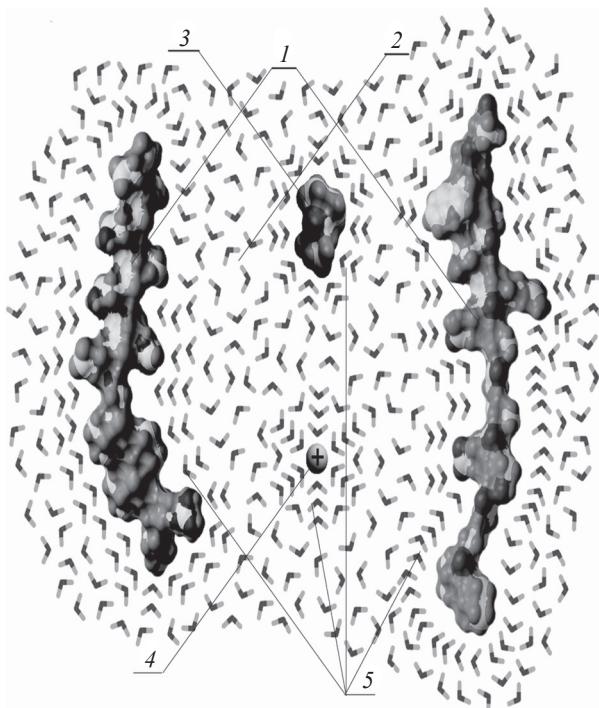


Рис. 1. Схематическое изображение молекулярной ячейки (некивая система):

1 – молекулярный каркас ячейки; 2 – межмолекулярная водная среда; 3, 4 – молекула и ион примеси; 5 – адсорбированные слои воды вблизи молекул и ионов

биохимических реакций в клетке. В то же время это абстрагирование позволяет перейти к изучению коллективных процессов в молекулярной ячейке, которые есть следствие нелинейных возбуждений в молекулярных цепях при движении по ним внешней энергии, и соответствующих нелинейных откликов водной среды, прилегающей к биополимерам. Как будет показано далее, указанные коллективные процессы характерны именно для живых систем и происходят одновременно с участием биополимеров в межмолекулярных биохимических реакциях и независимо от них. Движение энергии вызывает появление самосогласованных конформаций субстанциональной системы посредством дальнодействующих сил, т. е. через энергетические поля, создаваемые в результате этого движения. Термин «энергетические» поля означает, что в живой системе происходит постоянная трансформация энергии: механической в электромагнитную, тепловую, световую и наоборот. Благодаря появлению указанных конформаций, как будет показано далее, биополимеры и вода образуют единую систему, удерживающую энергиетическим полем в состоя-

нии относительного устойчивого неравновесия, и это состояние сохраняется так долго, как долго система потребляет внешнюю энергию. Но даже в таком, абстрагированном от реальной клетки и уменьшенном до молекулярной системы, виде эта сугубо нелинейная задача остается формализованной только в виде «мягкой модели», недоступной для аналитического исследования существующими математическими методами.

Главным приемом синергетического подхода к таким задачам является конструирование специальных «жестких моделей» [7], сохраняющих все принципиально важные особенности «мягкой модели», но упрощенные, как правило, за счет граничных условий до состояния, допускающего аналитические решения. Невероятной удачей для конструирования жесткой модели молекулярной ячейки можно считать появление в литературе теоретических работ, посвященных процессам, сопровождающим движение энергии по цепи биополимера. Объединение результатов этих работ можно использовать как решение для соответствующей «жесткой модели». Выводы, следующие из такого подхода, позволяют утверждать, что молекулярная ячейка является не просто удобной математической моделью или математическим приемом. Она описывает новый субстанциональный элемент в биологической иерархии, обладающий характерными признаками и живой, и некивой системы в зависимости от поступления (или непоступления) в него внешней энергии. Далее будет рассмотрено, каким образом передача энергии по цепям биополимеров формирует и согласует молекулярно-водные субстанциональные системы живого организма.

Рассмотрение нелинейных взаимодействий между молекулярными ячейками выступает задачей следующего уровня, в рамках которой возможно построение модели самоуправления межмолекулярными процессами в живой клетке. Идея этой «мягкой» модели основана на представлении, что все живые (и некивые) биологические системы на молекулярном уровне состоят из множества прилегающих друг к другу молекулярных ячеек, причем каждый биополимер является граничным не менее чем в двух молекулярных ячейках. Макромолекулы, образующие молекулярные ячейки в живых клетках, – это всевозможные биополимеры, участвующие в контактных биохимических реакциях в процессе жизнедеятельности клетки как полноценного живого организма. Дально-



действующее взаимодействие через водную среду между биополимерами в одной ячейке или между молекулярными ячейками влияет на последовательность межмолекулярных процессов в клетке, способствует их синхронизации и взаимной согласованности. И хотя очевидно, что, следуя определению, молекулярные ячейки как субстанциональные системы можно ввести не только для живых, но и для любых неживых биологических и химических систем, они будут принципиально отличаться структурой воды у поверхности биополимеров. Тем не менее, введение понятия молекулярной ячейки для биохимических систем в эксперименте позволяет по-новому рассмотреть проблему миграции энергии «дальних» бесконтактных взаимодействий молекул в растворе и объяснить особенности этой миграции для молекул в различных растворителях.

«Жесткая» физическая модель молекулярной ячейки

В основу такой модели, абстрагированной не только от клетки, но и от конкретных биополимеров, положены представления о молекулярно-водной субстанциональной системе, обладающей свойством принимать и преобразовывать внешнюю энергию. Согласно предлагаемой модели (рис. 2) биополимер представляет собой линейный полимер с шагом a , состоящий из цепочки слабо связанных мономеров с массой m , каждый из которых имеет дипольный момент, направленный вдоль цепочки. Водная среда, окружающая биополимер, рассматривается в модели как электретная, составленная молекулами воды, т. е. электрическими диполями с достаточно большими дипольными моментами. Для конкретизации энергетического процесса в качестве источника внешней энергии взята метаболическая реакция аденоинтрифосфорной кислоты (АТФ) с биополимером в его произвольной точке. Для такой жесткой модели с помощью обобщения работ [8] и [9] можно найти квантовомеханическое решение, которое бы описывало как движение энергии по цепи биополимера, так и ее излучение в окружающую биополимер водную среду.

Как было показано А.С. Давыдовым [8], задача движения энергии по молекулярной цепи одномерного полимера, в которой учтены все особенности внутренних взаимодействий в этой цепи, имеет единственное решение, представляющее

собой солитон, выражение для которого имеет вид:

$$\Phi_c(\xi, t) = (\sqrt{aQ/2}) \operatorname{sch}(Q\xi),$$

где $Q = maG/2h^2 = m\alpha\chi^2/2\kappa h^2(1-s^2)$, параметр нелинейности $G = \chi^2/\kappa(1-s^2)$, κ – продольная упругость молекулярной цепи, χ – параметр связи внутримолекулярных возбуждений с продольным смещением массы m , а величина $s = V/V_a$ есть отношение скорости V распространения возбуждения (солитона) к скорости продольного звука V_a .

Профиль волны $\Phi_c(\xi, t)$, описывающей солитон, в процессе распространения волны не меняется:

$$\partial\Phi_c/\partial t = -V\partial\Phi_c/\partial x,$$

т. е. $\Phi_c(\xi, t)$ – стационарная волна. Это возбуждение характеризуют устойчивую ветвь решений уравнения Шредингера ($s^2 < 1$). Колебательные

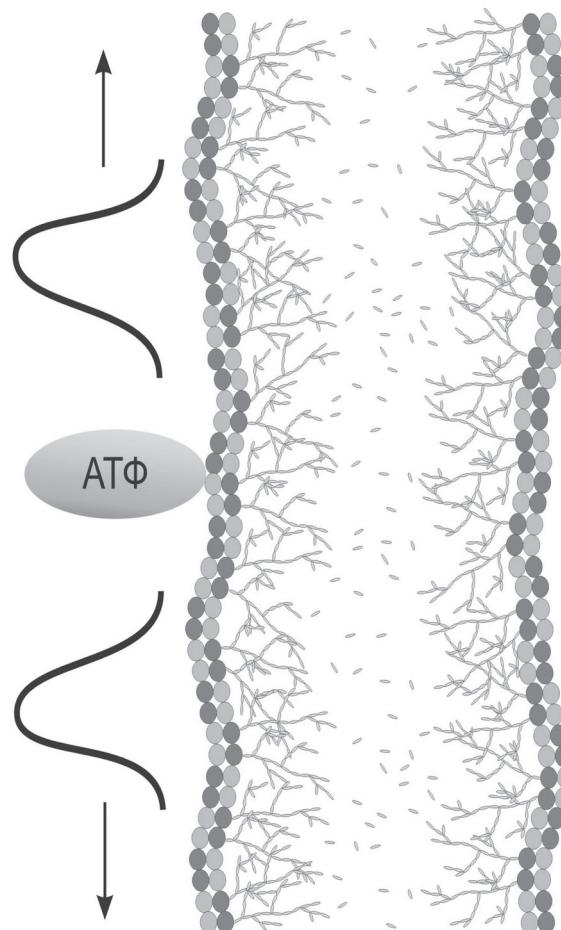


Рис. 2. «Жесткая» модель молекулярной ячейки живой системы. Вблизи биополимеров вода структурирована в виде фрактальных кристаллов

солитоны служат переносчиками дальнодействующей энергии вдоль молекулярных цепочек в $(1+1)$ -мерном случае. С учетом того, что энергия в молекулярную цепь поступает в результате химической метаболической реакции, данное решение показывает, что молекулярная цепь преобразует энергию низкого качества – некогерентную, растянутую во времени, в солитон – когерентную энергию высокого качества, способную приводить к механической работе. Такая интерпретация результата, полученного А.С. Давыдовым для описания движения энергии в молекулярных системах, весьма близка к мнению Э. Шредингера, высказанного им в известной книге «Что такое жизнь с точки зрения современной физики»: «то, чем кормится организм – это отрицательная энтропия». Действительно, повышение качества энергии вполне можно интерпретировать как уменьшение энтропии, и такая возможность свойственна только живым биологическим системам.

В работе [9] было показано, что результат А.С. Давыдова можно получить и по-другому, независимо от конкретных допущений о колебательном (фононном) механизме нелинейности. Все рассмотрение в статье [9] сразу же ведется с позиций квантовой теории поля, и солитоны рассматриваются как Бозе-конденсация экситонов, причем солитон $\Phi_c(\xi, t)$ рассматривается как следствие нелинейного самосвязывания экситонного поля Гейзенберга $\psi(\xi, t)$. Нелинейное происхождение солитонного решения проявляется в его исчезновении, когда параметр нелинейности G обращается в нуль. При этом хорошо видна связь между решениями, полученными в работах [8] и [9]: поле внутримолекулярного возбуждения с внутренним взаимодействием ψ может вызывать конформационные изменения в молекулярной цепочке, которые как раз и описываются фононным полем, и в статье [9] показана возможность получения такого фононного уравнения для деформации молекулярной цепочки, распространяющейся со скоростью солитона V_c . В этом случае теория сама приводит нас к полю деформаций (фононному), локализованному вокруг солитонного центра и распространяющемуся с солитонной скоростью, поскольку фонон и колебательное возбуждение принадлежат к одной динамической самодостаточной категории: продольная звуковая волна вызывается локализованным колебательным возбуждением и одновременно действует как потенциальная яма для него. Важнейшим при этом яв-

ляется вывод, что солитон можно рассматривать как реакцию одномерной цепочки на любое внешнее, даже слабо локализованное, возмущение, связанное с любым некогерентным поступлением энергии, и эта реакция состоит в преобразовании поступившей энергии в когерентную форму посредством локализованной Бозе-конденсации экситонов (или, если кто предпочитает, фононов), которая фактически представляет собой солитон Давыдова.

Переход к использованию симметрии позволяет в рамках единого подхода квантовой теории поля рассмотреть более сложную, чем в монографии [8], ситуацию: линейный полимер, помещенный в поляризующую среду (для данной биологической задачи – в воду). В этом случае $(1+1)$ -мерная вращательная симметрия полимера, задающего предпочтительное направление в основном состоянии, нарушается при взаимодействии солитона с $(3+1)$ -мерным окружающим электретом. Как следует из теоремы Голдстоуна [10], спонтанное нарушение симметрии вызывает появление лишенных массы бозонов (бозонов Голдстоуна), которые играют роль носителей дальнодействующей корреляции между составляющими элементами системы, т. е. между полимером и электретом. Эти бозоны Голдстоуна представляют собой коллективные колебания, которые для поляризируемой среды (электрета) можно описать с помощью когерентных волн Фрёлиха [11].

Для описанной системы в работе [9] было показано, что если разрушение симметрии рассматривается как результат поляризации электрета (воды), то эта динамика сама создает моды Голдстоуна, которые представляют собой связанные состояния поля $\psi(x)$. Эти связанные состояния ψ -полей включают в себя солитонное поле $\Phi_c(x)$ и бозонное поле $P(x)$ с нулевой щелью. Таким образом, теорема Голдстоуна позволяет получить на границе изменения порядка общее решение $P(x) \equiv \Phi_c(x)$ для среды и для полимера, существование которого определяет возможность излучения энергии солитона в среду. Очевидно, что когда решение $P(x)$ имеет одну и ту же частоту в двух конечных соприкасающихся системах, энергетические волны могут распространяться через границу без всяких затрат, поскольку выражение

$$P(\xi) \rightarrow P(x) + f_\eta(x) \cdot \text{const}$$

в обеих системах – полимере и окружающей его воде – представляет собой инвариантное преобра-



зование [9]. Рассмотренная модель может также трактоваться как осцилляция между двумя различными коллективными режимами, один из которых характеризуется локализованной конденсацией (солитон Давыдова), а другой – однородной конденсацией. Оба режима управляются одним и тем же механизмом Бозе-конденсации, хотя и в разных формах из-за разной геометрической конфигурации.

Анализ и интерпретация этого решения позволяют считать его энергетическими элементами общего решения для рассматриваемой жесткой модели молекулярной ячейки. В соответствии с терминологией статьи [9] эти элементы в дальнейшем будем именовать следующим образом: первый – режимом энергетической зарядки, а второй – режимом энергетической разрядки.

Режим зарядки – это преобразование входящей в биополимер химической метаболической энергии (неорганизованной, т. е. не способной совершать работу) в когерентный солитон, движущийся вдоль цепи биополимера. (Напомним, что любое внешнее, даже слабо локализованное возмущение молекулярной цепи, связанное с любым некогерентным поступлением энергии, также преобразуется этой цепью в солитон).

Режим разрядки – это рассеяние энергии в двумерной среде, когда поступающий извне поток энергии проходит через эту среду и вызывает внутри нее упорядочение. При этом предполагается, что окружающая полимер среда (вода) имеет высокий уровень организации, т. е. вода структурирована. Однако никаких более конкретных предположений о характере структурированности воды из работы [9] не следует, а это означает, что третьим элементом решения для жесткой модели молекулярной ячейки должно быть решение задачи о структуре воды, окружающей биополимер.

Особенности структурирования внутриклеточной воды в молекулярной ячейке живой клетки

При построении модели для решения этой задачи необходимо учитывать два существенных обстоятельства. Первое состоит в том, что внутриклеточная вода не представляет собой массива однородной жидкости, так же как поверхность биополимера не является однородно-гидрофильной. Второе обстоятельство вытекает из предыдущего квантовомеханического решения для си-

стемы биополимер–водная среда и состоит в том, что упорядочение водной среды живой системы происходит в условиях, когда в эту среду излучается когерентная энергия солитонов, формируемых биополимером. При этом, как следует из представлений и законов нелинейной кристаллографии [12, 13], вода образует фрактальные кристаллы, закрепленные водородными связями на гидрофильных участках биополимера.

Как показано в статье [12], при кристаллизации воды в обозначенных выше условиях вместо принципа «минимума свободной энергии», определяющего ход классической кристаллизации из объема, реализуется принцип полной связанности структур, соответствующий более общему условию их стабилизации, по сравнению с критерием энергетическим. Реализация полной связанности при самоорганизации (кристаллизации) структур связанный воды, между молекулами которой имеются только слабые водородные связи, возможна лишь в том случае, если оси образующегося кристаллического модуля являются криволинейными. Однако вызываемое этим увеличение длины связей возможно только при затрате внешней энергии E , обеспечивающей поддержание возникших упругих напряжений ($\Delta E > 0$). В биологических системах, с биополимерами которых вода образует очень слабые водородные связи, динамика роста структур связанный воды на гидрофильных «выступах» структуры биополимера состоит в последовательном присоединении димеров воды. Основным элементом структуры воды является спираль 30/11, и фрактальные стабильные конструкции в живых биологических системах образуются различным сочетанием этих спиралей в условиях постоянной подпитки этого процесса энергией «разрядки» солитонов. За счет энергии разрядки и в результате последовательного присоединения димеров воды происходит ветвление самоорганизующихся структур связанный воды, причем формы кристаллических фракталов, которые создаются из последовательных димеров воды, – нелинейны (спирали из стержней, скрученные ленты и т. п.), и эти фракталы находятся в состоянии «относительного устойчивого неравновесия» [13], сохраняя свою структуру и форму значительное время. Однако модульные структуры воды не просто нелинейны, они к тому же необычайно разнообразны: хотя и образованные одним типом модулей, они собраны по разным алгоритмам сплетений групп. Слабые связи, объединяющие

Молекулярная ячейка – основные результаты

Сумма решений, полученных в предыдущих разделах при рассмотрении коллективных эффектов в жесткой модели молекулярной системы живой клетки – молекулярной ячейке, позволяет сформулировать ее окончательное определение и перечислить ее основные свойства. *Молекулярная ячейка – это субстанциональное образование из двух или нескольких близлежащих на данном отрезке времени молекулярно-водных систем; коллективные процессы возбуждения в этих системах, связанные с поступлением, преобразованием и излучением энергии, создают эффект небиохимического межмолекулярного взаимодействия – специфического свойства живых систем.*

части такого фрактального кристалла, позволяют ему реагировать на внешние воздействия, не изменяя существенно строения частей системы. Кроме того, из-за этих слабых связей при сборке фрактального кристалла происходит изменение строения уже сложившихся уровней под влиянием вновь возникающих. На каждом уровне иерархического соединения модулей могут возникнуть новые возможные варианты сплетений групп, определяющих их строение и свойства, которых не было в исходных частях системы. Далее эти фрактальные структуры становятся основой при росте последующих уровней и, таким образом, создаются новые возможности для их дальнейшей эволюции.

В связи с тем, что фрактальные кристаллы воды имеют увеличенную длину связей по сравнению со льдом *1Н*, образующемся при кристаллизации из массива воды, они являются энерго-напряженными, и их рост, как уже указывалось, возможен только в том случае, если у системы имеется «лишняя» энергия, необходимая и для роста, и последующего поддержания энерго-напряженного состояния. Как уже отмечалось, у живой системы такая энергия не только имеется, но она в режиме «разрядки» постоянно излучается из биополимера в окружающую его водную среду. Тем самым выполняется основное условие создания высокоорганизованной водной среды вокруг биополимеров живой системы и ее длительного существования, и реализуется третий – субстанциональный элемент молекулярной ячейки. Если использовать соответствующие потенциалы, то можно рассчитать зависимость «запасенной» упругой энергии в структурах воды от числа образующих их молекул [13]. Фрактальная природа структур связанный воды предохраняет их от фазового перехода в кристаллическую структуру классического льда *1Н* при сильных охлаждениях (на морозе). Более того, при частичном или полном разрушении фрактальных структур воды энергия, затраченная на их образование, будет высвобождаться. Фрактальные кристаллы, которые связаны с гидрофильными поверхностями биополимеров, при контакте с «жидкой» частью воды молекулярной ячейки используют ее как строительный материал для своего роста или переходят в нее при разрушении в том случае, когда от биополимера перестает поступать энергия, необходимая для поддержания их фрактальной структуры.

Что же означает для живой системы этот новый эффект небиохимического межмолекулярного взаимодействия, а именно излучения и восприятия когерентной энергии, возникающий в результате коллективных процессов в молекулярной ячейке? Поскольку все биополимеры живой клетки образуют друг с другом молекулярные ячейки постоянно изменяющихся конфигураций, полученный эффект означает, что все эти биополимеры находятся в состоянии постоянного обмена энергией, осуществляемого путем ее излучения в «режиме разрядки» через фрактальные кристаллы воды (антенны) и восприятия через такие же антенны соседними биополимерами. Действительно, в молекулярной ячейке энергией, определяющей как состояние биополимера, так и поддержание окружающей его водной среды, служит энергия солитона, движущегося по цепи биополимера. Эта энергия в первую очередь расходуется на химическое взаимодействие биополимера с другими молекулами, его механические конформации и перемещение в пространстве. Излишек энергии имеет возможность излучаться к другим полимерам молекулярной ячейки, поскольку на поддержание фрактальной кристаллической структуры воды (а в живой системе эта структура воды сформирована всегда!) необходима лишь незначительная доля энергии. Этим излучением поддерживается небиохимическая связь между биополимерами живой клетки, и их молекулярные конформации становятся взаимно согласованными. Гибель живой системы и прекращение в ней энергетических процессов ведет к разрушению ее водной кристаллической среды и соответствующему прекращению межмолеку-



лярного обмена энергией. Молекулярная ячейка, таким образом, выступает как новая единица в иерархии биологической субстанции на Земле, связующим звеном между мертвыми молекулами и живой клеткой. Ее выявление и определение ее свойств позволяет по-новому представить иерархию биологической субстанции на Земле (см. таблицу).

Иерархия биологической субстанции на Земле

Ступень (сверху вниз)	Организация или свойство
Многоклеточный организм	Жизнь + организменная организация + поликлеточная организация
Живая клетка	Жизнь + организменная организация
Молекулярная ячейка	Проявляет основные свойства жизни при поступлении энергии
Молекула	Неживой элемент, косная материя

Данная таблица подчеркивает основное свойство молекулярной ячейки: она может принадлежать как к живой, так и к неживой материи. Эта ячейка проявляет основные свойства жизни, когда хотя бы к одному из составляющих ее биополимеров поступает внешняя энергия, и является неживой при отсутствии такой энергии.

Спиновое эхо – физический эффект сложности последовательности импульсных сигналов

Основной сложностью в интерпретации энергетики живой клетки следует считать небольшую величину энергии одиночного солитона, которая при гидролизе даже всех трех фосфатных групп АТФ составляет немногим более 0,5 эВ. Этой энергии явно недостаточно для большинства химических реакций, в которые вступает биополимер, особенно если они сопряжены с необходимостью его механического перемещения. В связи с этим необходимо рассмотреть вопрос о возможном механизме, приводящем к преобразованию множества слабых (низкоэнергетических) импульсов в импульсы, энергетически значимые.

В качестве одного из возможных механизмов усиления энергетических сигналов в живой системе рассмотрим механизм, подобный физическому эффекту «спинового эха». Правомочность распро-

странения спинового эха на биологические системы уже рассматривалась в работе [14], и поэтому здесь достаточно лишь кратко повторить основные доводы из этой статьи.

Как известно, эффект спинового эха состоит в формировании анизотропной магнитной средой, находящейся во внешнем магнитном поле, нового электромагнитного импульса из последовательности двух и более импульсов, поступающих в эту среду (параметрическое эхо), или в формировании такого импульса в результате возмущения самой среды внешним электромагнитным, акустическим или иным физическим полем (ангармоническое эхо). Как было показано в работе [15] для твердого анизотропного магнетика, в обоих процессах имеется конечная вероятность появления импульсного сигнала эха, превышающего по амплитуде исходные сигналы.

Можно ли теоретические представления спинового эха распространить на живые биологические системы? Этот вопрос еще не рассматривался теоретически и потому ответить на него пока можно лишь путем аналогии.

Из модели молекулярной ячейки следует, что анизотропная среда фрактальных кристаллов воды, обладающих упорядоченными спиновыми моментами, вполне соответствует требованиям, предъявляемым к среде, способной создавать параметрический или ангармонический эхо-сигнал в ответ на серию импульсных или полевых внешних воздействий. В качестве постоянного магнитного поля может выступать магнитное поле Земли. В качестве воздействий, побуждающих к возникновению сигнала эха, могут выступать импульсные сигналы различного происхождения и внешние физические поля. Безусловно, для доказательства реальности указанного механизма должно быть получено решение «жесткого» варианта такой модели, и его получение – это лишь дело времени.

Считая, что механизм усиления слабых импульсных или полевых сигналов существует, рассмотрим с этой точки зрения взаимодействие молекулярных ячеек в клетке и их реакцию на внешние физические поля.

Прежде всего, множество актов передачи химической энергии от АТФ к биополимеру, сопровождающихся немедленным преобразованием качества переданной энергии и формированием солитонов (заметим при этом, что в данной модели точка взаимодействия АТФ с биополимером

не имеет значения) может сопровождаться процессами сложения амплитуд солитонов и образованием импульсов с энергией, достаточной для обеспечения химических реакций даже с очень большими потенциальными барьерами, а также и механических затрат энергии биополимера. Если в текущее время данный биополимер не участвует в химическом взаимодействии и не совершает механических действий, требующих энергетических затрат, он переизлучает практически всю полученную им химическую метаболическую энергию ближайшим к нему биополимерам, побуждая их к химическим и (или) механическим событиям. Тем самым поддерживается связь между биополимерами в молекулярной ячейке и между молекулярными ячейками в живой клетке, и их конформации и химические взаимодействия становятся взаимно согласованными. Именно таким образом дальнее взаимодействие между молекулярными ячейками влияет на определение последовательности межмолекулярных процессов в клетке, способствует их синхронизации и взаимной согласованности.

Из представленных в данной статье соображений следует ряд важных выводов, имеющих как фундаментальное, так и прикладное значение.

1. На молекулярном уровне процессу жизни соответствуют энергетические процессы, состоящие в преобразовании биополимерами химической энергии в энергию более высокого уровня и поддержании (за счет этой энергии) системы биомолекула – вода в состоянии относительного устойчивого неравновесия, сохраняющегося так долго, как долго система потребляет внешнюю энергию. При этом основным механизмом межмолекулярной связи для биополимеров, не находящихся в прямом химическом контакте, является излучение и прием энергетических импульсов от близлежащих молекулярно-водных систем, образующих, таким образом, субстанциональное образование – молекулярную ячейку. Коллективные процессы возбуждения в молекулярной ячейке, связанные с поступлением, преобразованием и излучением энергии, есть специфическое свойс-

тво живых систем, отличающее их от систем неживых.

2. Молекулярные ячейки, составляющие живые клетки, не «самостоятельные» системы в том смысле, что они «сами себя не кормят», но нуждаются в непрерывной энергетической подпитке из внешней среды. Для этой подпитки молекулярных ячеек служит сам организм (клетка), и как только он перестает исполнять свои функции – снабжать энергией свои молекулярные ячейки, – они перестают функционировать, разрушаются их фрактальные антенны, и организм умирает.

3. Из приведенной модели также следует вывод о неприхотливости молекулярной ячейки в энергетической «пище». Всю поступающую химическую метаболическую энергию биополимеры молекулярной ячейки перерабатывают в энергию высшего качества – солитон, но в солитон также преобразуется любое внешнее, даже слабо локализованное, возмущение молекулярной цепи, связанное с любым некогерентным поступлением энергии. Взаимный обмен электромагнитной энергией между биополимерами молекулярной ячейки означает, что в качестве «подпитки» биополимеры готовы принимать не только химическую, но и внешнюю электромагнитную энергию (в широком диапазоне частот), а, возможно, даже и акустическую. Отсюда непосредственно следует фундаментальный вывод о том, что формы жизни, к которым мы привыкли на Земле и которые используют именно химическую энергию (пищу), приводящую к обязательному движению вещества через живую систему, не являются единственными возможными, а значит возможна жизнь, использующая для своего поддержания электромагнитную, гравитационную или другие формы энергии физических полей.

Прикладных же выводов может быть сделано много. К основным из них, по-видимому, можно отнести возможность управлять клеткой с помощью направленных сигналов физической природы. В конечном итоге это позволит создать новую медицину – безлекарственную медицину здоровья и, возможно, безлекарственно решить не только проблему онкологии, но и многих других системных заболеваний организма.



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Линг, Г.** Физическая теория живой клетки: незамеченная революция [Текст] / Г. Линг–СПб.: Наука, 2008. – 376 с.
2. **Поллак, Дж.** Клетки, гели и двигатели жизни [Текст] / Дж. Поллак. – М.: Мир, 2007.
3. **Насонов, Д.Н.** Местная реакция протоплазмы и распространяющееся возбуждение [Текст] / Д.Н. Насонов. – М., Л. : Изд-во АН СССР, 1962. – 426 с.
4. **Трошин, А.С.** Проблема клеточной проницаемости [Текст] / А.С. Трошин. – М., Л. : Изд-во АН СССР, 1956. – 474 с.
5. **Сент-Дьерди, А.** Биоэнергетика [Текст] / А. Сент-Дьерди. – М.: ОГИЗ, Госиздат мат.-физ. лит-ры, 1960.
6. **Галль, Л.Н.** Новый подход к проблеме биоэнергетики – новые методы исследований в науках о жизни [Текст] / Л.Н. Галль, Н.Р. Галь // Научное приборостроение. – 2008. – Т. 18. – № 2. – С. 52–60.
7. **Трубецков, Д.И.** Введение в синергетику. Хаос и структуры [Текст] / Д.И. Трубецков. – М.: Едиториал УРСС, 2004. – 240 с.
8. **Давыдов, А.С.** Солитоны в молекулярных системах [Текст] / А.С. Давыдов. – Киев: Наукова думка, 1988. – 304 с.
9. **Del Guidice, E.** An approach to collective behavior of biological systems based on quantum field theory [Text] / E. Del Guidice, S. Doglia, M. Milani [et al.] // Nucl. Phys. – 1985. – Vol. B251–[FS 13] – P. 375–400.
10. **Гриб, А.А.** Проблема инвариантности в квантовой теории поля [Текст] / А.А. Гриб. – М.: Наука, 1978. – 274 с.
11. **Fröhlich, H.** Advances in Electronics and Electron Physics [Text] / H. Fröhlich; ed. L. Morton // Advances in Electronics and Electron Physics. – 1980. – Vol. 53. – P. 858.
12. **Бульянков, Н.А.** О возможной роли гидратации как ведущего интеграционного фактора в организации биосистем на различных уровнях иерархии [Текст] / Н.А. Бульянков // Биофизика. – 1991. – Т. 36. – № 2. – С. 181–243.
13. **Лобышев, В.И.** Роль модульного дизайна в изучении процессов системной самоорганизации [Текст] / В.И. Лобышев, А.Б. Соловей, Н.А. Бульянков // Биофизика. – 2003. – Т. 48. – № 6. – С. 1011–1017.
14. **Галль, Л.Н.** Механизм межмолекулярной передачи энергии и восприятия сверхслабых воздействий химическими и биологическими системами [Текст] / Л.Н. Галль, Н.Р. Галь // Биофизика. – 2009. – Т. 54. – № 3. – С. 563–574.
15. **Плещаков, И.В.** Об эффекте усиления при возбуждении и регистрации параметрических эхосигналов [Текст] / И.В. Плещаков, Я.А. Фофанов // Научное приборостроение. – 2007. – Т. 17. – № 2. – С. 35–38.

УДК 929

Ф.П. Кесаманлы

АКАДЕМИК АБРАМ ФЁДОРОВИЧ ИОФФЕ (К 130-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ)

Для меня было честью знакомство с профессором Иоффе, одним из величайших ученых мира, личностью, наделенной большим обаянием, предельной честностью и высокими идеалами, вызывающими всеобщее уважение. Он и многочисленные его ученики сыграли ведущую роль в развитии физики не только в Советском Союзе, но и в мире в целом.

Джон Бардин, дважды лауреат Нобелевской премии по физике

Абрам Фёдорович Иоффе – выдающийся ученый и видный общественный деятель. Как ученый-физик он мыслил масштабно, охватывая многие разделы современной физики; в его научных исследованиях основным принципом была связь фундаментальной и технической физики, целью – скорейшее освоение результатов исследований, суливших решение задач промышленности и обороны страны.

Он родился 29 октября 1880 года в городе Ромны Полтавской губернии и был старшим среди пятерых детей в семье. Его отец, Фёдор Васильевич Иоффе, служил бухгалтером в частной банкирской конторе, а мать, Рашель Абрамовна Иоффе (урожденная Вайнштейн), была домохозяйкой.

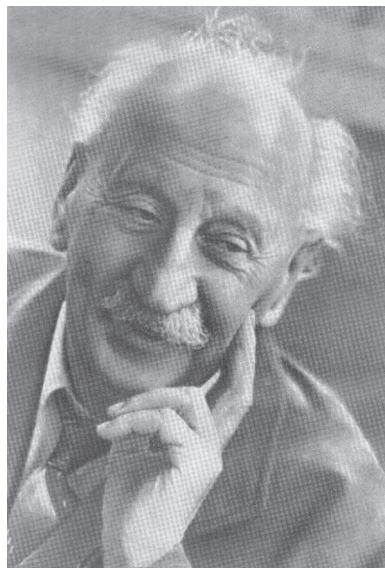
В 1888 году А.Ф. Иоффе поступил в приготовительный класс Роменского реального училища, которое и окончил в 1897 году. В том же году он поступил на механическое отделение Санкт-Петербургского технологического института Императора Николая I. Параллельно с учебой в институте он руководил постройкой моста на линии

Полтава–Ростов и строительством цеха отливки и обработки брони на Ижорском заводе в Петербурге. 6 июня 1902 года А.Ф. Иоффе окончил институт со званием инженера-технолога, но его

всегда интересовала физика; он решил посвятить ей всю свою будущую жизнь. Поэтому для продолжения образования он отправился в Мюнхенский университет к Вильгельму Конраду Рентгену. Там А.Ф. Иоффе начал серьезно заниматься научной деятельностью. Через три года, 5 июня 1905 года, защитив диссертацию на тему «Упругое последействие в кристаллическом кварце» с наивысшей оценкой, он вернулся в Санкт-Петербург.

Об академике Абраме Фёдоровиче Иоффе (1880–1960) и его самой крупной в стране научной школе физиков написано много [1–8], и все публикации посвящены преимущественно анализу его жизни,

научной и организационно-научной деятельности, а также созданной им научной школе. Поэтому в этой статье, кратко отметив основные достижения А.Ф. Иоффе и его научной школы [9], мы ос-



Абрам Фёдорович Иоффе.
1960 год



тановимся на рассмотрении еще одной сферы его деятельности, слабо освещенной в литературе, а именно его работы в области образования [10–22]. Представим также читателю малоизвестные материалы о его встречах с лауреатами Нобелевских премий в области физики и химии [23].

В 1916 году на базе физической лаборатории Политехнического института А.Ф. Иоффе организовал семинар по новой физике, участники которого стали в дальнейшем первыми и ведущими сотрудниками Физико-технического института, преподавателями физико-механического факультета Политехнического института, составили костяк его научной школы.

А.Ф. Иоффе создал три института, с которыми на многие годы была связана его судьба:

Физико-технический институт РАН, директором которого он стал со дня основания в 1918 году и был до 1950 года. Сегодня этот институт носит его имя.

Агрофизический научно-исследовательский институт РАСХН. Он был создан в 1932 году и возглавлялся А.Ф. Иоффе до своей смерти.

Лаборатория полупроводников была создана в 1952 году по Постановлению Президиума АН СССР специально для А.Ф. Иоффе. В 1955 году она была преобразована в Институт полупроводников.

Кроме того, А.Ф. Иоффе принимал активное участие и в организации таких институтов физического профиля, как Ленинградский областной теплотехнический институт, Электрофизический институт, Институт химической физики, Украинский физико-технический институт, Сибирский физико-технический институт, Уральский физико-технический институт.

На 1960 год – год смерти А.Ф. Иоффе – все крупнейшие физические институты Академии наук СССР возглавляли ученые-академики, прошедшие школу «физмеха-физтех»: Институт атомной энергии им. И.В. Курчатова – А.П. Александров, Институт теоретической и экспериментальной физики – А.И. Алиханов, Акустический институт – Н.Н. Андреев, Институт физических проблем – П.Л. Капица,

Физико-технический институт – Б.П. Константинов, Институт химической физики – Н.Н. Семенов, Физический институт им. П.Н. Лебедева – Д.В. Скobelцын, Институт биофизики – Г.М. Франк. Кроме того, академик Г.В. Курдюмов возглавлял Институт металловедения и физики металлов в составе Центрального научно-исследовательского института металлургии.

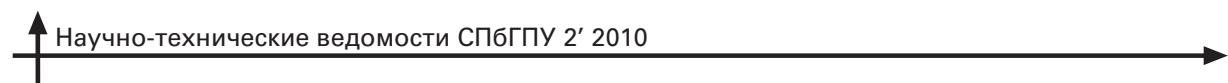
Из 59 физиков, избранных в Академию наук СССР в период с 1918 по 1946 год, 23 представили научную школу А.Ф. Иоффе. Среди ученых и инженеров, трижды удостоенных звания «Герой Социалистического Труда», пять человек – А.П. Александров, Я.Б. Зельдович, И.В. Курчатов, Ю.Б. Харитон и К.И. Щелкин – были из научной школы А.Ф. Иоффе.

Три представителя школы А.Ф. Иоффе были удостоены Нобелевских премий: Н.Н. Семенов – по химии за 1956 год, П.Л. Капица и Ж.И. Алфёров – по физике за 1978 и 2000 годы соответственно.

Отлично понимая, что без хорошего школьного и вузовского образования в стране не может быть хорошей и большой науки, Абрам Федорович параллельно с наукой занимался преподавательской и научно-организационной деятельностью в области образования. Более того, он, по свидетельству профессора А.Ф. Чудновского, активно поощрял своих сотрудников совмещать научную работу с преподаванием, считая, что эти два вида деятельности дополняют друг друга и способствуют формированию широко образованного физика.



Научный семинар А.Ф. Иоффе по новой физике в Петроградском политехническом институте Императора Петра Великого. 1916 год



Абрам Федорович считал, что научный работник должен овладеть не только той узкой областью знаний, в которой является специалистом, но обязан освоить и смежные и даже отдаленные области физики. Он особо подчеркивал, что чтение лекций, которое заставляет преподавателя концентрированно и последовательно излагать свою мысль, шлифует язык, способствует логическому и стройному мышлению. Общение преподавателя со студентами также необходимо, с одной стороны, для формирования будущих физиков, которые благодаря контакту с преподавателями многое могут почерпнуть у них в отношении характера и стиля работы, а с другой стороны, и сам преподаватель, находясь среди молодежи, не стареет, заражается энтузиазмом, свойственным молодежи задором, ограждает себя в какой-то мере от консерватизма, столь вредного для науки.

Однако деятельность А.Ф. Иоффе, связанная с проблемами образования, сравнительно полно представлена в его собственных публикациях, в меньшей мере освещена в научной и методической литературе. А ведь около пятидесяти лет жизнь А.Ф. Иоффе была тесно связана со средней и высшей школой. Его педагогическая деятельность началась в 1906 году в физической лаборатории Санкт-Петербургского политехнического института, куда он был приглашен в качестве лаборанта (по современным понятиям – ассистента) и где руководителем был профессор В.В. Скобельцын (1863–1947).

Параллельно с преподаванием в Политехническом институте, с 1907 года он стал преподавать в Коммерческой школе, с 1908 по 1914 год читал курс термодинамики в Горном институте, с 1909 по 1913 год – курс физики на Высших курсах П.Ф. Лесгафта (1837–1909), а с 14 января 1914 года – курс «Теория излучения» в Императорском Санкт-Петербургском университете. В 1919 году по инициативе А.Ф. Иоффе в Петроградском политехническом институте был организован физико-механичес-

кий факультет, деканом которого он был 13 лет (1919–1928; 1945–1948).

Когда в конце 50-х годов прошлого века в стране началось движение за модернизацию школьного физического образования, А.Ф. Иоффе откликнулся замечательной статьей «Физика в средней школе», сыгравшей большую роль в составлении новой школьной программы и учебников по физике.

С самого начала преподавательской деятельности он стал активным сторонником принятой в Политехническом институте системы обучения, основанной на самостоятельной работе студентов



А.Ф. Иоффе и Р.Э. Милликен, лауреат Нобелевской премии по физике за 1923 год. Фото 1926 года



А.Ф. Иоффе и Н. Бор, лауреат Нобелевской премии по физике за 1922 год. Фото 1934 года, Ленинград



в ходе практических и лабораторных занятий. Этую систему он распространил и на Коммерческую школу. По воспоминаниям академика И.В. Обретимова (1894–1981), учившегося у него в пятом классе (ныне это седьмой класс), А.Ф. Иоффе водил своих учеников на экскурсии в Политехнический институт и привлекал их к выполнению учебных экспериментов в физической лаборатории.

Впоследствии он начал развивать такую систему обучения и активно привлекать студентов к участию в научно-исследовательской работе. Выпускник электромеханического отделения Петрог-

радского политехнического института 1919 года П.Л. Капица опубликовал первые свои научные работы в Журнале Русского физико-химического общества в 1916 году, будучи еще студентом. В этом же журнале в 1915 и 1916 годах были опубликованы первые научные статьи студентов Петроградского университета П.И. Лукирского и Н.Н. Семенова.

Широкое привлечение студентов к выполнению научных исследований в физико-техническом отделе Государственного рентгенологического и радиологического института, начиная с младших курсов, стало основным принципом обучения на физико-механическом факультете Петроградского политехнического института.

В подтверждение вышеизложенного приведем слова из выступления в Ленинграде 28 октября 1980 года выпускника физико-механического факультета 1925 года, трижды Героя Социалистического Труда, академика Ю.Б. Харитона (1904–1996) на сессии президиума АН СССР, посвященной столетию со дня рождения академика А.Ф. Иоффе: «Весной 1921 года я закончил первый курс обучения, и в моей жизни произошло важнейшее событие. Меня пригласил Николай Николаевич Семенов и предложил мне и двум моим однокурсникам (А.Ф. Вальтеру и В.Н. Кондратьеву) работать в его лаборатории. Это было огромное счастье». Эти «три мушкетера», будучи студентами, не только занимались наукой, но и в 1924 году составили под редакцией А.Ф. Иоффе первый советский «Задачник по физике» для высшей школы. В 1925–1938 годах этот задачник выдержал одиннадцать изданий на русском языке, причем два – в 1938 году; четвертое, пятое и девятое издания были переведены на украинский язык и напечатаны в Харькове в 1932, 1935 и 1939 годах; последние издания были переведены на грузинский и узбекский языки и изданы соответственно в Тбилиси и Ташкенте в 1937 и 1939 годах. Этот первый задачник не утратил своего



Ч.В. Раман, лауреат Нобелевской премии по физике за 1930 год, в гостях у А.Ф. Иоффе. Фото 1957 года, Ленинград



А.Ф. Иоффе и В. Шокли, лауреат Нобелевской премии по физике за 1956 год. Фото 1960 года, Прага

значения и в наши дни. Автору настоящей статьи приходилось решать из него задачи в начале 1950-х годов при изучении курса общей физики во время учебы в Бакинском университете и использовать его в конце 1970-х и в начале 1980-х годов в своей преподавательской деятельности в Ленинградском политехническом институте.

Таким образом, в недрах научной школы А.Ф. Иоффе появилась основанная на тесном и естественном взаимодействии науки и образования так называемая «физтеховская» система образования, которая позволяет быстро и целенаправленно готовить научные и инженерные кадры, интеллектуальную элиту самой высокой квалификации.

Опираясь на положительный опыт сотрудничества физико-механического факультета ЛПИ и лаборатории Физико-технического института, А.Ф. Иоффе говорил в своем докладе в Физическом институте МГУ 14 декабря 1930 года: «Научная деятельность, умение наблюдать, искать новые пути, находить выходы из противоречий, на которые наталкиваешься в своей работе или в ходе мыслей, – это работа, которая должна вестись непрерывно и начинаться возможно раньше. Обучение не должно разбиваться последовательно на два периода, когда лишь во втором периоде разрешается работать активно, а в первом периоде усваивается такое число фактов и готовых формул, что становишься неспособным к самостоятельной творческой работе второго периода. Мне кажется, что усвоение и творческая работа должны идти параллельно, причем как можно раньше должно начинаться самостоятельное творчество.»

Опыт тесного сотрудничества физико-механического факультета Ленинградского политехнического института и Физико-технического института АН СССР в деле подготовки исследовательских кадров для науки и производства получил распространение и развитие в послевоенные годы при организации Физико-технического и Инженерно-физического институтов в Москве и Новосибирского университета в Сибири.

Все представленные сведения позволяют считать А.Ф. Иоффе одним из основателей введения научно-исследовательской работы студентов в учебные планы вузов.

Им были предложены и другие идеи по проблемам образования, остающиеся актуальными и сегодня. В частности, это идея профессиональной направленности обучения физике и о междисциплинарных связях курса физики.

На эти темы пишут и публикуют научно-методические статьи и монографии, готовят и защищают диссертации на соискание ученых степеней кандидатов и докторов педагогических наук. В частности, автор настоящей работы сам выступал с докладами, публиковал статьи и оппонировал кандидатскую диссертацию по этой тематике (поэтому и близко знаком с работами А.Ф. Иоффе по проблемам образования).

По поводу профессиональной направленности он писал: «...нельзя преподавать одну и ту же физику – физику «вообще» – металлургу и электрику, врачу и агроному. Такое преподавание и делает физику общеобразовательным предметом, тогда как она призвана также обогащать и углублять специальное образование. Для агронома физика – это основа агротехники, светофизиологии, для врача – биофизики. Электрику физика (а не электротехника) должна дать основанное на квантовой механике учение об электронах в вакууме, в газах, в металлах, полупроводниках и изоляторах – понимание механизма намагничивания и сегнетоэлектричества. Металлургу и теплотехнику необходима молекулярная физика, статистическая термодинамика и т. п.». Более того, по мнению великого ученого, с которым нельзя не согласиться и сегодня, «упражнения по курсу физики следует вести на техническом материале, соответствующем профилю данного втуза. Для того чтобы разбираемые на упражнениях задачи отвечали на реальные вопросы производства, желательно, чтобы среди руководителей упражнениями были молодые сотрудники технических кафедр. Такой вид связи кафедры физики с ведущими техническими кафедрами втуза полезен еще и потому, что он повысит квалификацию преподавателей специальных дисциплин в области физики».

Что касается междисциплинарных связей, то А.Ф. Иоффе считал: «Курс физики как часть обучения необходимо согласовать как с программой диалектического и исторического материализма, так и с содержанием курсов механики и химии, сопротивления материалов и технической термодинамики и других технических дисциплин».

При анализе работ А.Ф. Иоффе по проблемам образования нельзя не отметить тот огромный вклад, который он внес в создание современных учебных пособий по физике для вузов. Еще в 1909 году А.Ф. Иоффе опубликовал курс лекций по термодинамике, читавшийся им студентам Горного ин-



ститута; курс переиздавался в 1912 и 1914 году. В 1914 году профессор О.Д. Хвольсон предложил своему коллеге А.Ф. Иоффе написать главу о термодинамике лучистой энергии в очередное издание своего знаменитого многотомного курса физики. В 1919 году вышли в свет написанные А.Ф. Иоффе «Лекции по молекулярной физике», а в 1927 году – «Курс физики». И эти книги также были позднее переизданы. Более подробно об учебных пособиях, опубликованных А.Ф. Иоффе, написано в монографии М.С. Соминского «Абрам Федорович Иоффе». Здесь мы приведем из нее только одну фразу: «Учебники Иоффе сжаты по объему и между тем включают в себя все самое главное. Это своего рода пространные конспекты, в которых лаконичность фразы не только не затрудняет ее восприятия, а наоборот, облегчает».

Преподавательской деятельностью и проблемами образования занимались многие представители научной школы А.Ф. Иоффе. В частности, в Политехническом институте на кафедре экспериментальной физики преподавали ученые, ставшие впоследствии академиками: Д.В. Скobelцын, П.Л. Капица, Н.Н. Семенов, И.В. Обреимов, А.И. Шальников, Ю.Б. Харитон, А.П. Александров, А.И. Алиханов, С.Н. Журков, И.К. Кикоин, В.М. Тучекевич.

Наибольших успехов на этом поприще добились академики Исаак Константинович Кикоин (1908–1984) и Жорес Иванович Алферов (р. 1930). Описание их многогранной педагогической деятельности выходит за рамки данной статьи. Отметим лишь отдельные факты.

Исаак Константинович Кикоин создал уникальный физико-математический журнал для школьников «Квант» (выходит с января 1970 года) и в течение 15 лет был его бессменным главным

редактором. Журнал «Квант» пользовался и до сих пор пользуется большим интересом не только среди школьников, но и среди самого широкого круга читателей.

Жоресу Ивановичу Алферову удалось превратить в жизнь свою давнюю мечту: возродить в новом качестве заложенную еще Петром Первым идею тесной связи науки и образования.

В самый канун 2005 года был подписан приказ о выдаче лицензии на образовательную деятельность последнего детища Жореса Ивановича – Академического физико-технологического университета, ректором которого он и был назначен. Занятия в этом уникальном для России учебном заведении послевузовской подготовки по магистерской и аспирантской программам начались первого сентября 2005 года.

Абрам Федорович прожил долгую, творчески активную и плодотворную жизнь. Около шестидесяти лет он находился в самом центре развития физической науки. На различных международных съездах и особенно на Сольвеевских конгрессах он встречался практически со всеми выдающимися физиками XX века, его современниками. Мне как автору ряда публикаций о нобелевских лауреатах удалось выявить среди собеседников А.Ф. Иоффе более пятидесяти лауреатов Нобелевской премии в области физики и химии. Среди них можно назвать А. Эйнштейна, М. Планка, Э. Резерфорда, Н. Бора и дважды лауреатов – М. Кюри и Д. Бардина [23]. С большинством из нобелевских лауреатов он был близко знаком, с некоторыми переписывался, об отдельных писал очерки, статьи и некрологи. Сохранилось много коллективных и парных фотографий с этих встреч. Некоторые из них мы здесь приводим.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Соминский, М.С. Абрам Федорович Иоффе [Текст] / М.С. Соминский. – М., Л.: Наука, 1964. – 644 с.
2. Воспоминания об А.Ф. Иоффе [Текст] / Отв. ред. В.П. Жузе. – Л.: Наука, 1972. – 252 с.
3. Научно-организационная деятельность академика А.Ф. Иоффе [Текст]: Сб. документов / Сост.: Н.М. Митрякова, Н.Я. Московченко, Т.М. Королева. – Л.: Наука, 1980. – 365 с.
4. Иоффе, А.Ф. Избранные труды [Текст]: в 2 т. Т. 1. / А.Ф. Иоффе. – Л.: Наука, 1974. – 326 с.
5. Иоффе, А.Ф. Избранные труды [Текст]: в 2 т. Т. 2. / А.Ф. Иоффе. – Л.: Наука, 1975. – 471 с.
6. Иоффе, А.Ф. О физике и физиках [Текст] / А.Ф. Иоффе. – Л.: Наука, 1985. – 544 с.
7. Иоффе, А.Ф. Встречи с физиками [Текст] / А.Ф. Иоффе. – Л.: Наука, 1983. – 262 с.

8. Чернощекова, Т.М. А.Ф. Иоффе [Текст] / Т.М. Чернощекова. – М.: Просвещение, 1983. – 112 с.
9. Кесаманлы, Ф.П. К 125-летию со дня рождения академика А.Ф. Иоффе [Текст] / Ф.П. Кесаманлы // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2005. – № 3. – С. 243–245.
10. Иоффе, А.Ф. Физика в реконструктивный период [Текст]: стенограмма одноименного доклада в сокращенном виде, прочитанного 14 декабря 1930 г. в Физическом институте МГУ / А.Ф. Иоффе // Вестник АН СССР. – 1931. – № 1. – С. 25–39.
11. Иоффе, А.Ф. Вступительное слово на сессии группы физики АН СССР по вопросам преподавания физики во втузах [Текст] / А.Ф. Иоффе // Изв. АН СССР. Сер. физ. – 1937. – № 1. – С. 5–7.
12. Иоффе, А.Ф. Выступление на сессии группы физики АН СССР по вопросам преподавания физики во втузах [Текст] / А.Ф. Иоффе // Изв. АН СССР. Сер. физ. – 1937. – № 1. – С. 51–55.
13. Иоффе, А.Ф. Основные методические установки курса физики во втузах [Текст] / А.Ф. Иоффе // Вестник высшей школы. – 1947. – № 1. – С. 5–6.
14. Иоффе, А.Ф. О преподавании физики в высшей технической школе [Текст] / А.Ф. Иоффе // Вестник высшей школы. – 1951 – № 10. – С. 16–20.
15. Иоффе, А.Ф. Физика в средней школе [Текст] / А.Ф. Иоффе // Народное образование. – 1958. – № 3. – С. 94–96.
16. Кесаманлы, Ф.П. К истории кафедры «Экспериментальная физика» СПбГТУ [Текст] / Ф.П. Кесаманлы, С.Н. Колгатин, В.Б. Ступак // Наука и техника: Вопросы истории и теории. Тез. XX конф. СПб. отделения Рос. нац. комитета по истории и философии науки и техники (22–25 ноября 1999 г.). Вып. XV. – СПб.: СПбФ ИИЕТ РАН, 1999. – С. 82–83.
17. Кесаманлы, Ф.П. Роль физической лаборатории Политехнического института в создании научной физической школы в России [Текст] / Ф.П. Кесаманлы, С.Н. Колгатин, В.Б. Ступак // Вестник СПбГТУ. – 2000. – № 2. – С. 114–123.
18. Задачник по физике [Текст]: уч. пособие для вузов / сост. А.Ф. Вальтер, В.Н. Кондратьев, Ю.Б. Харитон; под ред. акад. А.Ф. Иоффе. – Изд. 4-е, испр. – М., Л.: Гостехиздат, 1931. – 103 с.
19. Иоффе, А.Ф. Термодинамика [Текст]; с прилож. / А.Ф. Иоффе. – Изд. 2-е (литогр.). – СПб.: Изд. Кассы взаимопом. студ. СПб. Горного ин-та, 1912. – 152 с.
20. Иоффе, А.Ф. Термодинамика лучистой энергии [Текст] / В кн.: О.Д. Хвольсон. Курс физики в 4 т. Т. 4, 2-я половина. Гл. 9. –Петроград: Риккер, 1915. – С. 623–710.
21. Иоффе, А.Ф. Лекции по молекулярной физике [Текст] / А.Ф. Иоффе. – Изд. 2-е, соверш. перераб. – Петроград: Изд. М. и С. Сабашниковых, 1923. – 333 с.
22. Иоффе, А.Ф. Курс физики [Текст]: в 2 ч. Ч. 1. / А.Ф. Иоффе. – М., Л.: Госиздат, 1927. 270 с.; изд. 2-е, доп. – Л.: Наука, 1975. – 471 с.
23. Кесаманлы, Ф.П. Встречи А.Ф. Иоффе с Нобелевскими лауреатами [Текст] / Ф.П. Кесаманлы // Наука, технологии, общество и нобелевское движение: матер. Нобелевского конгресса – 8-й Междунар. встречи-конференции лауреатов Нобелевской премии и нобелистов; 24 – 29 сент. 2009 года; г. Тамбов, Россия. Тамбов, М., СПб., Баку, Вена: Изд-во «Нобелистика», 2009. – Тр. МИНЦ. Вып. 3. – С. 296–298.



СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОНТАКТНЫЕ ДАННЫЕ

АБДУЛЛАЕВ Абдула Рамазанович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой Национального исследовательского университета «Пермский государственный технический университет».

614990 г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29
(342) 239-15-70,
h.m@pstu.ru

АГРАФОНОВ Юрий Васильевич – доктор физико-математических наук, профессор, декан физического факультета Иркутского государственного университета.

664003 г. Иркутск, бульв. Гагарина, д. 20
(3952) 24-19-09
agrafonov@physdep.isu.ru

АПУШКИНСКИЙ Евгений Геннадиевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-74
apushkinsky@hotmail.com

АРСЕНЬЕВ Дмитрий Германович – доктор технических наук, проректор по академической и международной деятельности, профессор Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195220, г. Санкт-Петербург, Гражданский пр., д. 28
(812) 534-10-01
newton@imop.spbstu.ru

АРТАМОНОВА Алена Сергеевна – выпускница радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-76-21
kapralova2006@yandex.ru

БАКАЕВ Александр Викторович – студент физико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
bakaev_vic@mail.ru

БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

БЕРКОВСКИЙ Николай Андреевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики ИМП СПбГУ.

195220, г. Санкт-Петербург, Гражданский пр., д. 28
(812) 606-62-24
berkovsk@mail.ru

БОЯРШИНОВ Михаил Геннадьевич – доктор технических наук, профессор кафедры динамики и прочности машин Пермского государственного технического университета.

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29-а
(342) 239-13-40
michaelgb@mail.ru

ВАНИНА Елена Александровна – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической и экспериментальной физики Амурского государственного университета.

675027 г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, д. 21
(4162) 39-46-48
evanina@yandex.ru

ВОЛЕГОВ Павел Сергеевич – ассистент кафедры математического моделирования систем и процессов Пермского государственного технического университета.

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29
(342) 239-16-07
crocinc@mail.ru

ГАВРИШ Юрий Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
unga1956@mail.ru

ГАЛЛЬ Лидия Николаевна – доктор физико-математических наук, профессор, заведующая лабораторией приборов и методов экомедицинского мониторинга Института аналитического приборостроения РАН.

190103, г. Санкт-Петербург, Рижский пр., д. 26
(812) 251-86-00
gall@ms.ioffe.ru

ГАЛЛЬ Николай Ростиславович – доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26
(812) 292-71-14
gall@ms.ioffe.ru

ГОЛУБЕВА Ирина Анатольевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической и экспериментальной физики Амурского государственного университета.

675027 г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, д. 21
(4162) 39-45-08
golubeva0212@mail.ru

ЖГУТОВ Владимир Михайлович – кандидат технических наук, докторант кафедры технологии, организации и экономики строительства Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 535-79-92
abc_kitezht@mail.ru

ЖУРКИН Евгений Евгеньевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
ezhurkin@phmf.spbstu.ru

ЗЕЛЕНЦОВ Никита Александрович – студент физического факультета Иркутского государственного университета.

664003 г. Иркутск, бульв. Гагарина, д. 20
(3952) 24-19-09
agrafonov@physdep.isu.ru

ИВАНИЩЕВ Дмитрий Александрович – младший научный сотрудник кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

ИВАНОВ Владимир Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры информатики ИМОП Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195220, г. Санкт-Петербург, Гражданский пр., д. 28
(812) 534-13-85
ivm@imop.spbstu.ru

ИЛЬИН Никита Владимирович – студент радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812)- 552-95-16
dmitrykiesewetter@gmail.com

ИОРДАН Владимир Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры вычислительной техники и электроники Алтайского государственного университета.

656049, г. Барнаул, пр. Ленина, д. 61
(3852) 38-07-51
jordan@phys.asu.ru

КАПРАЛОВА Виктория Маратовна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной физики и оптики твердого тела Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-76-21
kapralova2006@yandex.ru

КАФИДОВА Галина Александровна – студентка радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-63-14
kafidovagalina@rambler.ru

КЕСАМАНЛЫ Фагам Паша оглы – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31

КИЗЕВЕТТЕР Дмитрий Владимирович – доктор физико-математических наук, доцент кафедры «Электрическая изоляция, кабели и конденсаторы» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-95-16
dmitrykiesewetter@gmail.com

КИСЕЛЁВА Алена Николаевна – аспирантка кафедры теоретической и экспериментальной физики Амурского государственного университета.

675027 г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, д. 21
(4162) 39-45-08
golubeva0212@mail.ru



КОТОВ Дмитрий Олегович – аспирант кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

КРАСНОВ Арсений Вадимович – студент радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 586-65-19
arseny.krasnov@gmail.com

ЛАНКИН Сергей Викторович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Амурского государственного университета.

675027 г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, д. 21
(4162) 39-45-08
golubeva0212@mail.ru

МАСЛОВСКАЯ Анна Геннадьевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического анализа и моделирования Амурского государственного университета.

675027 г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, д. 21
(4162) 54-50-48
maslovskayaag@mail.ru

МЕЛЕНЧУК Иван Александрович – аспирант кафедры радиоэлектроники Иркутского государственного университета.

664003 г. Иркутск, бульв. Гагарина, д. 20
(3952) 24-19-09
agrafonov@physdep.isu.ru

МОКРОВА Дарья Всеволодовна – аспирант кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-63-14
dashkeria@gmail.com

НИКУЛИН Илларион Леонидович – кандидат технических наук, доцент кафедры общей физики Национального исследовательского университета «Пермский государственный технический университет».

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29-а
(342) 219-82-12
nikulin.illarion@gmail.ru

ПАРФЕНОВ Владимир Александрович – кандидат технических наук, старший научный сотрудник, доцент кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-63-14
ppparfen@mail.ru

ПЕРВАДЧУК Владимир Павлович – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной математики Национального исследовательского университета «Пермский государственный технический университет».

614990 г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29
(342) 219-83-33
pervadchuk@mail.ru

ПЕТРОВ Павел Вячеславович – кандидат физико-математических наук, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26
(812) 292-73-97
pavel.petrov@gmail.com

ПЕТРУШИН Василий Сергеевич – аспирант кафедры радиоэлектроники Иркутского государственного университета.

664003 г. Иркутск, бульв. Гагарина, д. 20
(3952) 24-19-09
basil@physdep.isu.ru

ПЕТРУШИН Иван Сергеевич – кандидат технических наук, преподаватель кафедры радиоэлектроники Иркутского государственного университета.

664003 г. Иркутск, бульв. Гагарина, д. 20
(3952) 24-19-09
agrafonov@physdep.isu.ru

ПЛЕХОВА Эльвира Валентиновна – кандидат физико-математических наук, доцент Национального исследовательского университета «Пермский государственный технический университет».

614990 г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29
(342) 239-16-97
mc@pstu.ac.ru

ПОПОВ Борис Петрович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-74
borispopov45@mail.ru

РЯБОВ Виктор Германович – старший научный сотрудник кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

РЯБОВ Юрий Германович – старший научный сотрудник кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

САВОЧКИНА Анна Александровна – старший преподаватель Национального исследовательского университета «Пермский государственный технический университет».

614990 г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29
(342) 239-16-97
mc@pstu.ac.ru

САМСОНОВ Владимир Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

СЕТЕЙКИН Алексей Юрьевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической и экспериментальной физики Амурского государственного университета.

675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, д. 21
(4162) 39-46-82
seteikin@mail.ru

СМИРНОВ Дмитрий Сергеевич – студент физико-технического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 292-73-97
dsmirnov90@gmail.com

СОБОЛЕВСКИЙ Владимир Константинович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-74,
sobolevskiy@tuexp.ph.stu.neva.ru

СОЛОВЬЕВ Андрей Александрович – ассистент кафедры вычислительной техники и электроники Алтайского государственного университета.

656049, г. Барнаул, пр. Ленина, д. 61
(3852) 38-07-51
asus_work@mail.ru

СПИРИН Денис Олегович – ассистент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
ssdenis@mail.ru

СТЕПАНОВА Тамара Павловна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института высокомолекулярных соединений РАН.

199004, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., д. 31
(812) 328-85-35
t_stepanova@mail.ru

ТРУСОВ Петр Валентинович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математического моделирования систем и процессов Национального исследовательского университета «Пермский государственный технический университет».

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29
(342) 239-16-07,
tpv@matmod.pstu.ac.ru

ФАДЕЕВ Дмитрий Алексеевич – аспирант кафедры теоретической и экспериментальной физики Амурского государственного университета.

675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, д. 21
(4162) 39-46-82
fadedim@rambler.ru

ЦАПЛИН Алексей Иванович – доктор технических наук, член-корреспондент РАН, профессор, декан факультета прикладной математики и механики, заведующий кафедрой общей физики Национального исследовательского университета «Пермский государственный технический университет».

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29-а
(342) 219-82-12
tai@pstu.ru

ШУМКОВА Дарья Борисовна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики Национального исследовательского университета «Пермский государственный технический университет».

614990 г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29
(342) 219-83-40,
shumkova_darya@mail.ru

ЯНЦ Антон Юрьевич – студент Национального исследовательского университета «Пермский государственный технический университет».

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29
(342) 239-16-07
maximus5.59@gmail.com



АННОТАЦИИ

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Абдуллаев А.Р., Плехова Э.В., Савочкина А.А. РАЗРЕШИМОСТЬ КВАЗИЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ С МОНОТОННЫМ ОПЕРАТОРОМ.

Получены достаточные условия разрешимости операторного уравнения $Lx = Fx$ где $L : X \rightarrow Y$ – линейный ограниченный необратимый оператор (резонансный случай) и $F : X \rightarrow Y$ – вполне непрерывный оператор, X, Y – базаховы пространства. Теорема существования доказана в условиях монотонности вспомогательного оператора. В качестве приложения рассмотрен вопрос о разрешимости периодической краевой задачи для дифференциального уравнения второго порядка.

ОПЕРАТОРНЫЕ УРАВНЕНИЯ. РЕЗОНАНС. СУЩЕСТВОВАНИЕ РЕШЕНИЯ. МОНОТОННЫЕ ОПЕРАТОРЫ. ПЕРИОДИЧЕСКАЯ КРАЕВАЯ ЗАДАЧА.

Аграфонов Ю.В., Зеленцов Н.А., Меленчук И.А., Петрушин В.С., Петрушин И.С. МОДИФИКАЦИЯ СИНГЛЕТНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ.

Рассмотрена молекулярная система, граничащая с твердой непроницаемой поверхностью. Вычислена асимптотика двухчастичной функции распределения при большом удалении частиц от поверхности. Сформулировано уравнение для одночастичной функции распределения, которое позволяет оценить точность хорошо известного синглетного приближения.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ. ФИЗИКА ПОВЕРХНОСТИ. СИНГЛЕТНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ.

Апушкинский Е.Г., Попов Б.П., Соболевский В.К. ФЛУКСОИДНЫЕ КОЛЕБАНИЯ И ВОЛНЫ ВО ВНУТРЕННЕЙ ОБЛАСТИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ.

Предложена модель, объясняющая явление долгоживущего радиочастотного сигнала эха в сверхпроводниках, согласно которой в его формировании принимают участие два ансамбля нелинейных осцилляторов. Первый – это кристаллические решетки крупинок порошка ВТСП, в которых возникают фононные колебания, а второй – ансамбль флюксоидов. Сохранение вторым фазы колебаний позволяет наблюдать сигнал эха.

ДОЛГОЖИВУЩИЙ РАДИОЧАСТОТНЫЙ ЭХО-СИГНАЛ. ВТСП. ФЛЮКСОИДЫ. НЕЛИНЕЙНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР. ФОНОННЫЕ КОЛЕБАНИЯ.

Арсеньев Д.Г., Иванов В.М., Берковский Н.А. АДАПТИВНЫЙ МЕТОД СУЩЕСТВЕННОЙ ВЫБОРКИ ПРИ ОГРАНИЧЕННОМ ЧИСЛЕ ШАГОВ БИСЕКЦИОННОГО ПРОЦЕССА.

Адаптивный метод существенной выборки рассмотрен при ограниченном числе шагов бисекции. На примере линейной задачи оптимального оценивания демонстрируются возможности метода, проведен подробный анализ результатов.

АДАПТИВНОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО. СУЩЕСТВЕННАЯ ВЫБОРКА. ОПТИМАЛЬНОЕ ОЦЕНИВАНИЕ.

Бакаев А.В., Журкин Е.Е. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В КАРБИДЕ КРЕМНИЯ ПРИ БОМБАРДИРОВКЕ ИОНАМИ И КЛАСТЕРАМИ УГЛЕРОДА.

Представлены результаты исследования характеристик низкоэнергетической имплантации ионов, кластеров и фуллеренов C_N ($N = 1; 5; 60$) в карбид кремния. Произведен анализ пространственного распределения пробегов внедренных атомов, исследованы особенности дефектообразования в приповерхностной области бомбардируемой мишени в зависимости от размера налетающего кластера.

ИМПЛАНТАЦИЯ. КЛАСТЕРЫ. ПРОБЕГИ. ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Бердников Я.А., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Самсонов В.М. РОЖДЕНИЕ ϕ -МЕЗОНОВ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР ДЕЙТЕРИЯ И ЗОЛОТА ПРИ ЭНЕРГИИ 200 ГэВ.

Представлены результаты измерения спектров рождения и факторов ядерной модификации ϕ -мезонов в $(d + Au)$ -столкновениях при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ. Произведено сравнение факторов ядерной модификации R_{dA} , измеренных для ϕ -, π^0 -мезонов и протонов при указанных условиях.

КВАРК-ГЛЮОННАЯ ПЛАЗМА. МЕЗОНЫ. РОЖДЕНИЕ. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ. АНАЛИЗ.

Галль Л.Н., Галль Н.Р. КОЛЛЕКТИВНЫЕ ПРОЦЕССЫ В БИОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ.

Рассмотрены коллективные процессы в молекулярных ячейках, образуемых биополимерами живой клетки. Показано, что причина таких процессов – в единстве системы биологической молекулы и воды в живом организме. Эта система удерживается энергетическими полями в состоянии относительного устойчивого неравновесия; состояние сохраняется только при потреблении внешней энергии. Сформулировано определение молекулярной ячейки.

НЕЛИНЕЙНЫЕ ПРОЦЕССЫ. СОЛИТОН. ВОДА. ФРАКТАЛ. СПИНОВОЕ ЭХО. БИОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ. МОЛЕКУЛЯРНАЯ ЯЧЕЙКА.

Голубева И.А., Ланкин С.В., Ванина Е.А., Киселёва А.Н. ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ЗАКАЛКИ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИЧЕСКИХ ОКСИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ.

Исследованы корундовые керамические диэлектрики, подверженные термической закалке. Определены значения энергии активации электропроводности до и после термической обработки керамических образцов. Рассмотрены частотные зависимости диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь закаленных образцов.

ТЕРМИЧЕСКАЯ ЗАКАЛКА. КЕРАМИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ. ЭНЕРГИЯ АКТИВАЦИИ.

Жгутов В.М. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, АЛГОРИТМ ИССЛЕДОВАНИЯ И АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ РЕБРИСТЫХ ОБОЛОЧЕК С УЧЕТОМ ПОЛЗУЧЕСТИ МАТЕРИАЛА ПРИ КОНЕЧНЫХ ПРОГИБАХ.

Предложены математические модели деформирования и алгоритм исследования устойчивости ребристых оболочек при совместном учете геометрической нелинейности и иных факторов. Показано, что ползучесть материала значительно влияет на снижение критической нагрузки, найденной при упругом поведении материала.

РЕБРИСТЫЕ ОБОЛОЧКИ. ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ НЕЛИНЕЙНОСТЬ. ПОЛЗУЧЕСТЬ. УСТОЙЧИВОСТЬ. СНИЖЕНИЕ КРИТИЧЕСКОЙ НАГРУЗКИ.

Ильин Н.В., Кизеветтер Д.В. МЕТОД ВОЗБУЖДЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ВИХРЕЙ В ГРАДИЕНТНЫХ ВОЛОКОННЫХ СВЕТОВОДАХ.

Рассмотрена методика возбуждения оптических вихрей в волоконных световодах сфокусированным лазерным пучком. Описан способ выявления оптических вихрей и приведены результаты экспериментальных исследований.

ВОЛОКОННЫЙ СВЕТОВОД. ОПТИЧЕСКИЙ ВИХРЬ. СПЕКЛ-СТРУКТУРА. ДИФРАКЦИЯ. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ. ЛАЗЕРНЫЙ ПУЧОК.

Иордан В.И., Соловьев А.А. РЕДУКЦИЯ ТЕМПЕРАТУРНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ ГЕТЕРОГЕННЫХ ПОТОКОВ МЕТОДОМ «ОБРАЩЕНИЯ» ИХ ИНТЕГРАЛЬНОГО ТЕПЛОВОГО СПЕКТРА.

Рассмотрены проблемы, связанные с применением методов спектральной пирометрии при напылении покрытий. Изложен принцип работы системы регистрации интегрального теплового спектра излучения частиц гетерогенных потоков. Предложен метод редукции температурного распределения частиц и показана его перспективность для исследования процессов напыления покрытий.

НАПЫЛЕНИЕ ПОКРЫТИЙ. ИНТЕГРАЛЬНЫЙ ТЕПЛОВОЙ СПЕКТР. ГЕТЕРОГЕННЫЙ ПОТОК. РЕДУКЦИЯ. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ.



Кафидова Г.А., Мокрова Д.В. ВОЗМОЖНОСТИ НЕКОНТАКТНОЙ РЕГИСТРАЦИИ ПУЛЬСОВОЙ ВОЛНЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫМ СПЕКЛ-ДАТЧИКОМ.

Рассматриваются возможности неконтактной регистрации пульсовой волны человека *in vivo* методом оптики спеклов. Реализация неконтактного высокочувствительного датчика осуществлена по дифференциальной схеме. Разработана и успешно испытана схема датчика, на основе которой построена лабораторная модель; выполнены натурные измерения.

СПЕКЛ. ИНТЕРФЕРОМЕТР. ПУЛЬСОВАЯ ВОЛНА. ПУЛЬСОМЕТРИЯ. ДАТЧИК. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ СХЕМА.

Краснов А.В., Парфенов В.А. ИСТОЧНИК ПИТАНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ЛАЗЕРНЫХ ДИОДОВ.

Рассмотрены вопросы, возникающие при разработке источников питания полупроводниковых лазерных диодов, используемых для накачки активных сред твердотельных лазеров. Разработан источник питания, отличающийся малыми габаритами и энергопотреблением и ориентированный на работу с диодами накачки разной мощности.

ЛАЗЕРНЫЙ ДИОД. ТВЕРДОТЕЛЬНЫЙ ЛАЗЕР. ИСТОЧНИК ПИТАНИЯ. НАКАЧКА АКТИВНЫХ СРЕД. ЭНЕРГОПОТРЕБЛЕНИЕ.

Масловская А.Г., Ванина Е.А. УПОРЯДОЧЕННОЕ ДВИЖЕНИЕ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ СЕГНЕТО-ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ В НЕОДНОРОДНОМ ТЕПЛОВОМ ПОЛЕ.

Предложена модель равновесной конфигурации и динамики доменной границы сегнетоэлектриков в неоднородном тепловом поле. Статистическое моделирование основано на реализации метода Монте-Карло. Обнаружены элементы самоупорядоченности движения, проявляющиеся в возникновении коррелированных автоколебаний скорости и энтропии.

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК. ДОМЕННАЯ ГРАНИЦА. ТЕПЛОВОЕ ПОЛЕ. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО. МОДЕЛЬ. УПОРЯДОЧЕНИЕ.

Первадчук В.П., Шумкова Д.Б. ОПТИМАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ В ЗАДАЧАХ С ПОДВИЖНЫМ ТЕПЛОВЫМ ИСТОЧНИКОМ.

Рассматривается задача математического моделирования процессов управления системами с подвижными тепловыми источниками. Изучен процесс вытяжки в производстве оптического волокна. Формулируется нелинейная задача об оптимальном управлении мощностью теплового источника; доказывается теорема существования решения; для решения задачи определения скорости теплового источника используется метод градиентного спуска.

ОПТИМАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ. РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ СИСТЕМЫ. ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОС. ПОДВИЖНЫЙ ТЕПЛОВОЙ ИСТОЧНИК.

Смирнов Д.С., Петров П.В. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ В ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ПРИМЕСЕЙ.

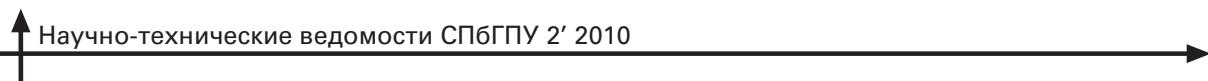
Исследованы состояния в верхней зоне Хаббарда в слабо легированных квантовых ямах, для чего с помощью алгоритма Метрополиса были численно промоделированы плотности всех состояний валентной зоны в зависимости от температуры для произвольных параметров квантовой ямы. Результаты вычислений качественно соответствуют известным температурным зависимостям спектров фотолюминесценции и проводимости в подобных структурах.

КВАНТОВАЯ ЯМА. ВЕРХНЯЯ ЗОНА ХАББАРДА. АЛГОРИТМ МЕТРОПОЛИСА. ДВУМЕРНАЯ СИСТЕМА.

Спирин Д.О., Бердников Я.А., Гавриш Ю.Н. ПРИНЦИПЫ ИНТРОСКОПИИ КРУПНОГАБАРИТНЫХ ГРУЗОВ.

Рассматриваются физические и технические принципы построения досмотрового радиометрического комплекса для интроскопии крупногабаритных грузов. Представлены результаты испытаний на тестовых объектах и показаны основные преимущества перед зарубежными аналогами.

ИНТРОСКОПИЯ. МЕТОД ДУАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ. ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. БЕТАТРОН.



Степанова Т.П., Артамонова А.С., Капралова В.М. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И КОНФОРМАЦИЯ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ПОЛИ- γ -БЕНЗИЛ-L-ГЛУТАМАТА И ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА В РАЗБАВЛЕННОМ РАСТВОРЕ.

Исследована статическая диэлектрическая поляризация блок-сополимеров поли- γ -бензил-L-глутамата и полиметилметакрилата в растворе в хлороформе. Определена конформация макромолекул блок-сополимеров в растворе и показана ее зависимость от молекулярной массы блока полиметилметакрилата.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ. ДИПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ. БЛОК-СОПОЛИМЕР. ПОЛИПЕТИД. ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТ. КОНФОРМАЦИЯ.

Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. ОПИСАНИЕ ВНУТРИЗЕРЕННОГО И ЗЕРНОГРАНИЧНОГО УПРОЧНЕНИЯ МОНО- И ПОЛИКРИСТАЛЛОВ.

Рассмотрены вопросы описания упрочнения моно- и поликристаллов как часть более широкой проблемы описания эволюции микро- и мезоструктуры материала в процессах пластического деформирования. Предложен вид дополнительных слагаемых в законе упрочнения, описывающих явления аннигиляции дислокаций, взаимодействия расщепленных дислокаций и взаимодействия дислокаций с границами зерен.

ЗАКОН УПРОЧНЕНИЯ. ФИЗИЧЕСКИЕ ТЕОРИИ. ВНУТРЕННИЕ ПЕРЕМЕННЫЕ. ГРАНИЦЫ ЗЕРЕН. АННИГИЛЯЦИЯ ДИСЛОКАЦИЙ. БАРЬЕРЫ ЛОМЕРА-КОТТРЕЛЛА.

Фадеев Д.А., Сетейкин А.Ю. АНАЛИЗ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕДАХ С ПРОСТРАНСТВЕННЫМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ.

Методом Монте-Карло смоделировано распространение лазерного излучения в многослойной биологической среде. Рассмотрена зависимость плотности поглощенной энергии в объеме биообъекта от оптических и геометрических параметров неоднородности.

МНОГОСЛОЙНАЯ БИОЛОГИЧЕСКАЯ СРЕДА. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО. НЕОДНОРОДНОСТЬ. ОПТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ. МНОГОКРАТНОЕ РАССЕЯНИЕ.

Цаплин А.И., Бояршинов М.Г. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА МЕТАНА В АТМОСФЕРЕ И ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ЕГО ДЕТОНАЦИИ ПРИ АВАРИЙНОМ СБРОСЕ ДАВЛЕНИЯ В ГАЗОПРОВОДЕ.

Предложена математическая модель, описывающая механизм формирования воздушно-метановых образований в атмосфере. Даны оценка мощности источника выброса метана, вызывающая детонацию на высотах выше 500 м, подтверждающая возможность объемного взрыва при воспламенении воздушно-метанового облака молнией или другими источниками высокой температуры.

КРАЕВАЯ ЗАДАЧА. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. МЕТОД ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ. ВОЗДУШНО-МЕТАНОВАЯ СМЕСЬ.

Цаплин А.И., Никулин И.Л. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ РЕЖИМОВ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЛОПАТОК ГАЗОТУРБИННЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ.

Статья посвящена совершенствованию технологии направленной кристаллизации монокристаллических отливок. Изложены результаты вычислительных экспериментов, моделирующих формирование отливки при нестационарных режимах охлаждения, даны рекомендации по применению вычислительного эксперимента для rationalизации режимов направленной кристаллизации монокристаллических лопаток газотурбинных двигателей.

ГАЗОТУРБИННЫЙ ДВИГАТЕЛЬ. МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ ЛОПАТКА. НАПРАВЛЕННАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ. НЕСТАЦИОНАРНЫЙ РЕЖИМ. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.



ABSTRACTS

KEY WORDS

Abdullaev A.R., Plekhova E.V., Savochkina A.A. THE SOLVABILITY OF QUASILINEAR EQUATION WITH MONOTONE OPERATOR.

The paper is devoted to the study of the solvability of the operator equation $Lx = Fx$, where $L : X \rightarrow Y$ – the linear limited noninvertible operator (resonance case) and $F : X \rightarrow Y$ – completely continuous operator; X, Y – Banach spaces. The existence theorem is proved in the conditions of the monotony of an auxiliary operator. To illustrate the developed approach, a solvability of a periodic boundary value problem for the second order differential equation is considered.

OPERATOR EQUATIONS. RESONANCE. EXISTENCE OF SOLUTION. MONOTONE OPERATORS. PERIODIC BOUNDARY VALUE PROBLEM.

Agrafonov Yu.V., Zelentsov N.A., Melenchuk I.A., Petrushin V.S., Petrushin I.S. THE SINGLET APPROACH ADAPTATION OF THE STATISTICAL THEORY OF SURFACE PHENOMENA.

A molecular system bordering on a hard impenetrable surface has been considered. The asymptotic value of the two-particle distribution function was calculated provided the particles were well off the surface. A new equation for one-particle distribution function was stated. That enabled to estimate the precision for the well known singlet approximation.

MOLECULAR DISTRIBUTION FUNCTIONS. SURFACE PHYSICS. SINGLET APPROACH. STATISTICAL THEORY.

Apushkinskiy E.G., Popov B.P., Sobolevskiy V.K. THE FLUXOID OSCILLATIONS AND WAVES IN THE INTERIOR SPACE OF THE HTSC.

The model explaining the phenomenon of a long-living radio-frequency echo-signal in superconductors according to which two ensembles of nonlinear oscillators take part in its formation has been offered. The first one is crystal lattices of grains of HTSC powder in which arise phonon fluctuations, and the second one is – fluxoid ensemble. Preservation of a phase of fluctuations by the second one allows to observe an echo-signal.

LONG-LIVING RADIO-FREQUENCY ECHO-SIGNAL. HTSC. FLUXOID. NONLINEAR OSCILLATOR. PHONON OSCILLATIONS.

Arseniev D.G., Ivanov V.M., Berkovskiy N.A. AN ADAPTIVE IMPORTANCE SAMPLING METHOD WITH THE BOUNDED STEP NUMBER OF THE BISECTION PROCESS.

The adaptive importance sampling method is considered on the condition that the number of the bisection process steps is bounded. The potentialities of the method are illustrated by the approximate solution of the linear filtering problem. Detailed analysis of the results is made.

ADAPTIVE INTEGRATION. MONTE-CARLO METHOD. IMPORTANCE SAMPLING. FILTERING PROBLEM.

Bakaev A.V., Zhurkin E.E. A SIMULATION OF PRIMARY RADIATION DEFECTS IN SILICON CARBIDE BOMBARDED BY CARBON IONS AND CLUSTERS.

Characteristics of low-energy implantation of ions, clusters and fullerenes C_N ($N = 1, 5, 60$) in silicon carbide have been presented. An analysis of the spatial distribution of the ranges of implanted atoms and features of defect production in the subsurface area of bombarded target versus the incident cluster size were carried out.

IMPLANTATION. CLUSTERS. RANGES. DEFECT PRODUCTION. COMPUTER SIMULATION.

Berdnikov Ya.A., Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Riabov V.G., Riabov Yu.G., Samsonov V.M. PHI-MESON PRODUCTION IN DEUTERIUM AND GOLD NUCLEI COLLISIONS AT $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV.

Phi-meson resulting spectra and nuclear modification factors measured in $d + \text{Au}$ collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV have been presented. A comparison with nuclear modification factors measured for phi-mesons, neutral pions and protons was carried out under such conditions.

QUARK-GLUON PLASMA. MESONS. PRODUCTION. COLLISION. ANALYSIS.

Fadeev D.A., Seteikin A.Yu. AN ANALYSIS OF THE MULTIPLE SCATTERING OF LASER EMISSION IN BIOLOGICAL ENVIRONMENTS OF OPTICAL PARAMETERS FLUCTUATED SPATIALLY.

A distribution of laser emission in the multilayered biological environment is simulated by the Monte-Carlo method. The density of the energy absorbent in the biological body was considered as a function of optical and geometrical parameters of heterogeneity.

MULTILAYERED BIOLOGICAL ENVIRONMENT. MONTE-CARLO METHOD. HETEROGENEITY. OPTICAL PARAMETERS. MULTIPLE SCATTERING.

Gall L.N., Gall N.R. COLLECTIVE PROCESSES IN THE BIO-MOLECULAR SYSTEMS.

Collective processes in the molecular units being produced by bio-polymers of a living cell have been considered. The reason for such processes has been shown to be the unity of the system of both a biological molecule and some water in a living organism. This system is being held by energy fields in a state of relatively stable nonequilibrium; the state can conserve only while consuming external energy. The molecular unit definition is phrased.

NONLINEAR PROCESSES. SOLITONE. WATER. FRACTAL. SPIN ECHO. BIO-MOLECULAR SYSTEMS. MOLECULAR UNIT.

Golubeva I.A., Lankin S.V., Vanina E.A. Kiselyova A.N. THE INFLUENCE OF HEAT TREATMENT ON DIELECTRIC PROPERTIES OF CERAMIC OXIDE MATERIALS.

Alumina ceramic dielectrics were investigated after thermal treatment. Activation energy values of conductivity were obtained before and after heat treatment of ceramics samples. The frequency dependences of permittivity and dielectric loss for hardened samples were considered.

THERMAL TRAINING. CERAMIC MATERIALS. DIELECTRIC PERMITTIVITY. ACTIVATION ENERGY.

Il'in N.V., Kiesewetter D.V. METHOD OF OPTICAL VORTICES EXCITATION IN GRADED INDEX OPTICAL FIBERS.

The technique of optical vortices excitation in optical fibers by focused laser beam is considered. The method of detection of optical vortices is described. The results of experimental investigation are presented.

OPTICAL FIBER. OPTICAL VORTEX. SPECKLE-STRUCTURE.

Jordan V.I., Soloviev A.A. THE REDUCTION OF TEMPERATURE PARTICLES DISTRIBUTION OF HETEROGENEOUS FLOWS BY «THE INVERSE» OF THEIR INTEGRATED THERMAL SPECTRUM.

The problems connected with application of spectral pyrometry methods at a spraying of coatings are considered. The principle of operation of system of registration of an integrated thermal spectrum of particles radiation in heterogeneous flows is described. The method of a reduction of temperature particles distribution is offered and its perspectivity on research of processes at a spraying of coatings is shown.

THE SPRAYING OF COATINGS. THE INTEGRATED THERMAL SPECTRUM. THE HETEROGENEOUS FLOW. REDUCTION. DISTRIBUTION.

Kafidova G.A., Mokrova D.V. SOME POSSIBILITIES OF NONCONTACT PULSE WAVES RECORDING WITH THE DIFFERENTIAL SPECKLE-SENSOR.

Some possibilities of noncontact pulse waves measurements of a person *in vivo* using laser speckle methods have been considered. The realisation of noncontact high-sensitive sensor was carried out by the differential scheme. The laboratory model was developed and tested, and natural measurements were taken.

SPECKLE. INTERFEROMETER. PULSE WAVE. HEART RATE MONITORING. SENSOR. DIFFERENTIAL SCHEME.



Krasnov A.V., Parfenov V.A. SEMICONDUCTOR LASER DIODES POWER SUPPLY.

Some practical issues regarding the development of power supplies of semiconductor laser diodes used for pumping the active media of solid-state lasers have been considered. Power supply which has small sizes and low power consumption and can be used for work with diodes of various output power was worked out.

LASER DIODE. SOLID-STATE LASER. POWER SUPPLY. PUMPING OF ACTUATING MEDIA. POWER CONSUMPTION.

Maslovskaya A.G., Vanina E.A. THE ORDERED MOTION OF FERROELECTRIC CRYSTAL DOMAIN WALLS IN THE NONUNIFORM THERMAL FIELD.

A statistical model of a ferroelectric domain wall in the nonuniform thermal field is considered. The simulation is based on Monte-Carlo method. The system exhibits a self-oscillations behavior. Both a velocity and a rate of disorder of the wall show correlated oscillations during the wall drift toward the temperature gradient.

FERROELECTRIC. DOMAIN BOUNDARY. THERMAL FIELD. MONTE-CARLO METHOD. MODEL. ORDERING.

Pervadchuk V.P., Shumkova D.B. AN OPTIMAL CONTROL IN THE PROBLEMS WITH A MOBILE THERMOSOURCE.

The problem of mathematical simulation of managerial processes by systems with mobile thermal sources is considered. Process of an extract in manufacture of an optical fiber is investigated. The nonlinear problem about optimum control of capacity of a thermal source is formulated, the theorem of existence of the decision is proved, and the gradient method release is used.

OPTIMAL CONTROL. DISTRIBUTED SYSTEMS. HEAT TRANSFER. MOBILE THERMOSOURCE.

Smirnov D.S., Petrov P.V. THE STATES DENSITY SIMULATION IN 2D-SYSTEM OF CHARGED IMPURITIES.

The states in the upper Hubbard band in lightly doped quantum wells have been studied. To do this, the density of states of the valence-band was numerically simulated depending on the temperature for arbitrary parameters of the QW, using the Metropolis algorithm. The results were in qualitative agreement with the temperature dependence of photoluminescence spectra and conductance in such structures.

QUANTUM WELL. UPPER HUBBARD BAND. METROPOLIS ALGORITHM. 2D-SYSTEM.

Spirin D.O., Berdnikov Ya.A., Gavriš Yu.N. SOME CONCEPTS OF LARGE-SIZE CARGOES RADIOSCOPY.

Some physical and technical principles of customs radiometric complex construction for large-size cargoes radioscopy have been considered. Tests results for objects examination were presented and advantages over foreign analogues were shown.

RADIOSCOPY. DUAL-ENERGY METHOD. BREMSSTRAHLUNG. BETATRON.

Stepanova T.P., Artamonova A.S., Kapralova V.M. DIELECTRIC PROPERTIES AND CONFORMATION OF POLY- γ -BENZYL-L-GLUTAMATE AND POLYMETHYLMETHACRYLATE BLOCK-COPOLYMERS IN DILUTE SOLUTION.

Static dielectric polarization of poly- γ -benzyl-L-glutamate and polymethylmethacrylate block-copolymers in dilute chloroform solutions has been investigated. Macromolecular conformation of block-copolymers is shown to be dependent on molecular mass of the polymethylmethacrylate block.

DIELECTRIC PERMITTIVITY. DIPOLE MOMENT. BLOCK-COPOLYMER. POLYPEPTIDE. POLYMETHYLMETHACRYLATE. CONFORMATION.

Trusov P.V., Volegov P.S., Yantz A.Yu. A DESCRIPTION OF INTRAGRAINED AND INTERGRANULAR HARDENING IN MONO- AND POLYCRYSTALS.

The problem of the hardening description of mono- and polycrystals as a part of widely materials micro- and mesostructure evolution on plastic deformation describing problem has been considered. New additional summand to hardening law which describe annihilation, splitting dislocation interaction and grain boundaries dislocation interactions was proposed.

HARDENING LAW. CRYSTAL PLASTICITY. INTERNAL VARIABLES. GRAIN BOUNDARIES. DISLOCATION ANNIHILATION. LOMER-COTTRELL BARRIERS.



Tsaplin A.I., Boyarshinov M.G. A SIMULATION OF METHANE TRANSFER IN THE ATMOSPHERE AND AN ESTIMATION OF ITS DETONATION OPPORTUNITY WHEN JETTISONING PRESSURE IN THE GAS PIPELINE.

A mathematical model describing a mechanism of air-methane clouds forming in the atmosphere has been suggested. Minimum intensity of methane ejection from gas pipeline emergency valve that makes explosion enable at a height of over 500 m was estimated. This estimation confirms possibility of space explosion as a result of air-methane mixture ignition by lightning or other sources of high temperature.

BOUNDARY-VALUE PROBLEM. COMPUTATIONAL SIMULATION. GEOMETRICAL DECOMPOSITION METHOD. AIR-METHANE MIXTURE.

Tsaplin A.I., Nikulin I.L. MATHEMATICAL SIMULATION OF NONSTATIONARY HARDENING PROCESS OF TURBINE ENGINES SINGLE CRYSTAL BLADES.

The present paper is devoted to a perfection of the single crystal ingots directed crystallization technology. The results of computing experiments simulating a casting formation at nonstationary cooling modes are stated. The recommendations about computing experiment application aiming rationalization of turbine engines single crystal blades directed crystallization modes are made.

TURBINE ENGINE. SINGLE CRYSTAL BLADE. DIRECTED CRYSTALLIZATION. NONSTATIONARY MODE. MATHEMATICAL SIMULATION.

Zhgoutov V.M. MATHEMATICAL MODELS, THE RESEARCH ALGORITHM AND THE RIBBED SHELLS STEADINESS ANALYSIS TAKING INTO ACCOUNT THE CREEPING OF THE MATERIAL AT FINITE BENDING FLEXURES.

The mathematical deformation models and the algorithm of the ribbed shells research with joint geometrical nonlinearity and other factors accounting are proposed. It is shown, that the creeping of the material has a great impact on the decrease of the critical load estimated during the elastic behavior of the material.

RIBBED SHELLS. GEOMETRICAL NONLINEARITY. CREEPING. STEADINESS. DECREASE OF THE CRITICAL LOAD.

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ СПбГПУ

№ 2 (98) 2010

Серия “Физико-математические науки”

Учредитель – Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
Издание зарегистрировано в Госкомпечати РФ, свидетельство № 013165 от 23.12.94

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. Яицуржинская* – научный редактор, корректор
Н.А. Бушманова – технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *Н.А. Дубовской*

Директор Издательства Политехнического университета *А.В. Иванов*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 12.07.10. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 19,995. Уч.-изд. л. 19,995. Тираж 1000. Заказ 300.

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет.
Издательство Политехнического университета,
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России.
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ в журнале “Научно-технические ведомости СПбГПУ”

1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал “Научно-технические ведомости СПбГПУ” является периодическим печатным научным рецензируемым журналом. Он зарегистрирован в Госкомпечати РФ, свидетельство № 013165 от 23.12.94 и распространяется по подписке Агентства “Роспечать”, индекс 18390.

Журнал с 2002 года входит в Перечень ведущих научных 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 семи научным направлениям: ЭКОНОМИКА; УПРАВЛЕНИЕ, ИНФОРМАТИКА, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА; ФИЗИКА; ЭНЕРГЕТИКА; МАШИНОСТРОЕНИЕ; МЕТАЛЛУРГИЯ; РАДИОТЕХНИКА И СВЯЗЬ, ЭЛЕКТРОНИКА, ИЗМЕРИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА.

Периодичность выхода журнала — 4 номера в год.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Объем статей, как правило, не должен превышать 20 страниц формата А4. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать 4-х человек.

2. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word, формулы набираются в редакторе MS Equation. 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 иметь меньший кегль шрифта.

Параметры страницы: слева — 3 см, сверху и снизу — 2,5 см, справа — 2,0 см, текст размещается без переносов. Абзацный отступ — 1,0 см.

3. Рисунки (в формате .tif, .bmp, .jpeg) и таблицы оформляются в виде отдельных файлов. Количество рисунков и фотографий не должно превышать шести, таблиц — четырех.

4. В формульном редакторе (как и в основном тексте) переменные, обозначенные латинскими символами, набираются курсивом; цифры, греческие и русские символы — прямые.

Химические символы (Ag, Cu) — светлые прямые.

Сокращенные обозначения физических величин и единиц измерения (м, кВт, м/с, В/м) — светлые прямые без точек. Названия функций (sin, tg, min, const, log, exp и т. д.) — светлые прямые.

В числах десятичным разделителем является запятая.

Размеры шрифтов в формулах:

основной размер — 11, крупный индекс — 8, мелкий индекс — 6, крупный символ — 14, мелкий символ — 11.

В связи с версткой сборника в две колонки перенос длинных формул выполняется так, чтобы ширина каждой строки не превышала ширину колонки (8 см).

5. Редакция кроме бумажного издания журнала организует формирование полнотекстовых электронных версий статей журнала, доступных для подписчиков.

2.2. Вместе с материалами статьи должны быть обязательно предоставлены:

- номер УДК в соответствии с классификатором (в заголовке статьи);
- аннотация статьи (2-3 предложения) на русском и английском языках;
- ключевые слова статьи (5-7) на русском и английском языках;
- сведения об авторах, включающие ФИО автора, место его работы, должность, ученое звание, ученую степень, контактные телефоны, E-mail;
- лицензионный договор, регламентирующий электронное представление материалов;
- рекомендация на имя главного редактора серии журнала, подписанная научным руководителем автора и/или руководителем подразделения. Рекомендация должна быть ОБЯЗАТЕЛЬНО заверена в отделе кадров.
- рецензия на имя главного редактора серии журнала, подписанная специалистом, имеющим ученую степень доктора наук и/или ученое звание профессора. Рецензия должна быть ОБЯЗАТЕЛЬНО заверена в отделе кадров. Рецензент несет ответственность за содержание статьи, достоверность представленных материалов.
- акт экспертизы о возможности опубликования материалов в открытой печати.

2.3. Предоставление материалов

Предоставление всех материалов осуществляется по электронной почте на адрес редакции E: mail physics@spbstu.ru

2.4. Рассмотрение материалов

Представленные редакционному комитету 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, требований оформления или не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

Публикация материалов аспирантов осуществляется бесплатно.

Более подробную информацию можно получить по телефону/факсу редакции

тел./факс (812) 294-22-85, 552-62-16 с 10⁰⁰ до 18⁰⁰ час. - Наталья Александровна,

Виктория Маратовна или E-mail: physics@spbstu.ru